Transport en milieu poreux
Elements Finis Discontinus

J. Erhel - INRIA-RENNES

Thèse de H. Hoteit

Chaire UNESCO - Calcul numérique intensif

TUNIS - Mars 2004

Transport en milieu poreux

Convection-diffusion, Conditions aux limites

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \underbrace{\nabla.(D.\nabla C)}_{diffusion} - \underbrace{\nabla.(Cu)}_{convection} \qquad \text{sur} \qquad \Omega \times (0,T),$$

$$C(x,0) = C_0(x) \qquad \text{sur} \qquad \Omega,$$

$$C(x,t) = C^D(x,t) \qquad \text{sur} \qquad \Gamma^D \times (0,T),$$

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial n} = Q^N(x,t) \qquad \text{sur} \qquad \Gamma^N \times (0,T),$$

où

- C : Concentration en soluté
- u : vitesse de Darcy
- D : tenseur de diffusion/dispersion

Discrétisation spatiale du terme convectif

Éléments finis discontinus

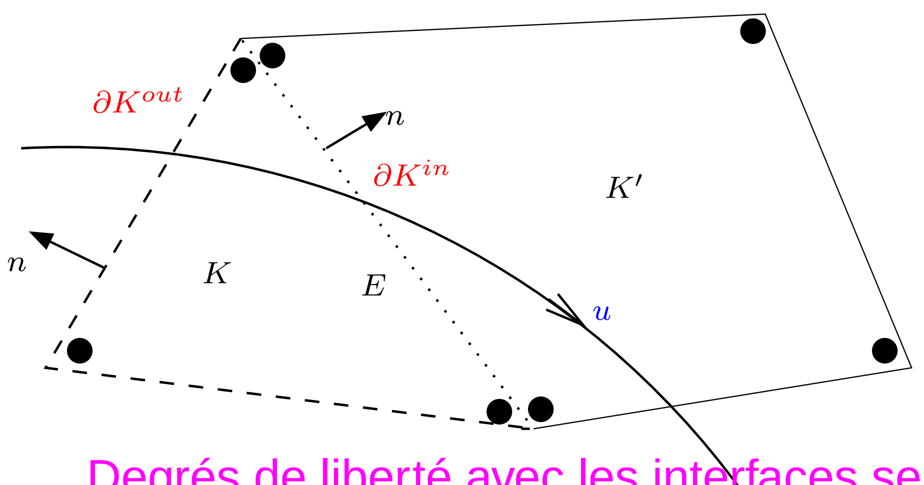
- la masse est conservée localement
- les fronts et les discontinuités sont bien capturés
- faible dispersion numérique
- maillages non structurés en 2D ou 3D
- calculs locaux, pas de système linéaire global.

Eléments Finis Discontinus

Espace d'approximation

$V_h = \{v \in L^\infty(\Omega) : v_h|_K \in V(K),\ \forall K \in \mathcal{T}_h\}$,

où $V(K)$ est l'espace des fonctions linéaires (resp. bilinéaires) sur K si K est un triangle (resp. quadrangle).



Degrés de liberté avec les interfaces selon les flux

Eléments Finis Discontinus

L'approximation C_h de C est exprimée par :

$$C_h(x,t) \equiv C_h(x,t)|_K = \sum_{j=1}^{\mathcal{N}_K} C_{K,j}(t)\varphi_{K,j}(x) \quad K \in \mathcal{T}_h.$$

Trouver $C_h|_K \in V(K), \quad K \in \mathcal{T}_h$ tel que :

$$\sum_{j=1}^{\mathcal{N}_K} \frac{dC_{K,j}}{dt} \int_K \varphi_{K,i}\varphi_{K,j}\, dx = -\sum_{j=1}^{\mathcal{N}_K} \Big(C_{K,j} \int_K \varphi_{K,j} u.\nabla\varphi_{K,i}\, dx$$

$$+ C^{in}_{K,j} \int_{\partial K^{in}} \varphi_{K,i}\varphi_{K,j} u.n\, d\ell + C^{out}_{K,j} \int_{\partial K^{out}} \varphi_{K,i}\varphi_{K,j} u.n\, d\ell \Big) \quad i = 1, \mathcal{N}_K$$

Discrétisation temporelle

La méthode des EFD conduit à résoudre sur chaque K, le système :

$$\frac{dC_K}{dt} = \mathcal{A}(C_K^{in}, C_K^{out}), \qquad C_K = \{C_{K,i}\}_{i=1,\ldots,\mathcal{N}_K}$$

Discrétisation temporelle

1. Calcul de $\widetilde{C}_K^{n+1}$ en résolvant les systèmes :

$$\widetilde{C}_K^{n+1} = C_K^n + \Delta t \mathcal{A}(C_K^{in,n}, C_K^{out,n}), \qquad \forall K \in \mathcal{T}_h.$$

2. Calcul de C_K^{n+1} en stabilisant la solution $\widetilde{C}_K^{n+1}$:

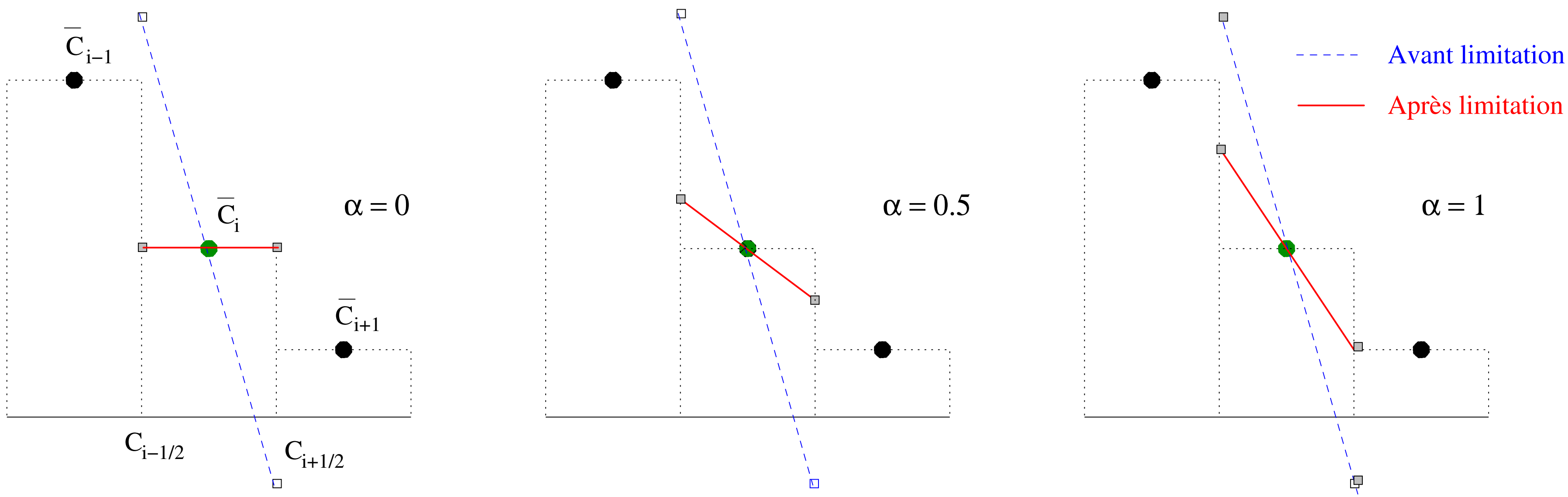
$$C_K^{n+1} = \mathcal{L}(\widetilde{C}_K^{n+1}), \qquad \forall K \in \mathcal{T}_h.$$

où $\widetilde{C}_K^{n+1}$ sont les concentrations avant la reconstruction.

L'opérateur $\mathcal{L}$ est le limiteur de pente.

Limitation de pente

La méthode EFD est inconditionnellement instable sans limitation (sans ,avec) :



Limitation de pente

Limitation de pente

Trouver $C_i = (C_{i-1/2}, C_{i+1/2}) = \mathcal{L}(\widetilde{C}_i)$ tel que

1. Conservation de la masse, $\overline{C}_i = \frac{1}{2}(C_{i-1/2} + C_{i+1/2})$.

Limitation de pente

Trouver $C_i = (C_{i-1/2}, C_{i+1/2}) = \mathcal{L}(\widetilde{C}_i)$ tel que

1. Conservation de la masse, $\overline{C}_i = \frac{1}{2}(C_{i-1/2} + C_{i+1/2})$.
2. Interdiction de minimum ou maximum locaux,
   $\forall \alpha \in [0, 1]$:

$$
\begin{aligned}
(1-\alpha)\overline{C}_i + \alpha \min(\overline{C}_{i-1}, \overline{C}_i) &\leq C_{i-1/2} \leq & (1-\alpha)\overline{C}_i + \alpha \max(\overline{C}_{i-1}, \overline{C}_i) \\
(1-\alpha)\overline{C}_i + \alpha \min(\overline{C}_i, \overline{C}_{i+1}) &\leq C_{i+1/2} \leq & (1-\alpha)\overline{C}_i + \alpha \max(\overline{C}_i, \overline{C}_{i+1}).
\end{aligned}
$$

Limitation de pente

Trouver $C_i = (C_{i-1/2}, C_{i+1/2}) = \mathcal{L}(\widetilde{C}_i)$ tel que

1. Conservation de la masse, $\overline{C}_i = \frac{1}{2}(C_{i-1/2} + C_{i+1/2})$.
2. Interdiction de minimum ou maximum locaux,
   $\forall \alpha \in [0,1]$:

$$\begin{aligned}
(1-\alpha)\overline{C}_i + \alpha \min(\overline{C}_{i-1}, \overline{C}_i) &\leq C_{i-1/2} \leq & (1-\alpha)\overline{C}_i + \alpha \max(\overline{C}_{i-1}, \overline{C}_i) \\
(1-\alpha)\overline{C}_i + \alpha \min(\overline{C}_i, \overline{C}_{i+1}) &\leq C_{i+1/2} \leq & (1-\alpha)\overline{C}_i + \alpha \max(\overline{C}_i, \overline{C}_{i+1}).
\end{aligned}$$

3. Modification minimale des pentes :
   $\|C_i - \widetilde{C}_i\|_2$ est minimal.

Limitation de pente

Ce limiteur peut aussi être réécrit en utilisant une autre forme plus courante :

$$
\begin{aligned}
C_{i-1/2} &= \overline{C}_i - \mathcal{M}\left(\overline{C}_i - \widetilde{C}_{i-1/2},\, \alpha(\overline{C}_i - \overline{C}_{i-1}),\, \alpha(\overline{C}_{i+1} - \overline{C}_i)\right), \\
C_{i+1/2} &= \overline{C}_i + \mathcal{M}\left(\widetilde{C}_{i+1/2} - \overline{C}_i,\, \alpha(\overline{C}_i - \overline{C}_{i-1}),\, \alpha(\overline{C}_{i+1} - \overline{C}_i)\right).
\end{aligned}
$$

où $\mathcal{M}$ est la fonction $minmod$, définie par :

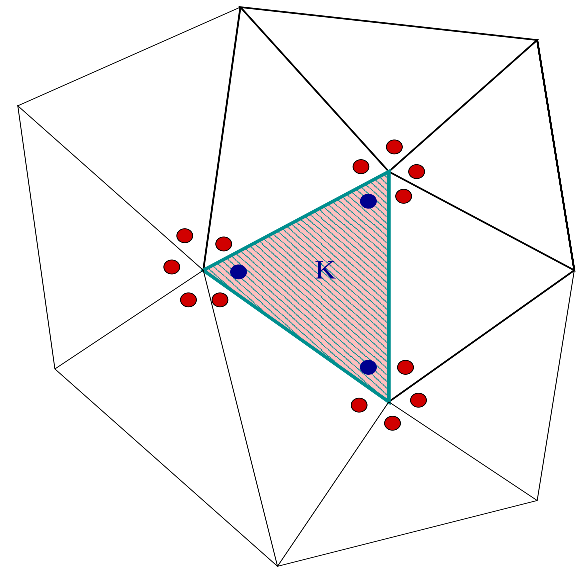
$$
\mathcal{M}(a_1, a_2, a_3) = \begin{cases} s \min\limits_{1 \le i \le 3} |a_i| & \text{si } s = sign(a_1) = sign(a_2) = sign(a_3), \\ 0 & \text{ailleurs.} \end{cases}
$$

Limiteur de pente multidimensionnel

Ce limiteur est introduit par Chavent et Jaffré (1986).

On définit les notations suivantes:

$$C_K = \{C_{K,i}\}_{i=1,\cdots,\mathcal{N}_K}\ ,\quad \overline{C}_K = \frac{1}{|K_i|}\int_K C_h\,dx,$$



Limiteur de pente multidimensionnel

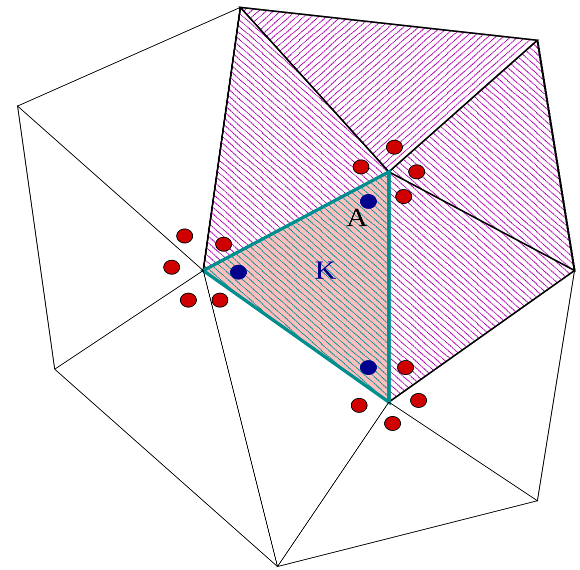
Ce limiteur est introduit par Chavent et Jaffré (1986).

On définit les notations suivantes:

$$C_K = \{C_{K,i}\}_{i=1,\cdots,\mathcal{N}_K}, \quad \overline{C}_K = \frac{1}{|K_i|}\int_K C_h\,dx,$$

$$T(A) = \{K \in \mathcal{T}_h |\ A \text{ est un sommet de } K\},$$

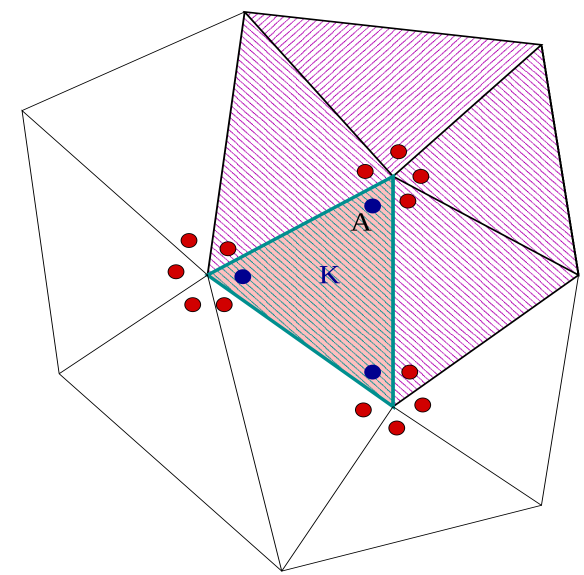
$$\overline{C}_{\min,i} = \min_{K\in T(A_i)} \overline{C}_K, \quad \overline{C}_{\max,i} = \max_{K\in T(A_i)} \overline{C}_K.$$



Limiteur de pente multidimensionnel

Ce limiteur est introduit par Chavent et Jaffré (1986).

On définit les notations suivantes:



$$C_K = \{C_{K,i}\}_{i=1,\cdots,\mathcal{N}_K}\,, \quad \overline{C}_K = \frac{1}{|K_i|}\int_K C_h\,dx,$$

$$T(A) = \{K \in \mathcal{T}_h |\ A \text{ est un sommet de } K\},$$

$$\overline{C}_{\min,i} = \min_{K\in T(A_i)} \overline{C}_K, \quad \overline{C}_{\max,i} = \max_{K\in T(A_i)} \overline{C}_K.$$

$C_K = \mathcal{L}(\widetilde{C}_K)$ est la solution du problème suivant :

$$\min_{W\in\mathbb{R}^{\mathcal{N}_K}} \|W - \widetilde{C}_K\|_2,$$ satisfaisant les contraintes :

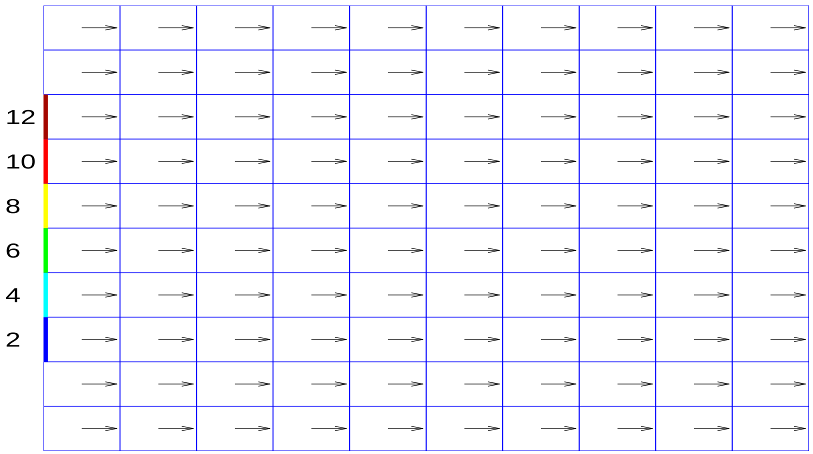
$$\overline{W} = \frac{1}{\mathcal{N}_K}\sum_{j=1}^{\mathcal{N}_K} w_i = \overline{C}_K,$$

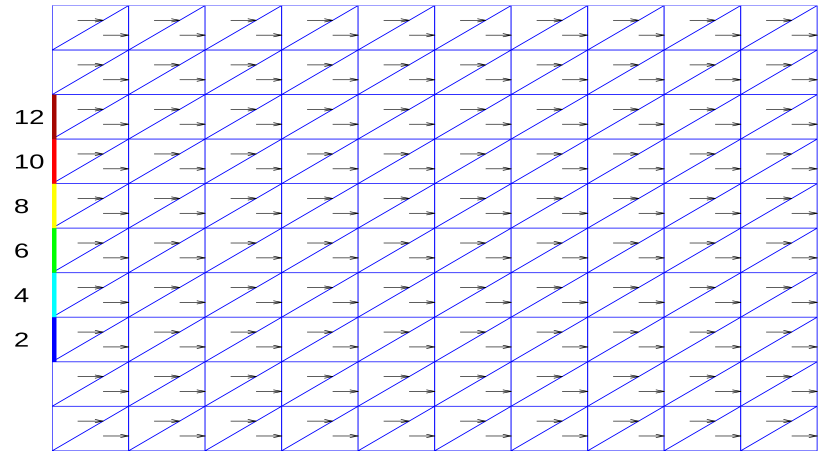
$$(1-\alpha)\overline{C}_K + \alpha\overline{C}_{\min,i} \le w_i \le (1-\alpha)\overline{C}_K + \alpha\overline{C}_{\max,i},$$

$$0 \le \alpha \le 1, \quad i = 1,\cdots,\mathcal{N}_K.$$

Expérience numérique

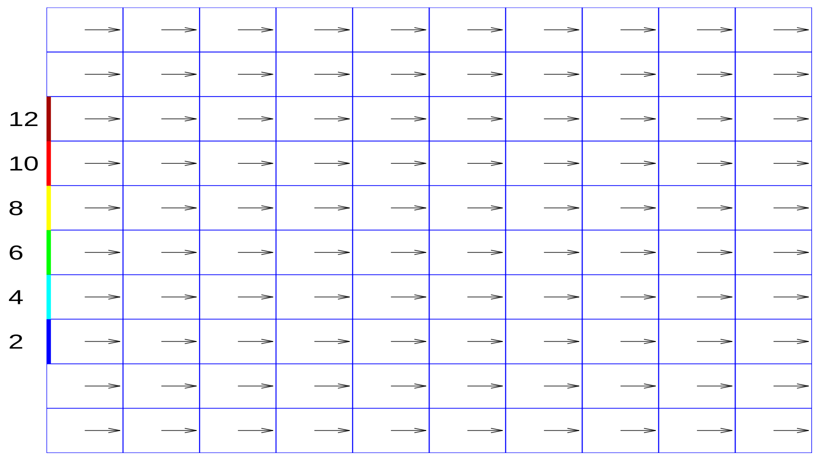
$\Omega =]0, 10[\times]0, 10[, \quad u = (0, 1)$

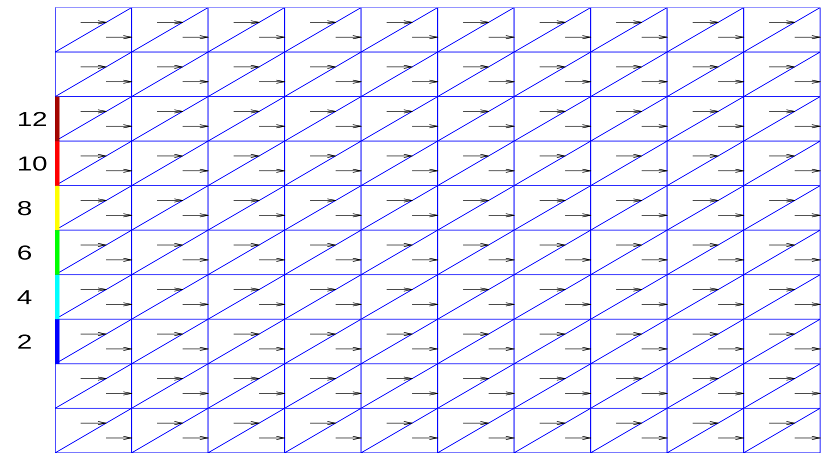


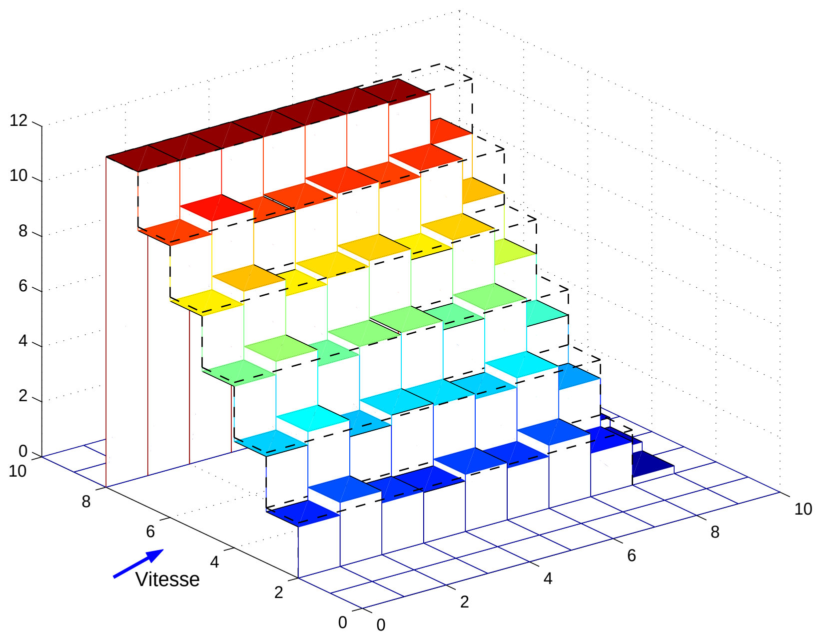


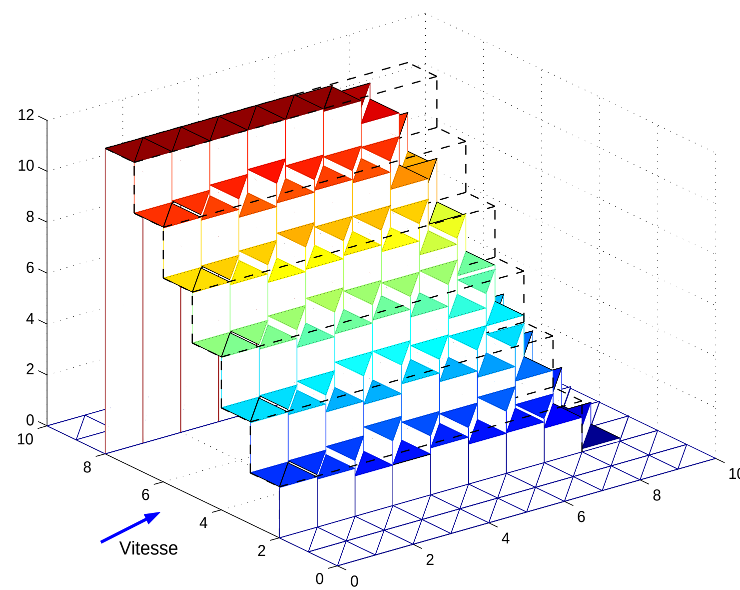
Expérience numérique

$\Omega =]0,10[\times]0,10[, \quad u=(0,1)$



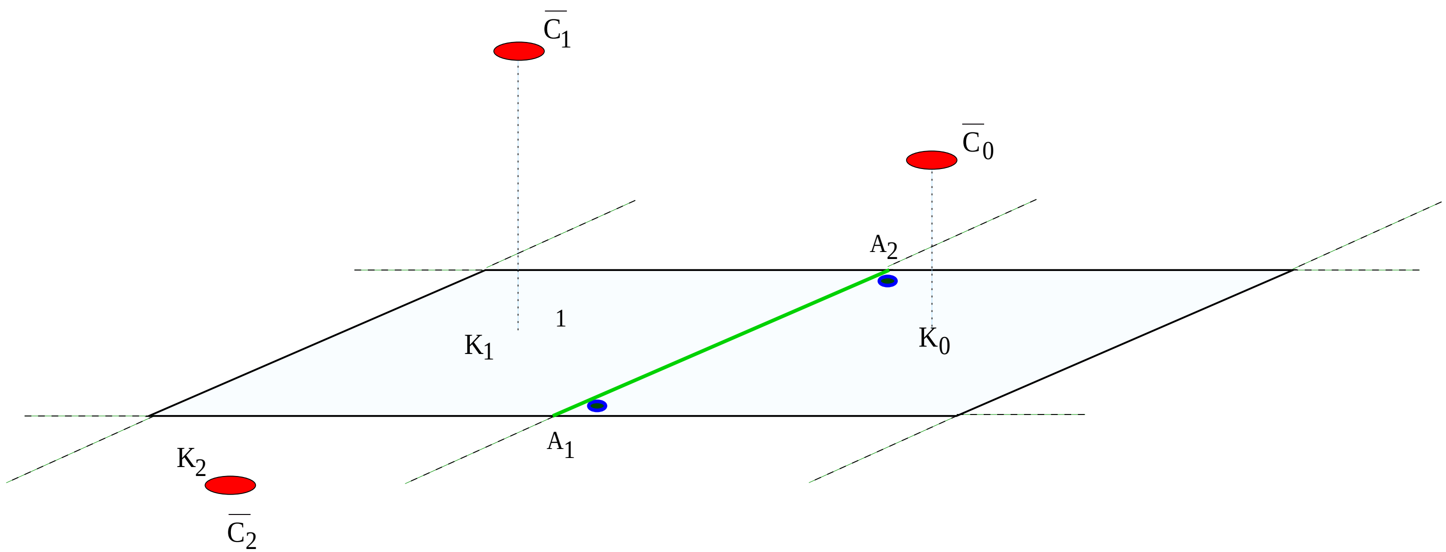






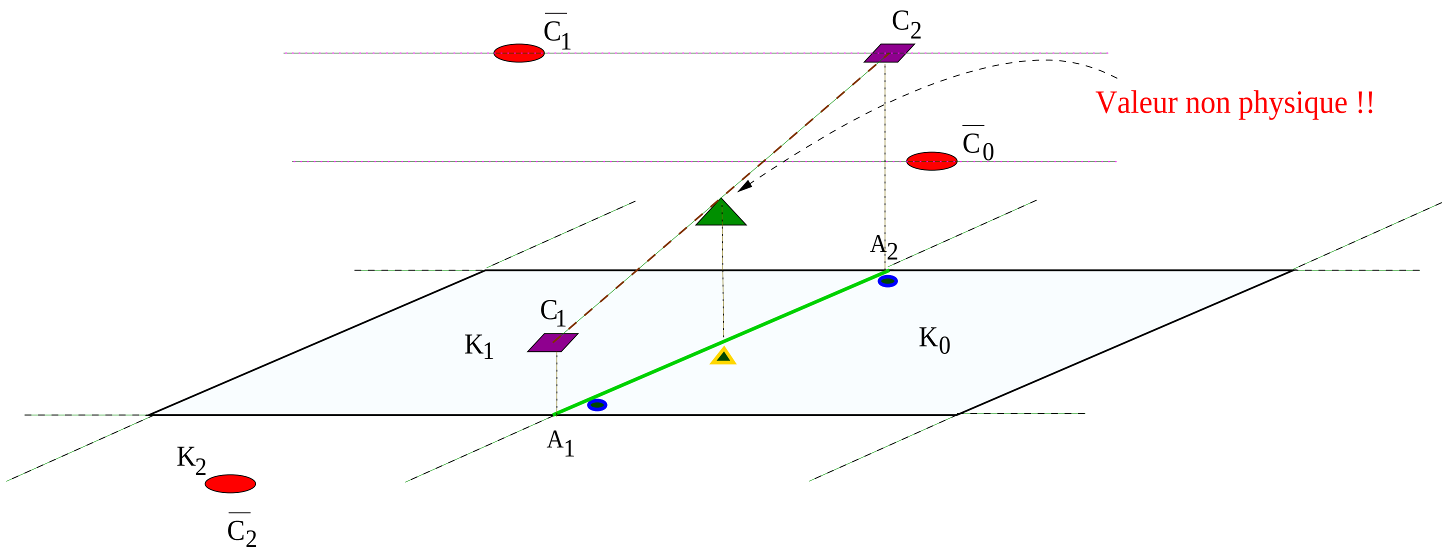
Source du problème

Le limiteur n’empêche pas de produire de nouveaux extréma aux milieux des arêtes !



Source du problème

Le limiteur n'empêche pas de produire de nouveaux extréma aux milieux des arêtes !



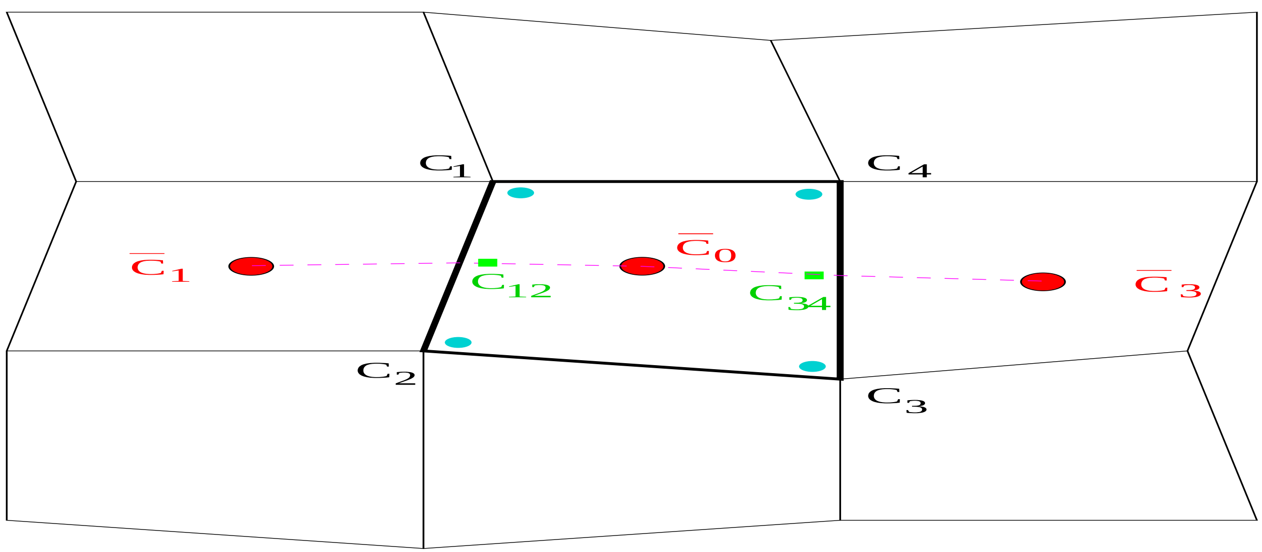
Le flux convectif à travers $E = K_0 \cap K_1$ est défini par:

$$Q_c(E) = u.n(\underbrace{\frac{1}{|E|}\int_E C d\ell}_{\overline{C}_E})$$

Limiteur de pente modifié

1. reconstruction de $C_{1,2}$ et $C_{3,4}$ dans la direction Ox .

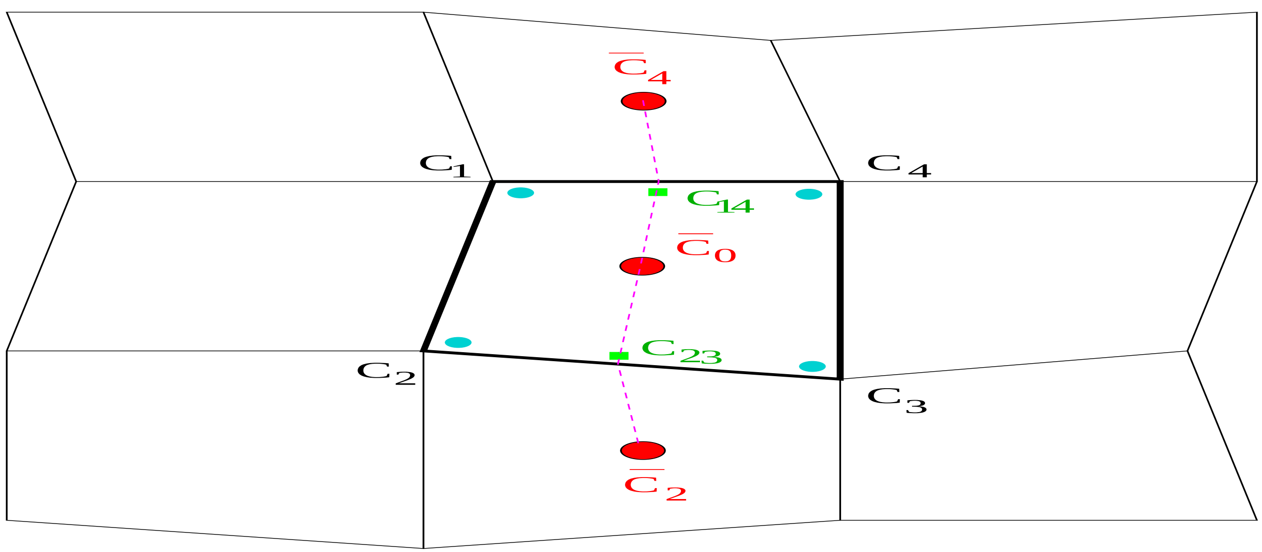
$$
\begin{aligned}
\overline{C}_{K_0} &= \frac{1}{2}(C_{1,2} + C_{3,4}) \\
C_{1,2} &= \overline{C}_{K_0} - \mathcal{M}\left(\overline{C}_{K_0} - \widetilde{C}_{1,2}, \alpha(\overline{C}_{K_0} - \overline{C}_{K_1}), \alpha(\overline{C}_{K_3} - \overline{C}_{K_0})\right), \\
C_{3,4} &= \overline{C}_{K_0} + \mathcal{M}\left(\widetilde{C}_{2,3} - \overline{C}_{K_0}, \alpha(\overline{C}_{K_0} - \overline{C}_{K_1}), \alpha(\overline{C}_{K_3} - \overline{C}_{K_0})\right).
\end{aligned}
$$



Limiteur de pente modifié

2. reconstruction de $C_{2,3}$ et $C_{4,1}$ dans la direction Oy .

$$
\begin{aligned}
\overline{C}_{K_0} &= \frac{1}{2}(C_{2,3} + C_{4,1}) \\
C_{2,3} &= \overline{C}_{K_0} - \mathcal{M}\left(\overline{C}_{K_0} - \widetilde{C}_{2,3}, \alpha(\overline{C}_{K_0} - \overline{C}_{K_2}), \alpha(\overline{C}_{K_4} - \overline{C}_{K_0})\right), \\
C_{4,1} &= \overline{C}_{K_0} + \mathcal{M}\left(\widetilde{C}_{4,1} - \overline{C}_{K_0}, \alpha(\overline{C}_{K_0} - \overline{C}_{K_2}), \alpha(\overline{C}_{K_4} - \overline{C}_{K_0})\right).
\end{aligned}
$$



Limiteur de pente modifié

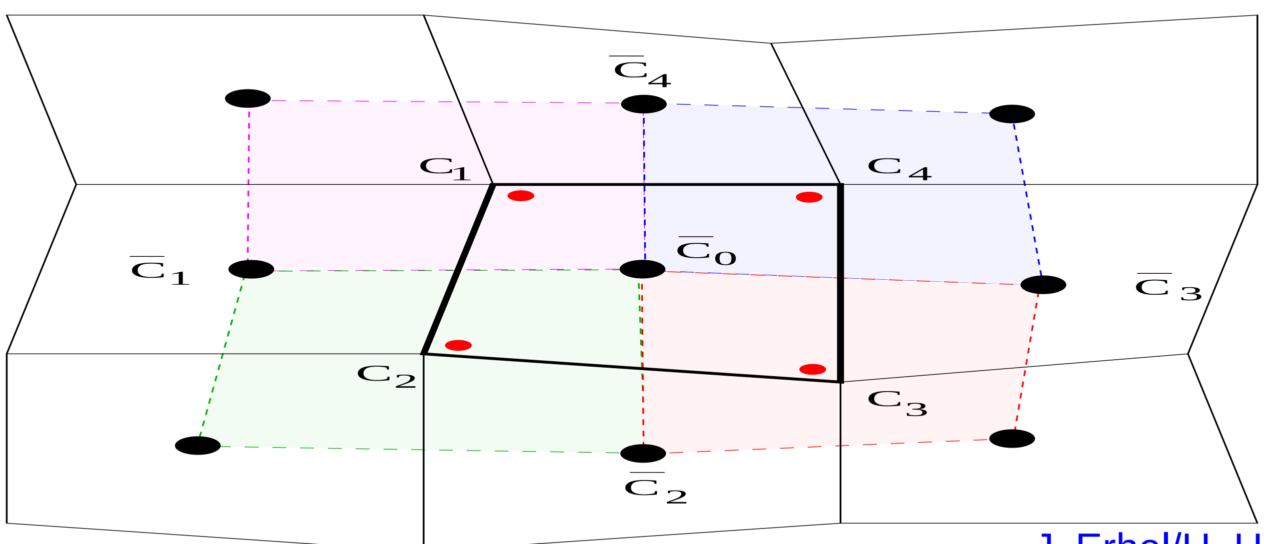
3. reconstruire les concentrations aux sommets.

$$\min_{W \in \mathbb{R}^{\mathcal{N}_K}} \|W - \widetilde{C}_K\|_2, \quad \text{satisfaisant les contraintes :}$$

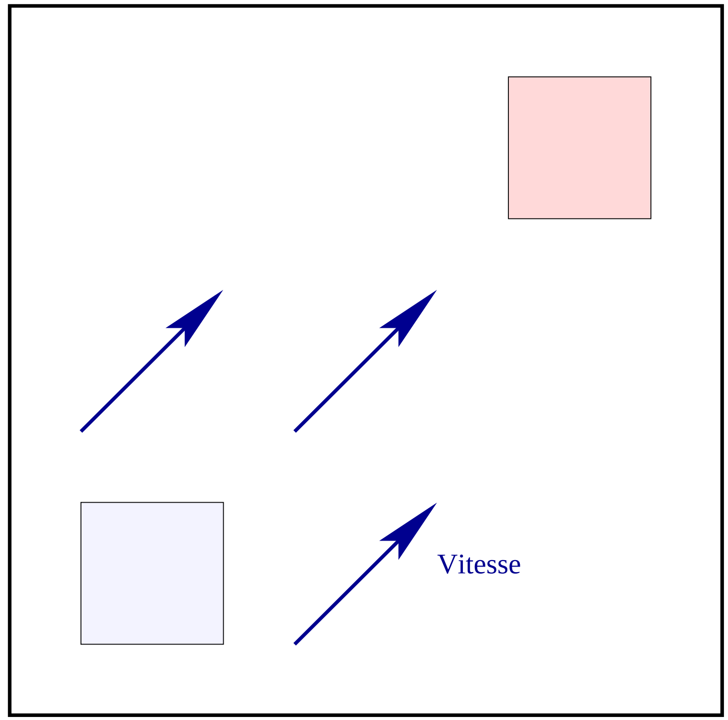
$$\overline{W} = \frac{1}{\mathcal{N}_K} \sum_{j=1}^{\mathcal{N}_K} w_i = \overline{C}_K,$$

$$(1-\alpha)\overline{C}_K + \alpha \overline{C}_{\min,i} \leq w_i \leq (1-\alpha)\overline{C}_K + \alpha \overline{C}_{\max,i}, \;\; i = 1, \ldots, \mathcal{N}_K.$$

$$C_1 + C_2 = 2\,C_{1,2}, \; C_2 + C_3 = 2\,C_{2,3}, \; C_3 + C_4 = 2\,C_{3,4}, \; C_4 + C_1 = 2\,C_{4,1}.$$

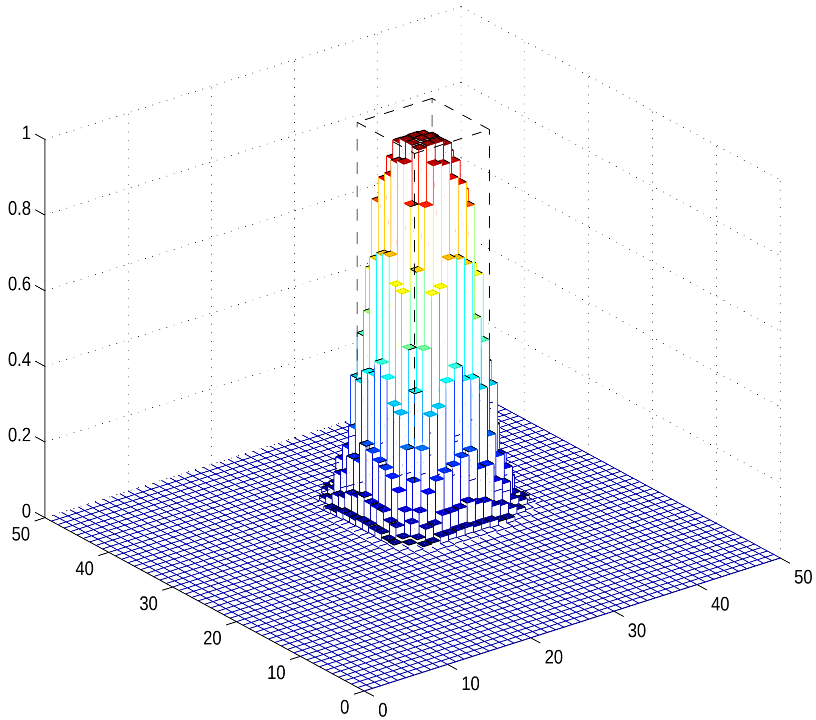


Expériences numériques

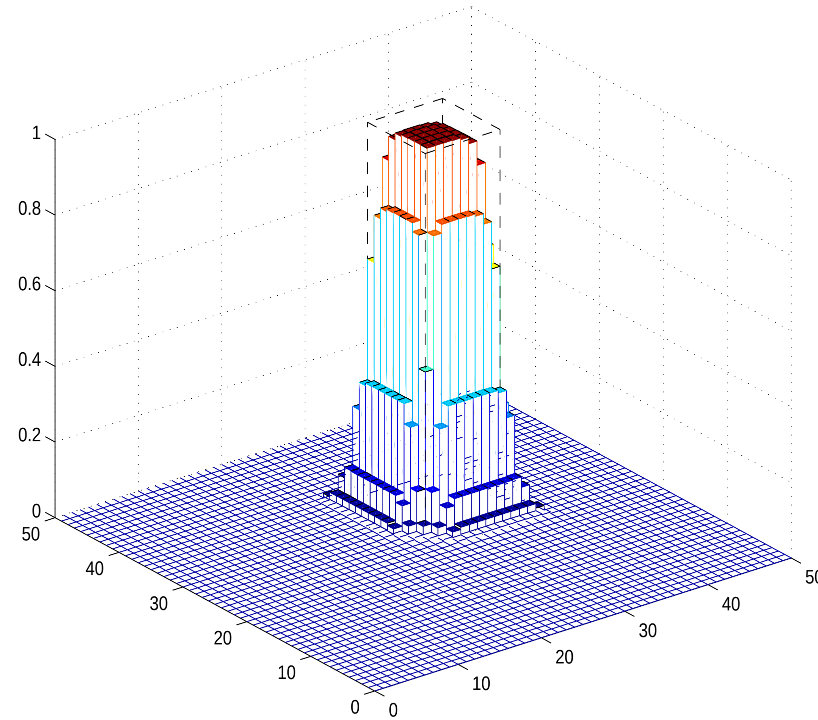


Déplacement d'une surface rectangulaire sur la diagonale avec une vitesse constante (diagonale).

Expériences numériques

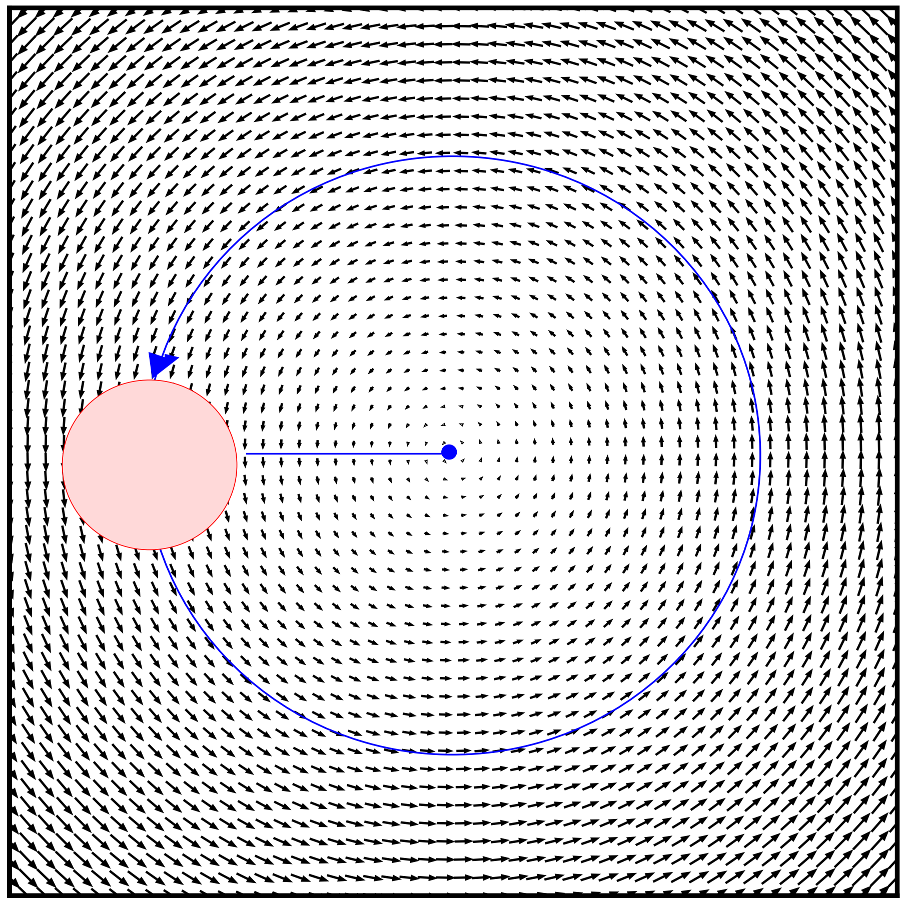


Limiteur non modifié.



Limiteur modifié.

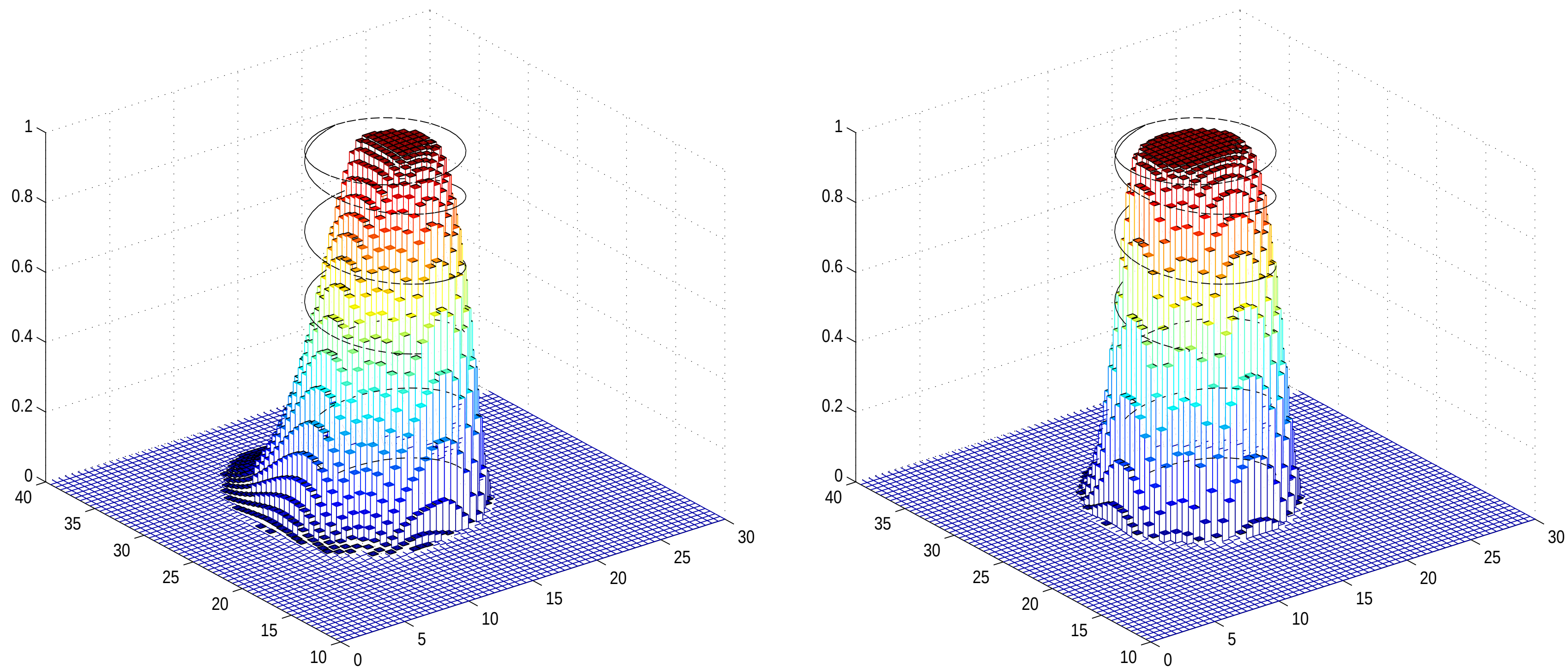
Expériences numériques



Une surface en mouvement circulaire.

Expériences numériques

Solutions après 4 rotations.



Limiteur non modifié.

Limiteur modifié.

Discrétisation de l'opérateur de diffusion

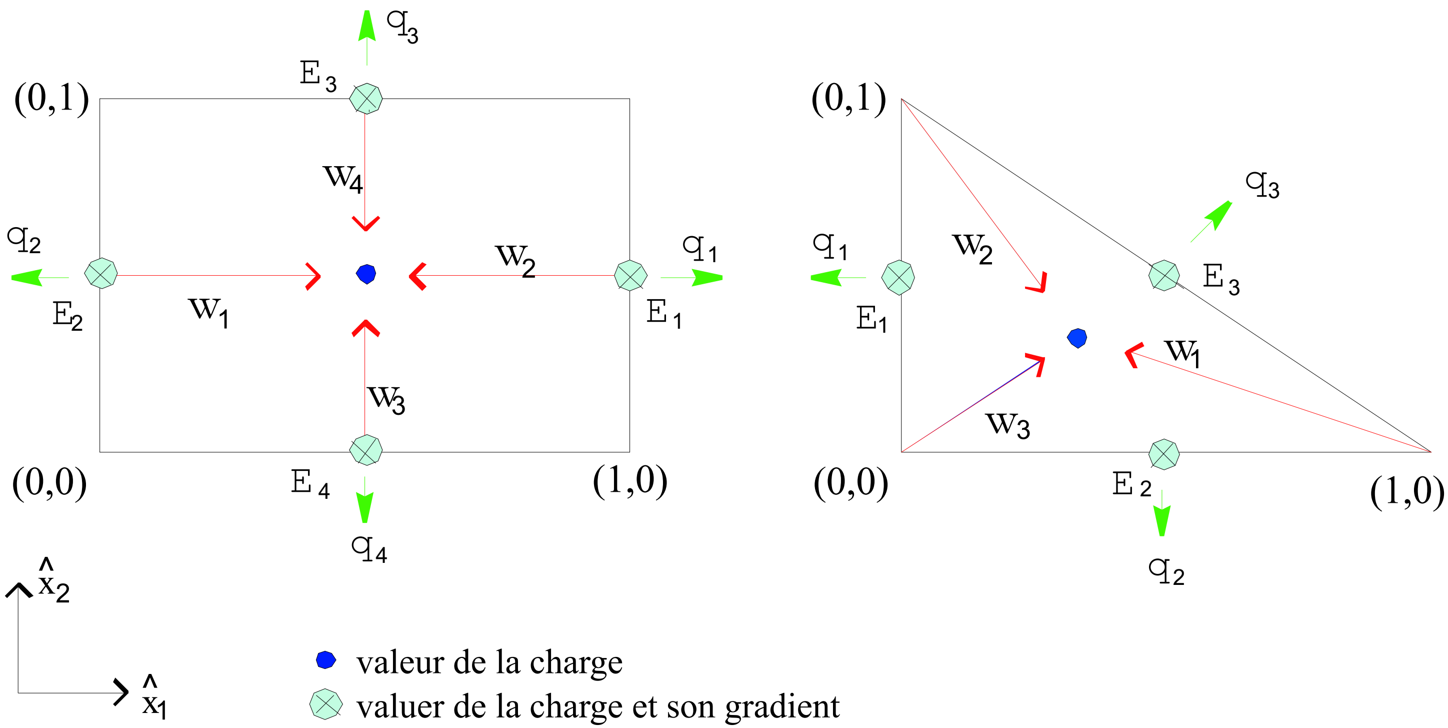
$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla . u^d = 0 & \text{sur} \quad \Omega \times (t_1, t_2) \\ u^d = -D . \nabla C & \text{sur} \quad \Omega \\ \text{Condition initiale et conditions aux limites} & \end{cases}$$

Éléments finis mixtes

- la concentration et son gradient sont approchés
- la masse est conservée localement (sur chaque élément K)
- la continuité des flux à travers les facettes
- les tenseurs pleins sont facilement manipulés

Éléments finis mixtes hybrides

Variables nodales sur l'élément de référence



Discrétisation temporelle

Système différentiel

$$\frac{d\mathcal{C}}{dt} + D\mathcal{C} - R\mathcal{T} = F$$
$$R^T\mathcal{C} - M\mathcal{T} = G$$

$\mathcal{C}$: concentrations moyennes sur chaque élément
$\mathcal{T}$: concentrations moyennes sur chaque côté
Exemple : Euler implicite

$$(I + hD)\mathcal{C}^{n+1} - hR\mathcal{T}^{n+1} = hF^{n+1}$$
$$R^T\mathcal{C}^{n+1} - M\mathcal{T}^{n+1} = G$$

Séparation d'opérateurs

Opérateur de convection discrétisée sur un pas de temps

$$\left\{\begin{array}{lll} \dfrac{\partial C}{\partial t} = -\nabla.\,(Cu) & \text{sur} & \Omega \times (t_n, t_{n+1}), \\ C(x, t_n) = C^{conv}(x) & \text{sur} & \Omega, \\ \text{Conditions aux limites} & & \end{array}\right.$$

Opérateur de dispersion discrétisée sur un pas de temps

$$\left\{\begin{array}{lll} \dfrac{\partial C}{\partial t} + \nabla.u^d = 0 & \text{sur} & \Omega \times (t_n, t_{n+1}), \\ u^d = -D.\nabla C & \text{sur} & \Omega, \\ C(x, t_n) = C^{diff}(x) & \text{sur} & \Omega, \\ \text{Conditions aux limites} & & \end{array}\right.$$

Couplage des deux opérateurs

Convection sur $[t_n, t_{n+1}]$ puis diffusion sur $[t_n, t_{n+1}]$
Condition initiale de la diffusion

$$C_K^{diff}(t_n) = \overline{C}_K(t_{n+1})$$

Valeurs en t_{n+1}

$$\overline{C}^{(}t_{n+1}) = \mathcal{C}(t_{n+1})$$
$$C_{K,i}(t_{n+1}) = C_{K,i}(t_n) + \Delta t \, (\mathcal{C}_K(t_{n+1}) - \mathcal{C}_K(t_n))$$

Couplage des deux opérateurs

Convection

$$\widetilde{C}_K^{n+1} = C_K^n + \Delta t \mathcal{A}(C_K^{in,n}, C_K^{out,n}), \qquad \forall K \in \mathcal{T}_h.$$
$$C_K^{n+1} = \mathcal{L}(\widetilde{C}_K^{n+1}), \qquad \forall K \in \mathcal{T}_h.$$

Dispersion

$$(I + hD)\mathcal{C}^{n+1} - hR\mathcal{T}^{n+1} = hF^{n+1}$$
$$R^T\mathcal{C}^{n+1} - M\mathcal{T}^{n+1} = G$$

Conclusion

- la séparation d'opérateurs permet des discrétisations différentes de la convection et de la dispersion.
- Le nouveau limiteur reconstruit les concentrations sur chaque élément en utilisant les concentrations moyennes par arête.
- Il limite les flux numériques à travers les interéléments.
- Les expériences numériques montrent une amélioration importante.