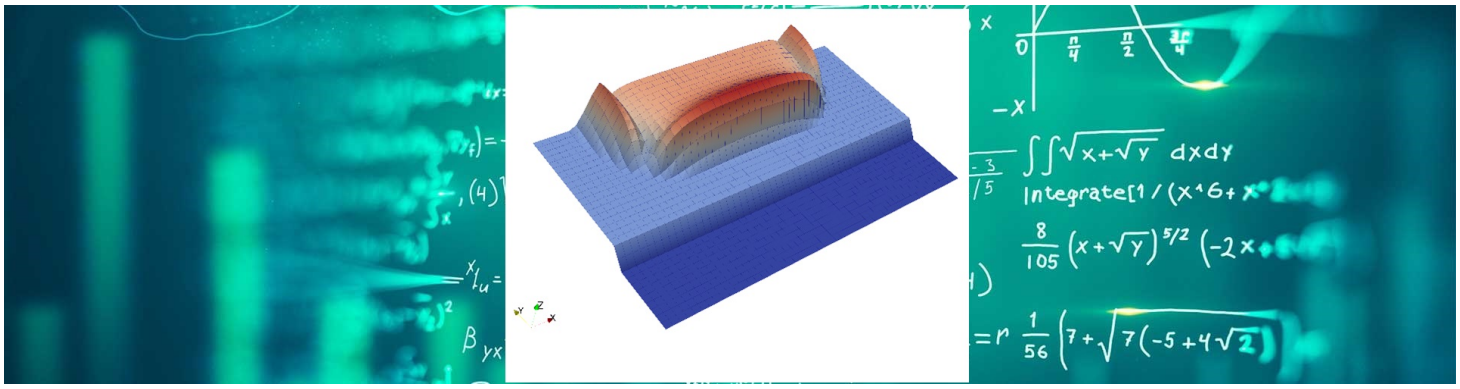


Rédigé le 27 septembre 2022

10 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale

Physique du transfert et du transport | **Mécanique des fluides** | **Méthodes numériques et optimisation**

Que ce soit pour le développement de produits, de procédés ou de services, **les mathématiques sont capitales pour l'innovation technologique conduite par IFPEN**. Leur rôle se manifeste notamment dans le domaine de la simulation numérique, afin de traiter des phénomènes de plus en plus complexes ou de faciliter la conception et la mise au point de nouvelles solutions techniques.

Tirés de projets de recherche menés à IFPEN, les trois exemples ci-après illustrent **l'apport essentiel des méthodes numériques à la description des fluides pour des problématiques liées au sous-sol**. Elles ont permis de résoudre trois difficultés récurrentes posées par **les fortes non-linéarités des lois de vitesse, de pression et de mélange caractérisant les écoulements en milieux poreux** . La levée de ces obstacles contribue à améliorer la performance des simulateurs de géosciences.

Au-delà des progrès accomplis, ces travaux sont parfaitement représentatifs de l'esprit de la recherche fondamentale à IFPEN, avec **des collaborations scientifiques de grande qualité** impliquant des doctorants internationaux.

LES BRÈVES

L’équation de Richards, qui permet de simuler les flux d’eau dans des sols partiellement saturés, est difficile à résoudre dans des milieux fortement hétérogènes où la pression capillaire peut varier brutalement. Une nouvelle méthodologie a été mise en place pour améliorer la robustesse et la précision des calculs dans ce type de milieux. Une des applications envisagées est le stockage souterrain de CO_2.

Résolution de l’équation de Richards : quels enjeux numériques ?

L’équation de Richards est un modèle d’écoulement simplifié, **fréquemment utilisé en hydrogéologie pour simuler les flux d’eau dans des sols partiellement saturés**. Sa résolution se fait classiquement à l’aide d’un schéma de discrétisation en espace, de type volumes-finis. Mais **le système d’équations non-linéaires résultant se révèle, dans certains cas, difficile à résoudre et la précision des solutions obtenues peut être dégradée lorsque la loi de pression capillaire est spatialement hétérogène.**
Des chercheurs d’IFPEN et d’Inria ont proposé dans le cadre de travaux de thèse [1] **une nouvelle version de ce schéma** de discrétisation, **plus robuste face aux non-linéarités du problème mais aussi plus précis**. Ils ont de plus établi **la preuve théorique de l’existence et de l’unicité des solutions discrètes ainsi que leur convergence vers une solution du problème variationnel**.

Une forte non-linéarité et une discontinuité spatiale de la pression capillaire

La pression capillaire est définie comme la différence de pression existant à l’interface entre deux phases, une considérée comme mouillante vis-à-vis de la roche poreuse et l’autre non. Dans la formulation de Richards, ces deux phases correspondent respectivement à l’eau et l’air. La pression de ce dernier étant supposée constante, la pression de l’eau se déduit donc directement de la pression capillaire, grandeur généralement définie sous la forme **d’une fonction non linéaire de la saturation d’eau et dépendante également du type de roche localement présent** (Figure 1). Cette dernière dépendance peut de plus faire apparaître **des discontinuités de la saturation d’eau** au cours du temps et donc des accumulations ou des succions d’eau au niveau des interfaces de changement de roche (Figure 2). Une modélisation précise de ces phénomènes est donc importante.

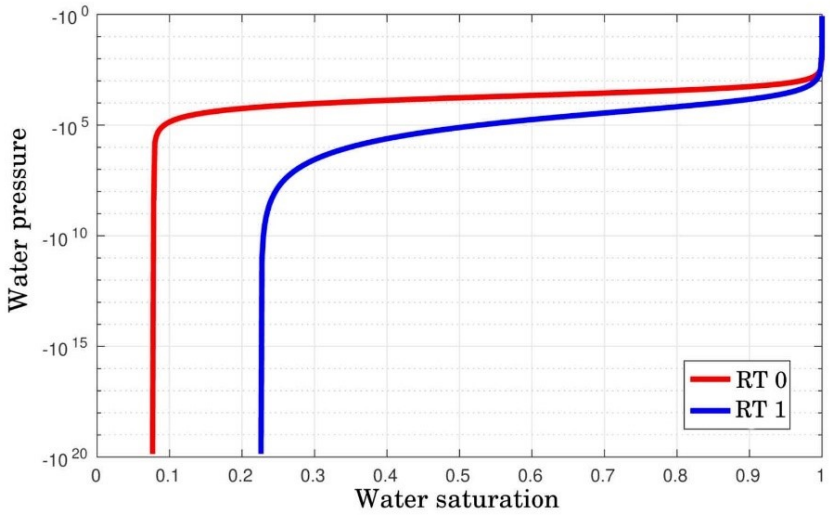


Figure 1 : Un exemple de pression fonction de la saturation d'eau obtenue avec un modèle de type Van Genuchten-Mualem [8] pour deux types de roche RT0 et RT1.

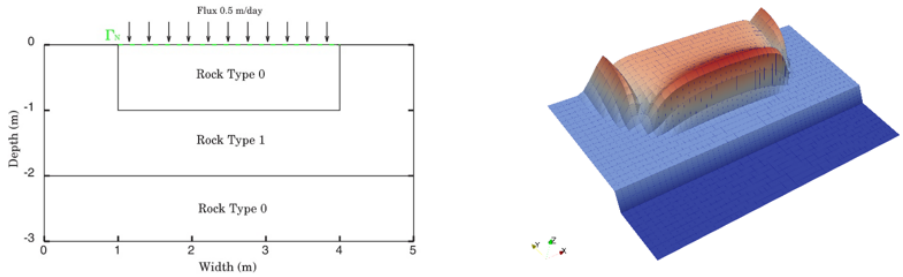


Figure 2 : Exemple d'une simulation d'imbibition en milieu hétérogène et profil de saturation obtenu avec le schéma proposé et un modèle de Van Genuchten Mualem

La technique du paramétrage : une solution pour améliorer la convergence de l'algorithme de Newton

Face à la non-linéarité de la loi décrivant la pression capillaire, l'algorithme de Newton, utilisé pour résoudre l'équation discrétisée, peut converger difficilement, voire pas du tout. Cet écueil peut en grande partie être réduit moyennant un changement de variables adapté et régulier au cours des itérations. C'est le principe de la technique de paramétrage proposée dans [2]. Ce précédent travail utilisait la transformée de Kirchhoff comme variable potentielle pour opérer l'algorithme de Newton mais celle-ci ne peut pas toujours être calculée. Le travail réalisé au cours de cette nouvelle étude a permis de proposer **des paramétrages basés directement sur la saturation de l'eau et la pression capillaire, assurant ainsi une bonne convergence des calculs avec des lois pourtant très non-linéaires [3]**.

Un raffinement simplifié pour une précision accrue aux interfaces de changement de roche

Une discrétisation des flux, de type volumes-finis, dite à « deux points », est très couramment utilisée dans les codes de simulation. Ce schéma de résolution se révèle pourtant peu précis sur les interfaces présentant un changement de loi de pression capillaire. Une solution classique pour améliorer la précision sur les flux calculés consiste à ajouter une ou plusieurs inconnues sur les faces du maillage localisées entre deux types de roche [4]. Le travail, réalisé ici, a montré aussi que **le simple ajout de mailles fines supplémentaires de part et d'autre des interfaces de changement de roche permet numériquement d'améliorer l'ordre de convergence du schéma « deux-points »**. Cette solution ne demande en pratique que très peu de changement à un code mettant en jeu la forme classique de ce schéma. Elle a été également comparée à d'autres formes de raffinement au cours d'une seconde étude [5] et, par rapport à celles-ci, s'est révélée la plus adaptée dans la plupart des cas considérés.

Une méthodologie promise à un bel avenir

La solution développée peut être facilement étendue à la simulation des écoulements polyphasiques (diphasiques voire triphasiques) e**n milieu poreux, occasionnant ainsi des retombées bénéfiques pour divers cas d'application, comme par exemple le stockage souterrain du CO_2**. C'est pourquoi les prochaines étapes vont consister à **mettre en œuvre ces résultats au sein de la plate-forme de calcul ArcGeoSim développée par IFPEN en partenariat avec le CEA [6, 7]**.

Références:

1. S. Bassetto, Towards more robust and accurate computations of capillary effects in the simulation of multiphase flows in porous media, Thèse de doctorat de l'Université de Lille (2021).
2. K. Brenner, C. Cancès, Improving Newton's method performance by parametrization: the case of Richards equation, *SIAM J. Numer. Anal.* **55** (2017), 1760-1785. https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01342386
3. S. Bassetto, C. Cancès, G. Enchéry, Q-H. Tran, Upstream mobility finite volumes for the Richards equation in heterogeneous domains, *ESAIM : M2AN* **55** (2021), 2101-2139. https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03109483
4. G. Enchéry, R. Eymard, A. Michel, Numerical approximation of a two-phase flow problem in a porous medium with discontinuous capillary forces, *SIAM J. Numer. Anal.* **43** (2006), 2402-2422. https://doi.org/10.1137/040602936
5. S. Bassetto, C. Cancès, G. Enchéry, Q-H. Tran, On several numerical strategies to solve Richards' equation in heterogeneous media with finite volumes, preprint (2021). https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03259026
6. G. Grospellier, B. Lelandais, The Arcane development framework, *Proceedings of the 8th workshop on Parallel/High-Performance Object-Oriented Scientific Computing* **4** (2009), 1-11. https://doi.org/10.1145/1595655.1595659
7. https://github.com/arcaneframework/framework
8 . M.T. van Genuchten, A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Amer. J* **44** (1980) 892–898.

Contact scientifique: Guillaume.Enchery@ifpen.fr

Un schéma volumes-finis pour la résolution de l’équation de Richards en milieu poreux hétérogène

La simulation des écoulements dans le sous-sol fait intervenir des mélanges polyphasiques complexes dans lesquels des phases peuvent apparaître et disparaître au cours du temps. Pour gérer cette complexité, plusieurs approches ont été testées (formulation unifiée, méthode de points intérieurs non-paramétrique, etc.) au cours d'un travail de thèse. La nouvelle méthode mise en place est très robuste et permet d'obtenir ainsi une bonne convergence des algorithmes de résolution.

Gestion des phases d'un mélange

Dans de nombreux simulateurs du sous-sol (stockage du CO_2, géothermie, réservoir), une partie délicate concerne les mélanges polyphasiques et plus particulièrement la prise en compte des lois d'équilibre thermodynamique relatives aux espèces chimiques présentes. La difficulté réside dans la gestion de l'apparition et de la disparition des phases pour différents constituants. L'approche dynamique traditionnelle, dite de *variable switching*, consiste à ne garder que **les inconnues des phases présentes et les équations relatives à celles-ci**. Elle est toutefois lourde et coûteuse, dans la mesure où cette action doit être effectuée en continu, même d'une itération à l'autre au sein d'une procédure de résolution numérique, comme par exemple l'algorithme de Newton classique.

Apport de la formulation unifiée

Une approche alternative, appelée formulation unifiée et proposée récemment par Lauser et al. [1], permet de **maintenir un jeu fixe d'inconnues et d'équations tout au long des calculs**. Sur le plan théorique, c'est un progrès important qui a suscité ensuite beaucoup de travaux dans la communauté du calcul scientifique. Sur le plan pratique toutefois, la nouvelle formulation fait intervenir **des équations de complémentarité qui sont non-différentiables**. On est alors obligé, après discrétisation, d'avoir recours à **la méthode semi-lisse Newton-min**, laquelle **ne garantit pas la convergence vers une solution unique**. Ainsi, toute la difficulté du problème se retrouve transférée à la l'étape de résolution numérique mais elle n'a pas disparu.

Élaboration d'une méthode de points intérieurs non-paramétrique

Pour ne pas s'arrêter à mi-chemin et aller au bout de l'intérêt de la démarche par formulation unifiée, une équipe de chercheurs d'IFPEN et de l'INSA de Rennes a décidé de lever ce dernier obstacle. Dans le cadre d'une thèse co-encadrée [2], ils ont visé l'élaboration d'algorithmes de résolution mieux adaptés, offrant une meilleure convergence des calculs. La démarche suivie a consisté à s'inspirer de méthodes ayant fait leur preuve en optimisation sous contraintes et à les transposer aux systèmes d'équations généraux (qui ne proviennent pas nécessairement d'un problème d'optimisation). C'est ainsi que pour les systèmes algébriques, **il a été proposé une version non-paramétrique[1] des méthodes de points intérieurs[2]** appelées **NPIPM**. Ces méthodes sont reconnues pour leur grande efficacité en optimisation [3].

[1] « non-paramétrique » signifie qu'il n'est pas nécessaire de faire tendre vers 0 « à la main » le paramètre de régularisation qui intervient dans les méthodes de points intérieurs et qui constitue souvent leur « maillon faible ».
[2] « intérieur » signifie qu'au cours des itérations, le vecteur inconnu reste à l'intérieur d'une région où les contraintes de positivité sont strictement satisfaites.

Analyse et extension des lois d'état cubiques

Une autre contribution importante de la thèse [3] a été la compréhension et la résolution partielle d'une autre obstruction au bon fonctionnement de la formulation unifiée, jusque-là non identifiée dans la littérature. Il s'agit de **la limitation du domaine de définition des fonctions de Gibbs[3] associées aux lois d'état cubiques[4]**. Pour remédier à l'éventuelle non-existence de solution du système, il a été préconisé un prolongement naturel des fonctions de Gibbs. De même, un grand nombre de propriétés théoriques jusqu'alors inconnues de la formulation unifiée ont été établies [4]. La complémentarité de ces résultats avec les aspects numériques de la méthode NPIPM a été éprouvée comme décrit ci-après.

[3] fonction enthalpie libre G associée au second principe de la thermodynamique.
[4] équation d'état d'un fluide pouvant s'écrire sous la forme d'un polynôme de degré trois en fonction du volume.

Comparaison numérique sur plusieurs modèles d'équilibre de phases

En termes de robustesse de convergence, la combinaison de la nouvelle méthode NPIPM avec l'extension des fonctions de Gibbs permet d'obtenir des résultats supérieurs à la méthode Newton-min. À titre d'exemple, **la partie gauche de la figure 1** signale en rouge, dans l'espace des concentrations (c1, c2), les états pour lesquels **Newton-min diverge**, pour un choix donné quant au point de départ du calcul. **À droite**, avec le même point initial mais grâce à NPIPM, **ces états problématiques ont disparu** sur les différentes zones du domaine : liquide (vert), gaz (bleu), diphasique (liquide-gaz, cyan).

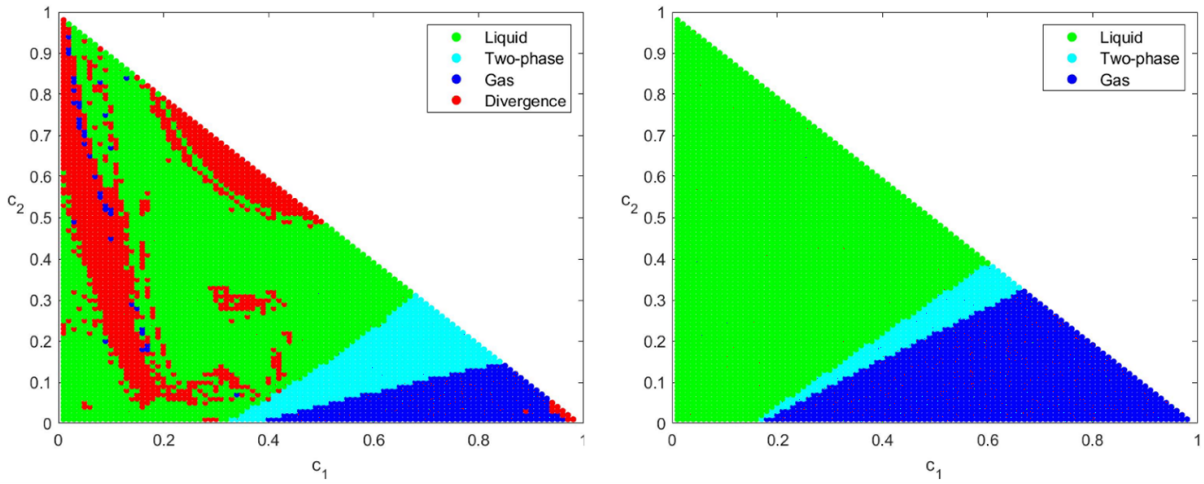


Figure 1: Convergence de Newton-min (gauche) et NPIMP (droite) avec la loi de Peng-Robinson étendue et le même point initial

La figure 2 représente d'une autre manière le bénéfice de la nouvelle méthode : elle indique **le nombre de situations (point initial) pour lesquelles chacun des deux algorithmes converge**. On constate que NPIMP (droite) atteint le score de 100% sur tous les cas considérés, contrairement à Newton-min (gauche). Pour ces tests numériques, nous avons considéré la loi d'état cubique de Peng-Robinson avec des fonctions de Gibbs étendues [5].

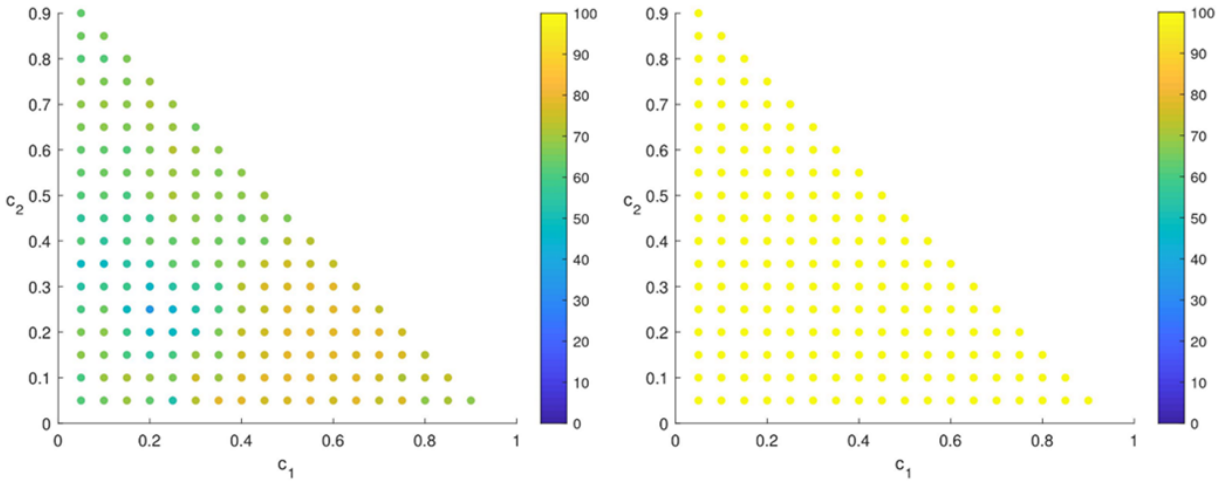


Figure 2 : Pourcentage de convergence de Newton-min (gauche) et NPIMP (droite) sur plusieurs points initiaux avec la loi de Peng-Robinson étendue

Références:

[1] A. LAUSER, C. HAGER, R. HELMIG, B. WOHLMUTH, A new approach for phase transitions in miscible multiphase flow in porous media, *Advances in Water Resources* **34** (2011), pp. 957–966. https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2011.04.021

[2] D. T. S. VU, *Numerical resolution of algebraic systems with complementarity conditions. Applications to the thermodynamics of compositional multiphase mixtures*, PhD thesis **2020UPASG006**, Université Paris-Saclay, 2020. https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-02987892

[3] M. H. WRIGHT, The interior-point revolution in optimization: history, recent developments, and lasting consequences, *Bulletin of the American Mathematical Society* **42** (2005), pp. 39–56. https://doi.org/10.1090/S0273-0979-04-01040-7

[4] I. BEN GHARBIA, M. HADDOU, Q. H. TRAN, D. T. S. VU, An analysis of the unified formulation for the equilibrium problem of compositional multiphase mixtures, ESAIM: M2AN 55 (2021), pp. 2981–3016. https://doi.org/10.1051/m2an/2021075

[5] D. T. S. VU, I. BEN GHARBIA, M. HADDOU, Q. H. TRAN, A new approach for solving nonlinear algebraic systems with complementarity conditions. Application to compositional multiphase equilibrium problem, *Mathematics and Computers in Simulation* **190** (2021), pp. 1243–1274. https://doi.org/10.1016/j.matcom.2021.07.015

Contacts scientifiques : Ibtihel.Ben-Gharbia@ifpen.fr, Quang Huy Tran

Une nouvelle méthode de résolution numérique pour simuler la thermodynamique des mélanges polyphasiques

Le calcul des écoulements d'eau et de gaz dans les milieux rocheux complexes et hétérogènes est au cœur des solutions technologiques en lien avec les enjeux climatiques et énergétiques actuels, comme par exemple le stockage souterrain de CO_2 ou de chaleur. Pour ce type de calculs, un modèle adaptatif a été développé par les chercheurs d'IFPEN et de PoliMi[1] afin de mieux prendre en compte la nature très discontinue du sous-sol. La collaboration entre les deux instituts se poursuit pour améliorer la performance de ces simulations numériques.

[1] Université polytechnique de Milan

Des distributions spatiales irrégulières de porosité et de perméabilité

Simuler numériquement l'écoulement d'eau et de gaz dans un milieu poreux hétérogène revêt une grande importance pour certaines applications nouvelles, en lien avec les enjeux climat/énergie, comme le stockage dans le sous-sol de CO_2 ou de chaleur. **Les hétérogénéités du milieu** en question relèvent à la fois de **la diversité dans la nature des roches** mais aussi de la présence de **structures géométriques complexes**, comme des **chenaux** ou des **macropores** : elles se traduisent par des distributions spatiales irrégulières de porosité et de perméabilité telles qu'illustrées par les exemples de la figure 1.

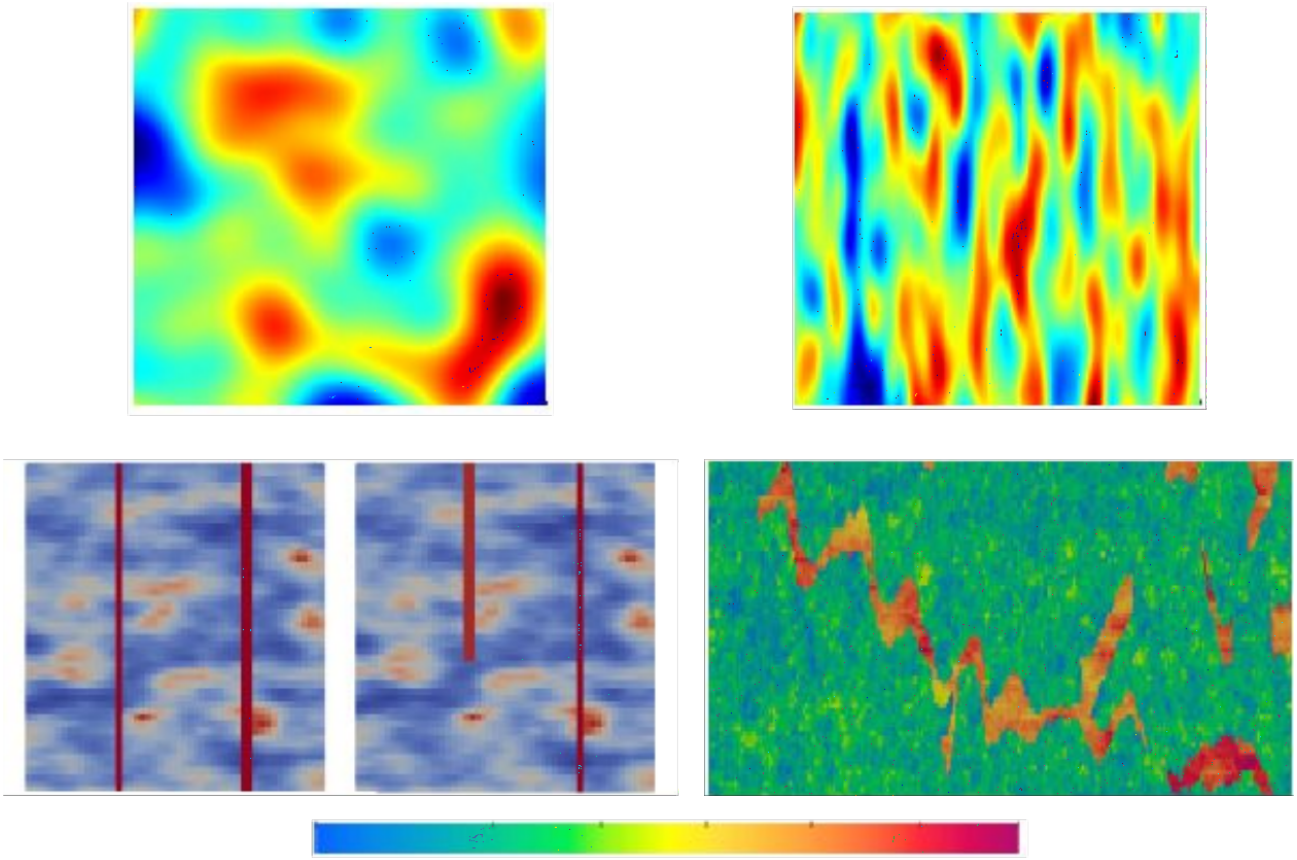


Figure 1: Profils de perméabilité simulés et réels (valeurs faibles en bleu, fortes en rouge)
En haut à gauche : généré par une distribution gaussienne isotrope [3]
En haut à droite : généré par une distribution gaussienne anisotrope [3]
En bas à gauche : générés par une distribution de Matérn [3,4] avec macropores

transverses [4] représentés par des traits rouges verticaux
En bas à droite : mesuré sur la couche 35 du projet SPE10 [5]

La loi de Darcy et ses limites

En termes de modélisation, le choix de la loi constitutive qui relie la vitesse d'écoulement des fluides au gradient de pression est essentiel. Il est classique d'utiliser **la loi de Darcy** sur la totalité du domaine concerné par la simulation : elle est **linéaire, donc peu coûteuse numériquement**, et décrit bien les écoulements à faibles vitesses. Lorsque **ces vitesses s'élèvent**, par exemple dans les structures très perméables, **la linéarité n'est plus respectée** et la loi de Darcy perd de sa pertinence. Ainsi, il a été montré expérimentalement qu'elle conduit à surestimer les grandes vitesses calculées [6,7]. Afin de corriger cet effet, il est courant d'**ajouter un terme quadratique à la loi de Darcy et ainsi de la transformer en loi de Forchheimer**. Ce terme additionnel agit par une prise en compte des **effets inertiels** en augmentant l'énergie d'écoulement. Toutefois, à cause de la non-linéarité ainsi introduite, la résolution des équations spatialement discrétisées se révèle coûteuse en temps de calcul.

Adoption d'un modèle adaptatif

Pour remédier à cet effet en impactant le moins possible la précision des résultats, des chercheurs d'IFPEN et de PoliMi ont proposé un **modèle adaptatif** [1,2] qui n'emploie qu'à bon escient la loi de Forchheimer. Ainsi, pour la résolution numérique en tout point du domaine, le choix de la loi qui s'applique est effectué, à chaque itération, selon un critère fondé sur des **grandeurs physiques** (telles que la perméabilité du domaine et la viscosité des fluides) et qui porte sur **la vitesse d'écoulement** : si celle-ci excède la valeur du critère, la loi de Forchheimer est utilisée.

Régularisation du problème adaptatif

Une difficulté majeure de ce modèle adaptatif réside dans les discontinuités que crée le passage abrupt d'une loi constitutive à l'autre dans les zones dites de transition. En effet, **ces discontinuités ont une répercussion forte sur la formulation mathématique du modèle** et le rendent difficile à manipuler. Pour pallier cette difficulté, IFPEN et PoliMi ont proposé une **régularisation du problème adaptatif** fondée sur un moyennage des vitesses dans les zones de transition. Le passage d'une loi à l'autre s'en trouve lissé, effaçant ainsi la discontinuité préjudiciable. Outre l'existence et l'unicité des solutions pour les deux approches (problèmes « discontinu » et « régularisé ») on a vérifié qu'elles convergeaient bien vers la même [1,2]. La figure 2 montre le partitionnement du domaine pour le projet SPE10 de la figure 1 dans le cas du modèle régularisé, pour trois valeurs distinctes du critère de vitesse : **plus le critère est bas et plus les régions où l'équation de Forchheimer s'applique sont étendues**.

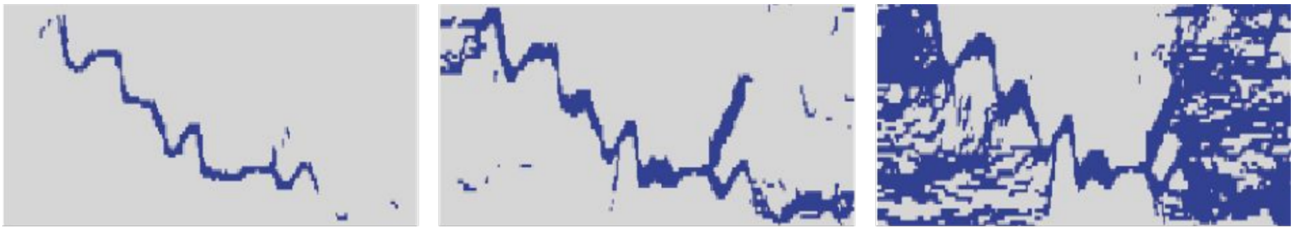


Figure 2: Régions Darcy (en gris) et Forchheimer (en bleu) obtenues avec le modèle régularisé [2] appliqué à la carte de perméabilité SPE10 de la figure 1
De la gauche vers la droite : critère de vitesse décroissant

Des efforts encore nécessaires pour mieux prédire les sous-régions de calcul

Bien que le modèle régularisé soit continu, il n'en reste pas moins fortement non linéaire dans les zones de transition ; il peut donc demeurer coûteux à utiliser numériquement. Une collaboration en cours s'attache à diminuer encore le temps de calcul, en employant le modèle régularisé comme prédicteur des régions « Darcy » et « Forchheimer », de sorte que la simulation numérique fasse directement appel à la loi prédite dans chaque région, **sans zones de transition**. Ainsi, à la fois **la discontinuité du modèle adaptatif et l'excès de non-linéarité du modèle régularisé seront éliminés**. L'étape de prédiction fera appel à des techniques d'apprentissage automatique, en faisant des hypothèses préalables sur le domaine de la simulation : géométrie des régions constitutives, conditions aux limites en pression et en vitesse comme données d'entrée du modèle.

Références:

1. FUMAGALLI, A., PATACCHINI, F. S. (2022). Model adaptation for non-linear elliptic equations in mixed form: existence of solutions and numerical strategies. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 56(2), 565–592. DOI : https://doi.org/10.1051/m2an/2022016.
2. FUMAGALLI, A., PATACCHINI, F. S. (2022). Well-posedness and variational numerical scheme for an adaptive model in highly heterogeneous porous media. *ArXiv* 2206.07970. Lien arXiv : https://arxiv.org/abs/2206.07970.
3. PICHOT, G., LEGRAND, S., KERN, M., TEPAKBONG-TEMATIO, N. (2022). How to initialize the Circulant Embedding method to speed up the generation of stationary Gaussian Random Fields? HAL 03190252. Lien HAL : https://hal.inria.fr/hal-03190252.
4. WINTER, R., VALSAMIDOU, A., CLASS, H., FLEMISCH, B. (2022). A study on Darcy versus Forchheimer models for flow through heterogeneous landfills including macropores. *Water*, 14(4), 546. DOI : https://doi.org/10.3390/w14040546.
5. CHRISTIE M. A., BLUNT. M. J. (2001) Tenth SPE Comparative Solution Project: A Comparison of Upscaling Techniques. *Society of Petroleum Engineers*, Houston, Texas. DOI : https://doi.org/10.2118/66599-MS.
6. ZHANG, T., ZHAO, Y., GAN, Q., YUAN, L., ZHU, G., CAI, Y., CAO, B. (2018). Experimental investigation of Forchheimer coefficients for non-Darcy flow in conglomerate-confined aquifer. *Geofluids*, 1–21. DOI : https://doi.org/10.1155/2018/4209197.
7. SOBIESKI, W., TRYKOZKO, A. (2014). Darcy's and Forchheimer's laws in practice. Part 1. The experiment. *Technical Sciences*, 17(4), 321–335. Lien web : https://www.infona.pl/resource/bwmeta1.element.baztech-2757664d-c0fc-43c9-9c80-dc3a5f6572e9.

Contact scientifique : Francesco Patacchini

Modèle adaptatif pour la simulation d'écoulements en milieux poreux hétérogènes

Les chercheurs IFPEN face aux effets de non-linéarité des simulations d’écoulement de fluide en milieu poreux
27 septembre 2022

Lien vers la page web :