



cea



ALLIANCES

Simulation Platform
For Nuclear Waste Repository



Composants Porflow et Traces

Journées scientifiques du GdR Momas

7 octobre 2004, Univ. Paris 6

J. Gaombalet ANDRA DS/CS



ANDRA



➤ Code de la société ACRi (Analytic & Computational Research, Inc.)

- milieux géologique : milieux poreux, massifs fracturés
- écoulements et transport mono ou multiphasiques
- code basé sur une équation générique de transport

H	T	C
<ul style="list-style-type: none">- darcy- flottabilité- sources, puits- changements de phases	<ul style="list-style-type: none">- conduction- convection- termes de production	<ul style="list-style-type: none">- diffusion- convection- dispersion- termes sources- décroissance radioactive- sorp. rév. inst.- précipitation



➤ **Traits du code :**

- coordonnées cartésiennes ou cylindriques
- maillages structurés ou non, 2D/3D, tout type d'éléments
- raffinement de maillages possible
- ajout de variables possible
- couplage dynamique ou non entre les variables
- flexibilité sur les sorties et leur contrôle

➤ **Paramètres :**

- anisotropies possibles
- dépendance possible en temps, en espace, et / variables (sous forme de tables ou de fonctions)

➤ **Conditions initiales et aux limites :**

- CI : dépendance possible en espace (tables, fonctions, champs)
- CL : dépendance possible en temps, en espace (idem)

Porflow – stratégies de résolution



➤ Discrétisation spatiale :

- Volumes Finis
- schéma hybride (centré d'ordre 2 si Péclet < 2 ;
décentré d'ordre 1 si Péclet > 2)
- Schémas alternatifs : « CONDIF » et « QUICK »

⇒ Schémas stables, mais importance du Péclet pour la précision

➤ Discrétisation temporelle :

- Schéma implicite
- gestion du pas de temps : utilisateur ou automatique
- possibilité de résolution avec pas de temps différents pour plusieurs variables

➤ Résolution matricielle :

- solveurs itératifs ;
- ADI, SOR, EXPL en interne ; « USER defined » possible
- bibliothèques NSPCG (University of Texas)
et HYPRE (LLNL - University of California)

Porflow – intégration dans Alliances



➤ Intégration dans Alliances :

- Composants hydrauliques et Transport généralisé (\approx réactif)
- code « boîte noire » : passage des données par fichier

➤ Remarque :

- code commercial



➤ **Code de l'IMFS (P. Ackerer, H. Hoteit, P. Siegel) :**

- « Transport RéActif de Contaminant dans les Eaux Souterraines »
- « Transport of RadioACTIVE Elements in Subsurface »

➤ **Equations résolues par le code :**

- Hydraulique saturée stationnaire ou instationnaire
- Transport généralisé (couplé ou non à l'hydraulique)
- Bientôt : thermique (couplée à l'hydraulique)

➤ **Intégration dans Alliances :**

- Composants hydrauliques en saturé et Transport généralisé
- Passage des données par fichier ou par mémoire
- Implémentation en cours pour le couplage Chimie-Transport



➤ Possibilités du code :

- 2D/3D en coordonnées cartésiennes ; tout type d'éléments
- couplage dynamique hydraulique transitoire - transport
- forts contrastes de paramètres autorisés
- anisotropies des propriétés (tenseurs pleins)
- variation en temps :
 - les CL et presque tous les paramètres = $f(t)$
- variation en espace :
 - propriétés variables par zones
 - CL, CI et sources affectées par mailles (de bord pour CL)



➤ Méthodes de résolution :

- Hydraulique : EFMH

⇒ bonne approximation du champ de vitesses
pour le transport

- Transport : EFMH / EFD avec séparation des opérateurs

➤ Dissolution/Précipitation :

- algorithme de Picard

- schéma mixte Picard / Newton

Traces – time splitting

$$\frac{\partial C}{\partial t} + AC = 0 \quad \text{avec} \quad A = A_1 + A_2 + \dots + A_q$$

$$\text{Euler standard : } \frac{C^{n+1} - C^n}{\Delta t} = -AC^n = -(A_1 + \dots + A_q)C^n$$

$$\text{Splitting : } \star \frac{C^{n+i/q} - C^{n+(i-1)/q}}{\Delta t/q} = -qA_i C^{n+(i-1)/q} \quad \text{pour } i = 1, \dots, q$$

$$\star C^{n+1} = \prod_{i=1}^q (1 - \Delta t A_i) C^n$$

$$\star \frac{C^{n+1} - C^n}{\Delta t} = -AC^n + \Delta t \left(\prod_{i,j} A_i A_j C^n \right) + o(\Delta t^2)$$





- dans Traces

$$\left\{ \begin{array}{l} A_1 = -\text{div}(C_i \cdot \vec{U}) \\ A_2 = \text{div}(\overline{D_i^*} \cdot \vec{\nabla} C_i) - \lambda_i \cdot \phi_e \cdot R_i \cdot C_i + Q_i \end{array} \right.$$

⇒ Convection et dispersion sont résolues séparément

- EFD pour la partie convective :

⇒ Résolution précise, même si convection pure

⇒ Continuité du flux convectif

- EFMH pour la partie dispersive :

⇒ Pas d'influence du Péclet

⇒ Prise en compte aisée des tenseurs pleins

⇒ Bilan de masse exact sur chaque élément

⇒ Continuité du flux dispersif

Traces – Éléments Finis Discontinus (EFD ou DGM)



ANDRA



$$\frac{\partial(C)}{\partial t} + \text{div}(C\underline{U}) = 0$$

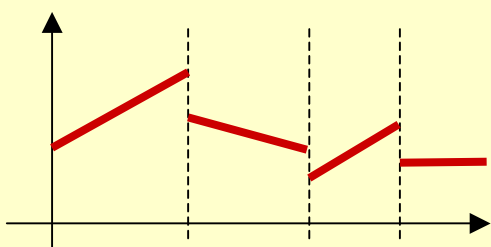
- les EFD (Reed & Hill 1973) sont à cheval entre EF et VF type-Godunov

- EF \Rightarrow

- approximation P1 **discontinue**

$$C_K(\vec{x}) = \sum_{j=1}^{NB_SOMMETS} C_{(K,j)} w_j(\vec{x})$$

- **formulation faible :**

$$\int_K \frac{\partial(C_K)}{\partial t} w_i dv = \int_K (C_K \bar{U}) \cdot \nabla(w_i) dv - \int_{\partial K} w_i C_K \bar{U} \cdot \vec{n} ds$$


- VF \Rightarrow calcul d'un « flux numérique » :
résolution d'un « problème de Riemann » aux interfaces

\Rightarrow valeurs des C_K « amont » $\int_{\partial K} w_i C_K \bar{U} \cdot \vec{n} ds = \int_{\partial K} w_i C_K^{IN/OUT} \bar{U} \cdot \vec{n} ds$

- stabilisation du schéma par des **limiteurs de pente** et RK2

\Rightarrow strict respect du critère de courant (critère CFL)



➤ **Solveur de base :**

PCG avec procédure d'Eisenstat (*systeme symétrique*)

➤ **Librairies :**

- NSPCG
- SLAP

⇒ *Intérêt pour le futur (VF et/ou EFD implicite)*

➤ **Solveur direct :**

- gauss (LU)