

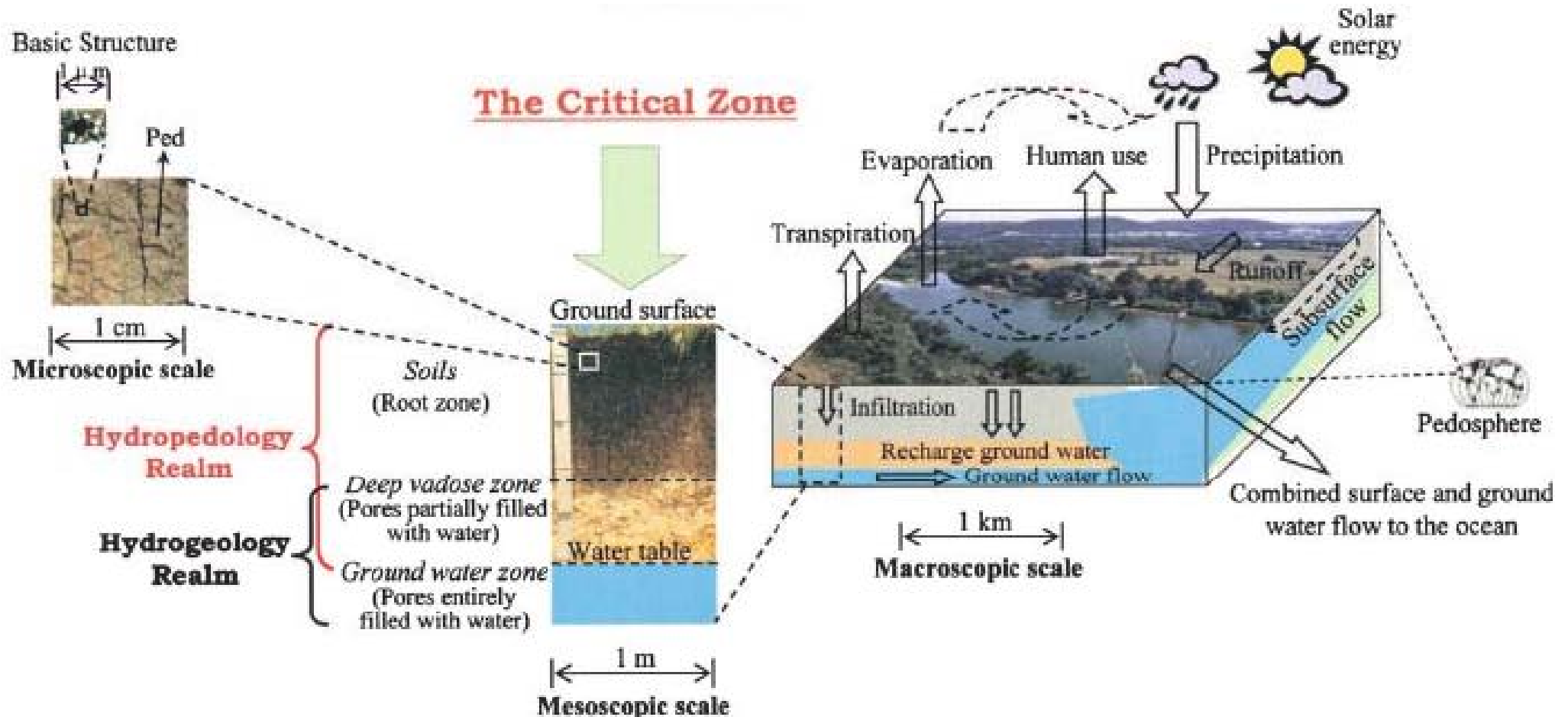
Réunion de lancement du projet MICAS
Modélisation et calcul intensif pour la simulation d'aquifères

Challenge scientifique n°1
Macro dispersion dans des milieux poreux hétérogènes 3D

*Équipe SAGE de l'INRIA de Rennes, Équipe Transferts de
Géosciences de Rennes, Équipe CDCSP de l'Université de Lyon1
et Équipe Géoenvironnement de l'Université du Havre*

C'est quoi un aquifère ???

Un aquifère est un corps (couche, massif) de roches perméables à l'eau, à substrat et parfois à couverture de roches moins perméables, comportant une zone saturée et conduisant suffisamment l'eau pour permettre l'écoulement significatif d'une nappe souterraine et le captage de quantités d'eau appréciables. L'aquifère est l'ensemble du milieu (contenant) et de l'eau (contenu). En fonction de son taux de remplissage un aquifère peut comporter une zone non saturée.



Échelles considérées

Observations faites

Échelle du bassin ou
Échelle macroscopique



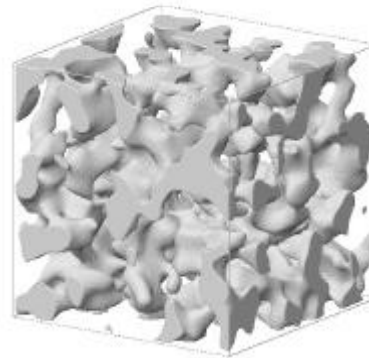
Formations géologiques
différentes

Échelle de la strate ou
Échelle mésoscopique

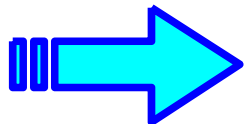


Épaisseur variable
des couches

Échelle du pore ou
Échelle microscopique



Diamètre variable des pores

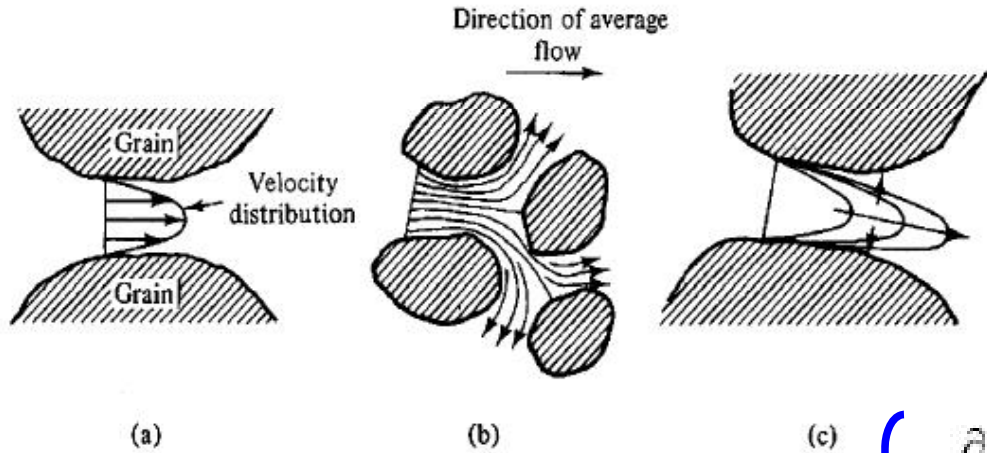


Milieu naturel = Milieu hétérogène (Freez et al., 1979; Koltermann et al., 1996)

Impact des fluctuations du champ d'écoulement sur le transport d'un polluant

A l'échelle du pore

Dispersion Mécanique = Dispersion cinématique



- A. Profil des vitesses paraboliques
- B. Fluctuations des lignes de courant
- C. Dimensions variables des pores

Loi de transfert analogue à la loi de Fick

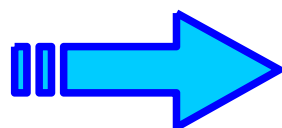
$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D_0 \nabla C)$$

$$\overline{D} = [D_{ij}] \quad \text{avec} \quad D_{ij} = \delta_{ij} \alpha_T |U| + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{U_i U_j}{|U|}$$

A une échelle supérieure

Dispersion Mécanique = Dispersion cinématique + Macro dispersion

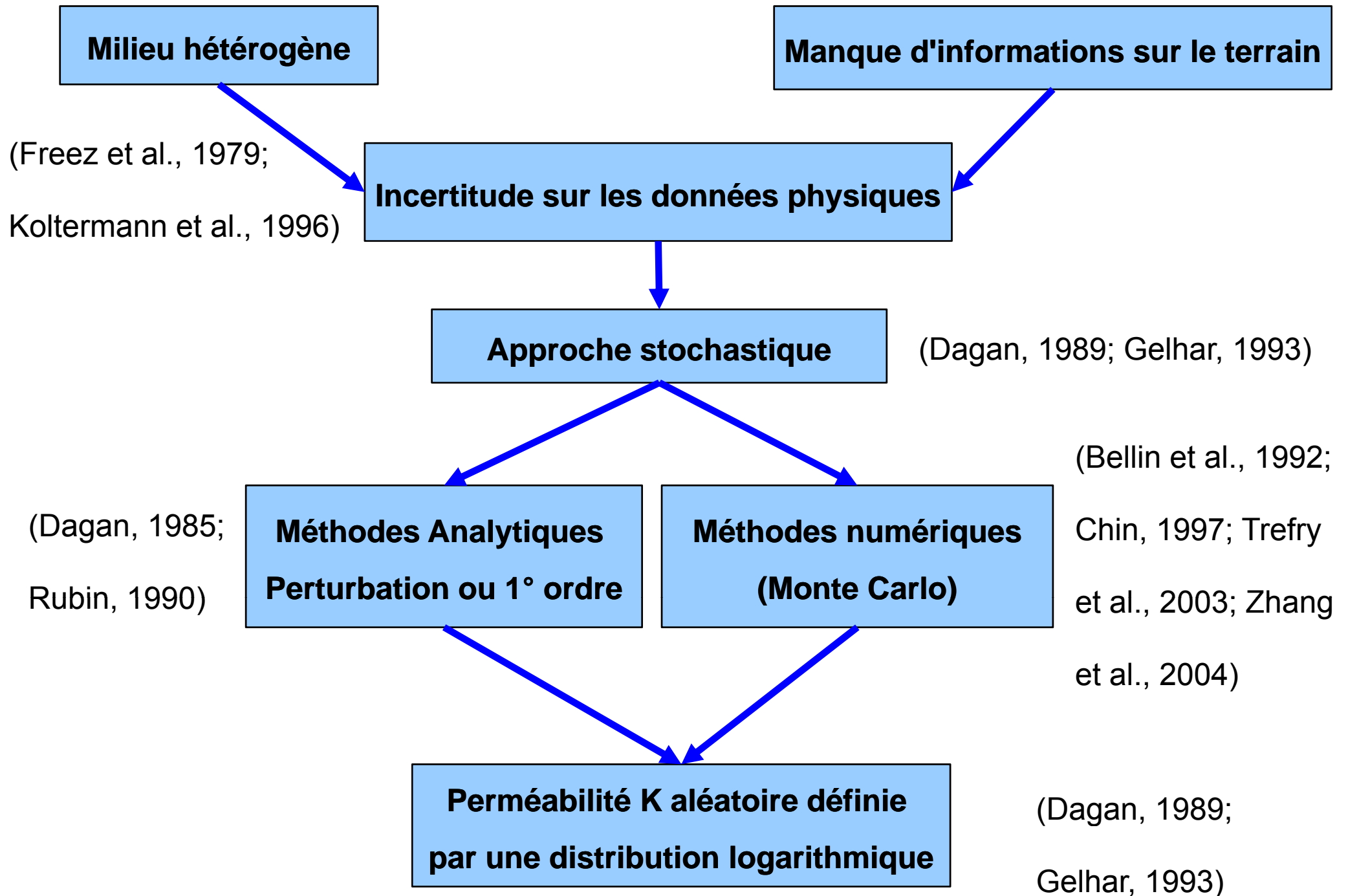
Tenseur de dispersion non constant dans le temps



Loi de Fick non valide

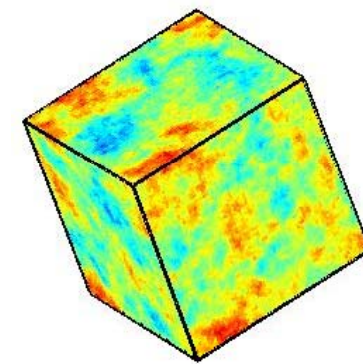
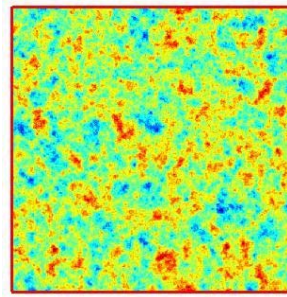
(Gelhar et al., 1979; Smith et al., 1980)

Détermination des lois de transfert

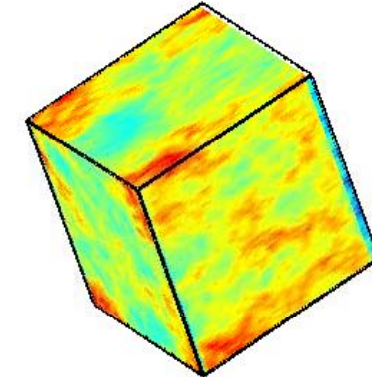
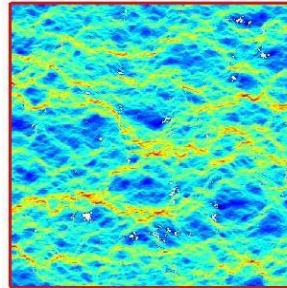


Étapes du Monte Carlo

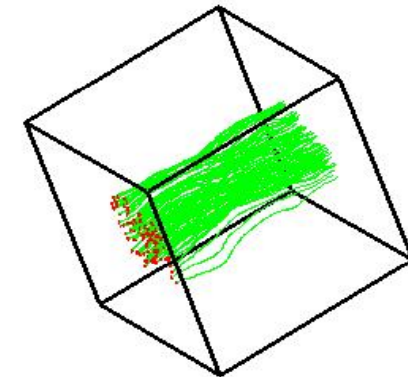
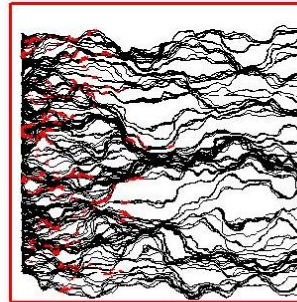
1- Génération champ de perméabilité



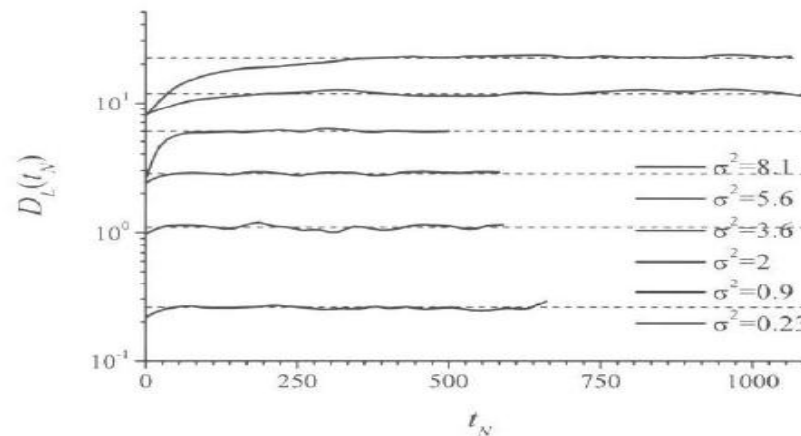
2- Détermination champ d'écoulement



3- Résolution transport de solutés



4- Détermination macro dispersion



En 3D c'est pas fait !!!

Pourquoi utiliser le calcul intensif ???

Ordres de grandeur

Modèle physique

$$\lambda_y = 0,1 \text{ à } 100 \text{ m}$$

$$\sigma_y^2 = 1 \text{ à } 7$$

$$Pe = 100 \text{ à } \text{infini}$$

(Woodbury et al., 1991;

Neuman et al., 1993)

Modèle numérique en 2D

Taille grille = 16384 dx * 8192 dy

Taille système N = 134.10⁶

Nombre de particules = 10000

Nombre de simulations = 100

Progrès récents

Solveurs et
bibliothèques parallèles

Architecture des
ordinateurs parallèles

HYPRE (solveur multigrille V-cycle, Falgout, 2005)

PSPASES (solveur factorisation de Cholesky multi frontale, Joski et al., 1997)

FFTW (estimation transformée de Fourier, Douglas et al., 2002)

MPI (communication entre les processeurs)



En 3D c'est pire !!!!

Software PARADIS (PARAllel DISpersion)

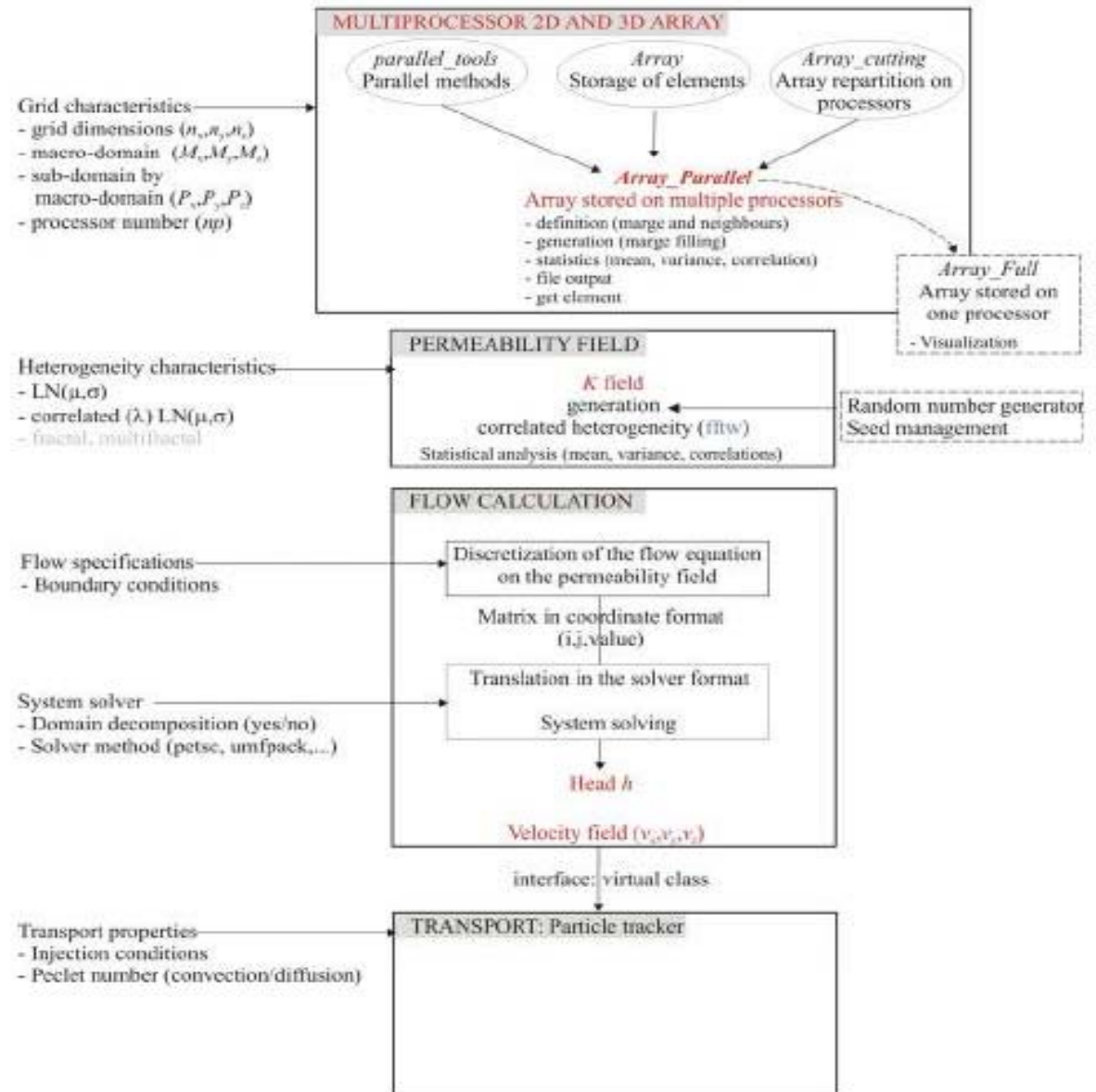
Simulation de l'écoulement de l'eau en régime permanent et du transport de solutés inertes dans un domaine rectangulaire 2D

Déterminer les lois de transport :

- Caractériser le régime asymptotique
- Évaluer la macro dispersion

Spécifications du software :

- Parallélisme (MPI)
- Orienté objet (C++)
- différents modules (gestion de la grille, génération perméabilité, estimation écoulement, estimation macro dispersion et gestion des calculs)



Software PARADIS (PARAllel DISpersion)

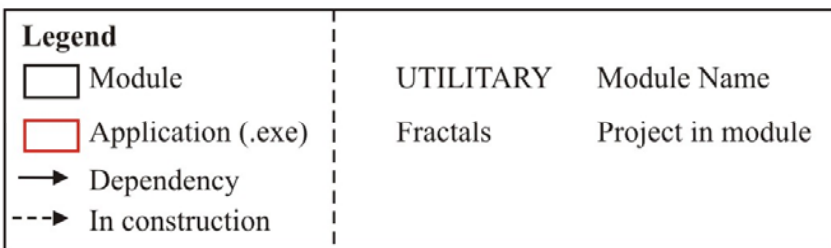
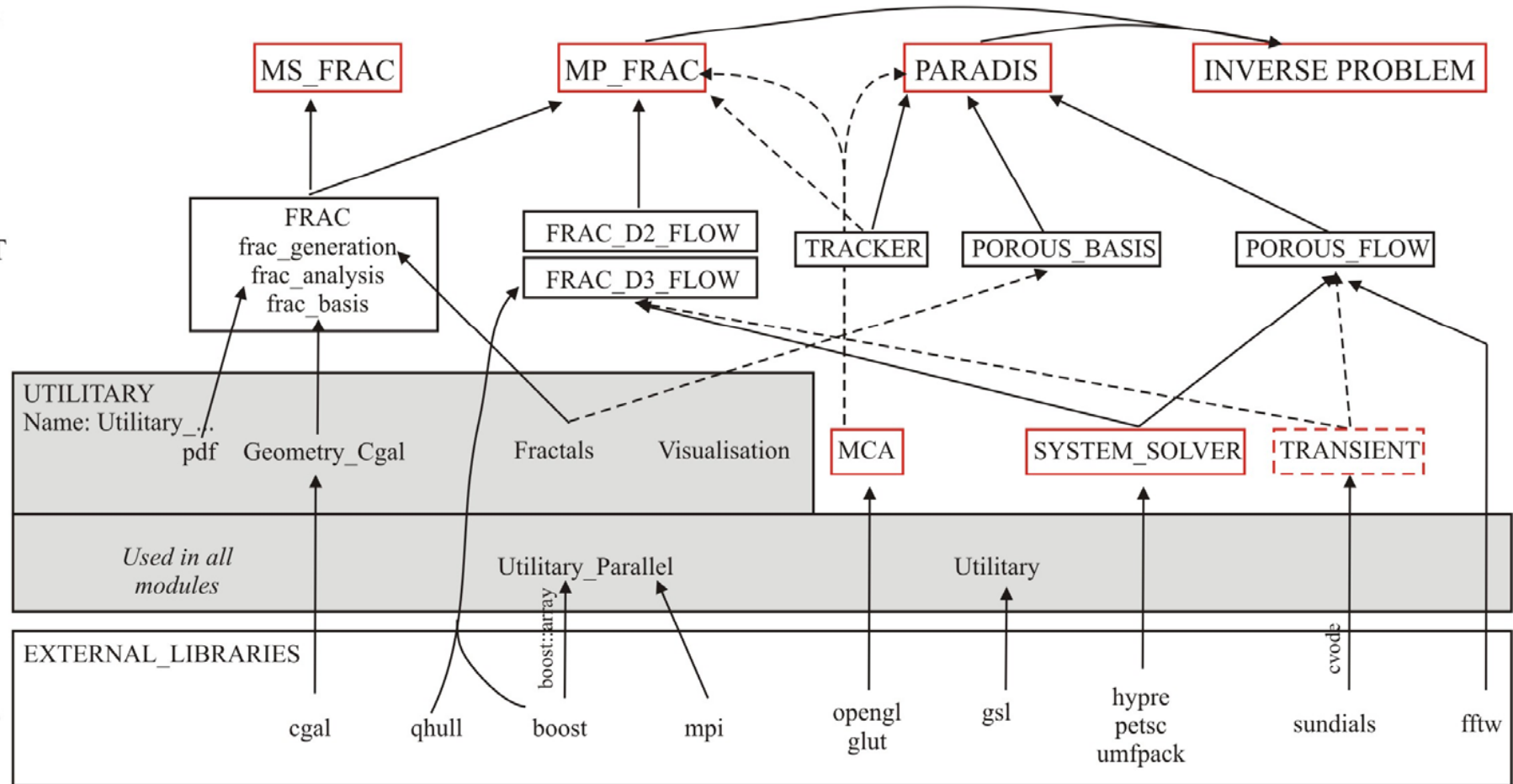
HYDROLAB

Directory in the previous hierarchical structure

APPLI

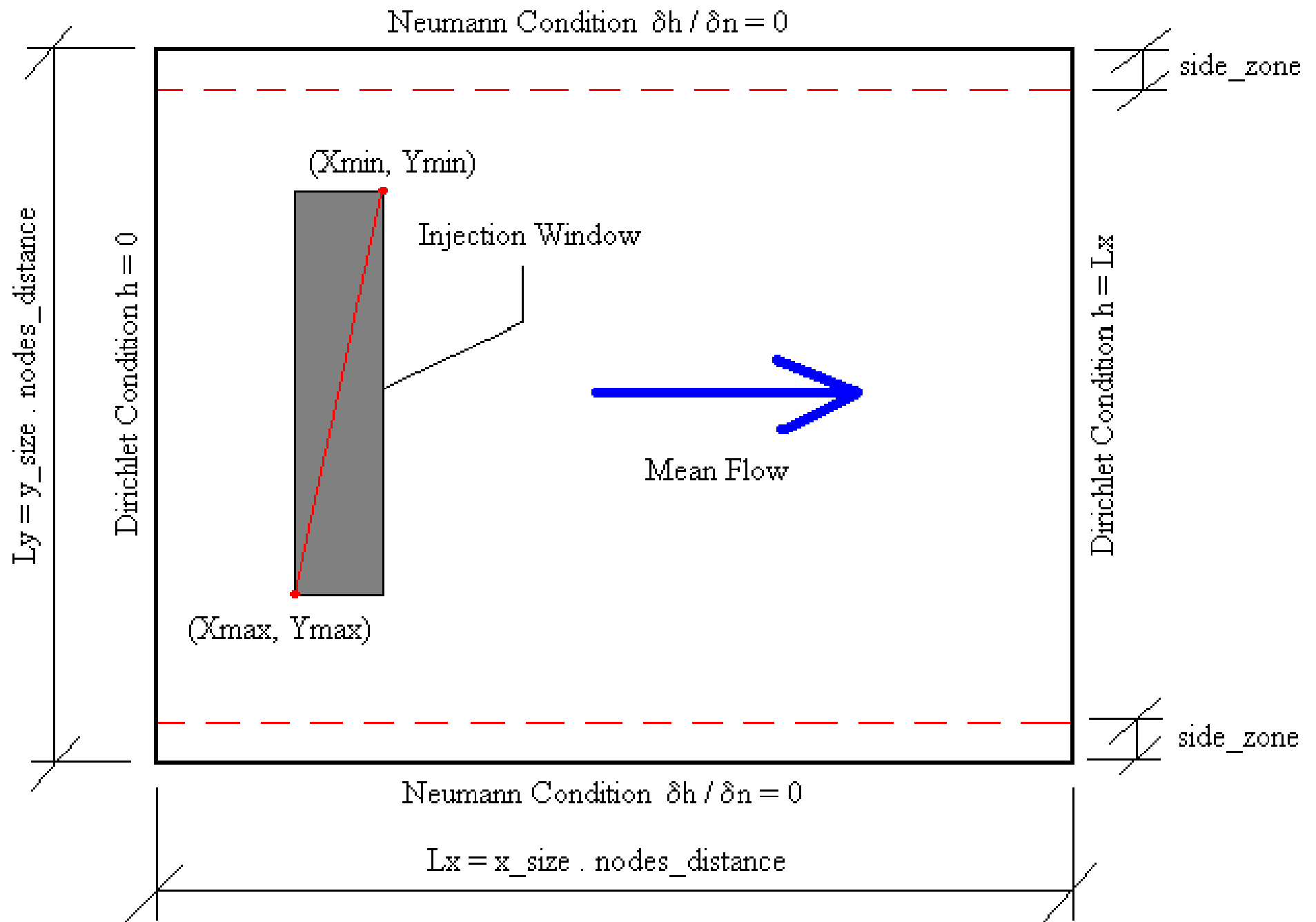
LIB_INT

LIB_EXT



Modèles physiques

Géométrie



Modèles physiques

Champ de perméabilité

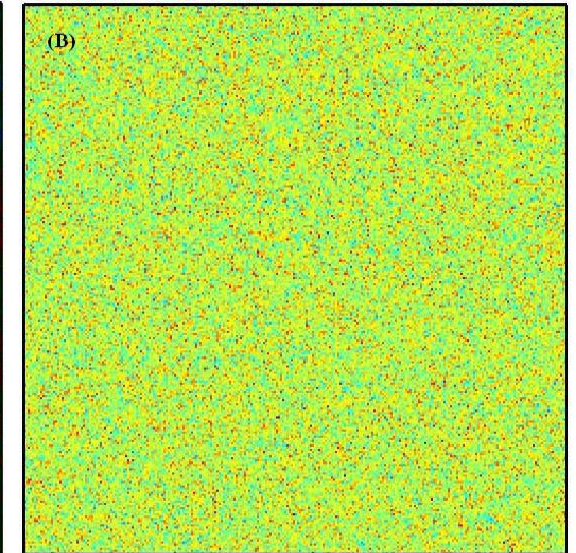
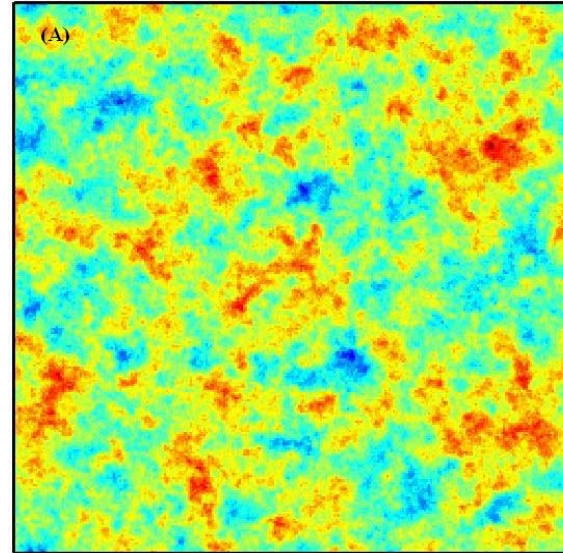
→ Aléatoire corrélé

Distribution logarithmique $Y = \ln(K)$

Fonction de covariance

$$C_y(\mathbf{r}) = \sigma_y^2 \exp(-|\mathbf{r}|^2/\lambda_y)$$

Moyenne : m_y

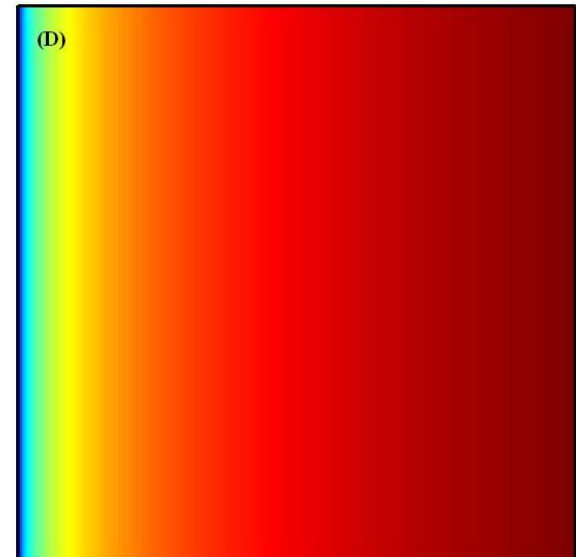
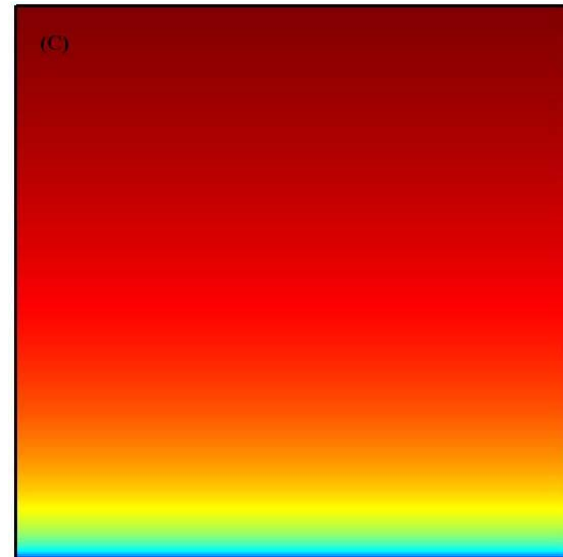


→ Autres distributions possibles

Aléatoire non corrélé

Stratifié horizontalement ou verticalement

Homogène



Hypothèse : porosité $\varepsilon = 1$

Modèles physiques

Ecoulement permanent

{	Équation de conservation	$\nabla \cdot V = 0$	+	Conditions aux limites
	Loi de Darcy	$V = -K \nabla h$		<ul style="list-style-type: none">•Dirichlet (charges hydrauliques imposées)•Neumann (flux nuls)

Transport d'un soluté inerte

{	Équation de convection dispersion		+	$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (CV) - \nabla \cdot (D \nabla C) = 0$	Conditions aux limites
	Tenseur de dispersion	$D = D_m I$		<ul style="list-style-type: none">•Dirichlet (concentration nulle à l'infini)•Neumann (flux nuls)	
	Nombre de Péclet	$Pe = \lambda U / D_m$		Conditions initiales	

•Injection ponctuelle

Modèles physiques

Macro dispersion

Moment d'ordre 0 ou masse totale

$$M(w, t) = \int_{\Omega} \varepsilon C(w, x, y, t) ds$$

Moments d'ordre 1 ou centre de masse

$$\left\{ \begin{aligned} \bar{x}(w, t) &= \frac{1}{M(w, t)} \int_{\Omega} \varepsilon C(w, x, y, t) x ds \\ \bar{y}(w, t) &= \frac{1}{M(w, t)} \int_{\Omega} \varepsilon C(w, x, y, t) y ds \end{aligned} \right.$$

Moments d'ordre 2 ou étalement

$$\left\{ \begin{aligned} S_x(w, t) &= \frac{1}{M(w, t)} \int_{\Omega} \varepsilon C(w, x, y, t) (x - \bar{x})^2 ds \\ S_y(w, t) &= \frac{1}{M(w, t)} \int_{\Omega} \varepsilon C(w, x, y, t) (y - \bar{y})^2 ds \end{aligned} \right.$$

Dérivées temporelles des moments ou dispersions

$$\left\{ \begin{aligned} D_x(w, t) &= \frac{dS_x(w, t)}{dt} \\ D_y(w, t) &= \frac{dS_y(w, t)}{dt} \end{aligned} \right.$$

Est-ce qu'on peut améliorer les modèles physiques ???

Géométrie

Dimensions du problème : 1D, 2D et 3D

Champ de perméabilité

Milieu naturel = milieu anisotrope ($K_x \neq K_y \neq K_z$)

Autres distributions pour K ?

Et la porosité ε ?

Ecoulement

Régime instationnaire

Conditions aux limites

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \text{div}(-K \nabla h) + q = 0$$

Transport

Dispersion cinématique + Réactions chimiques + Sorption / Désorption

Conditions aux limites + Conditions initiales

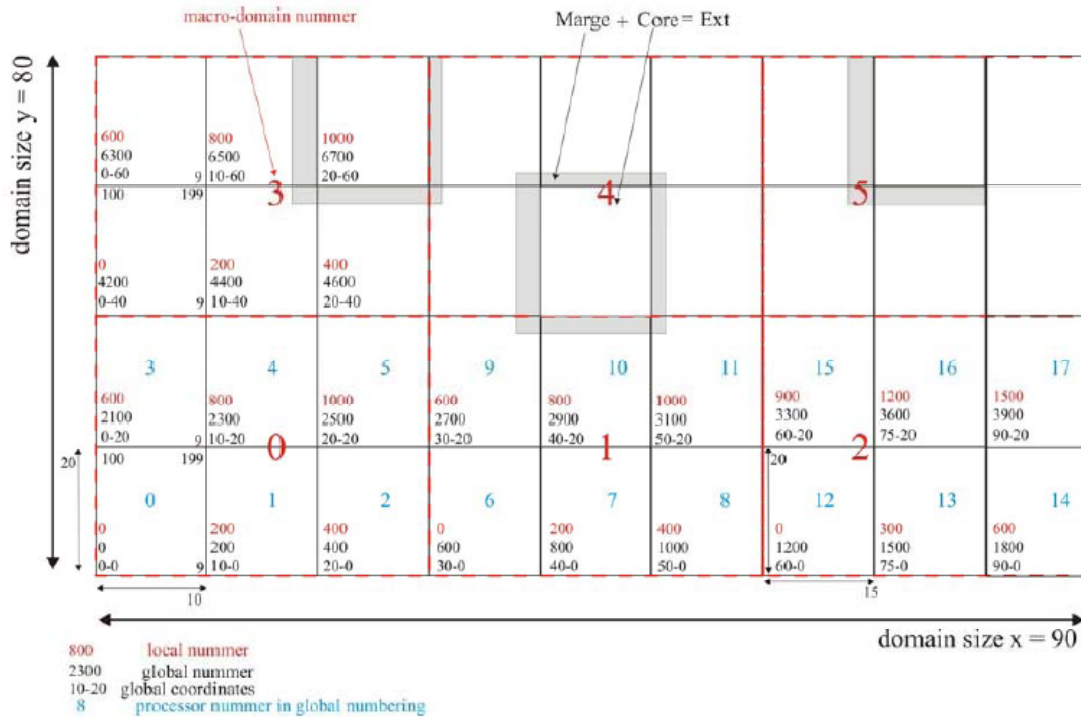
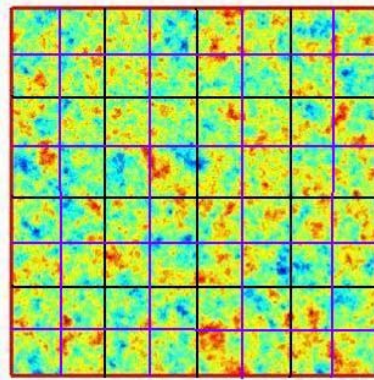
$$\frac{\partial(\omega_c C)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \cdot \left[D_L \cdot \frac{\partial}{\partial x} (\omega_c C) \right] - \frac{\partial}{\partial x} \cdot (U \omega_c C) + \frac{\partial(\rho_p \omega_c)}{\partial t}$$

$$\frac{\partial(\rho_p \omega_c)}{\partial t} = \rho_p K_{\text{rel}} (\omega_o - \omega_c) - K_{\text{dep}} \omega_c C$$

Modèles numériques

Maillage

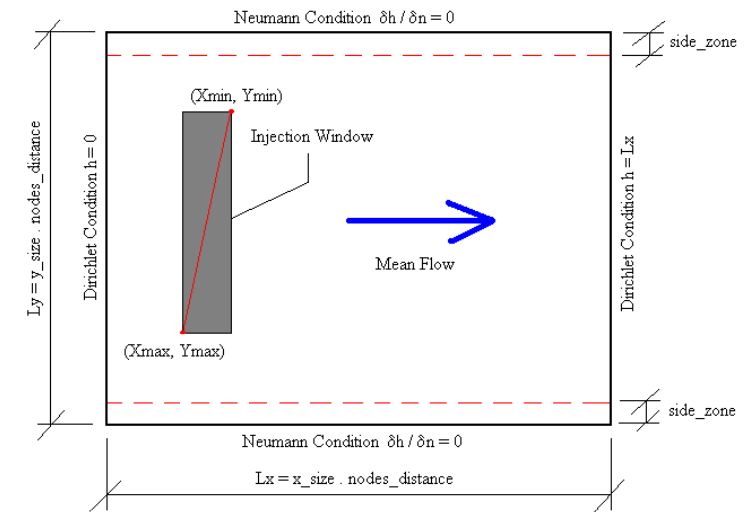
Grille régulière 2D
Zone d'injection



Génération de la perméabilité K

Simulation spectrale FIM (Fourier Integral Method, Yao, 2004)

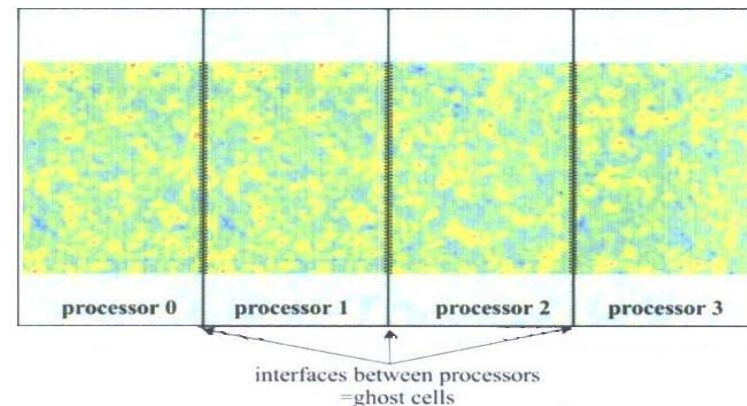
Librairie FFTW (Douglas, 2002)



Décomposition de domaine

Découpage en bandes horizontales ou verticales et en blocs

Macro domaine / Sous domaine / Marge



Modèles numériques

Discrétisation spatiale de l'écoulement

Méthode de volumes finis $Ax = B$
(Chavent et al., 1991; Hundsdorfer et al., 2003)

Méthode multigrille (Librairie HYPRE)

Méthode directe (Librairie PSPASES)

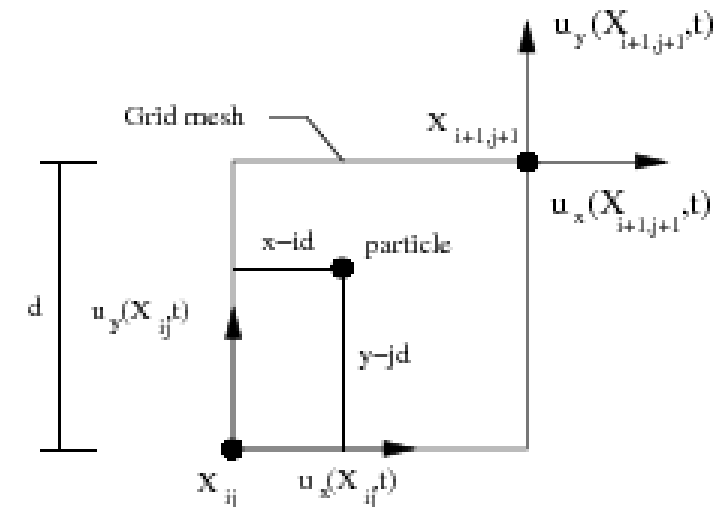
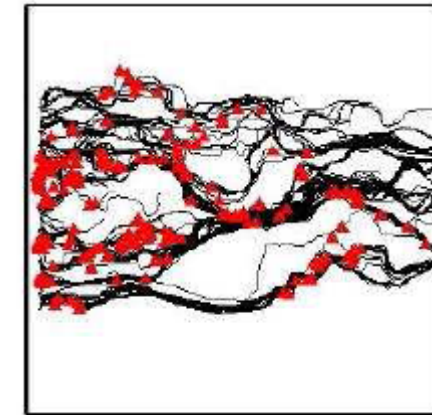
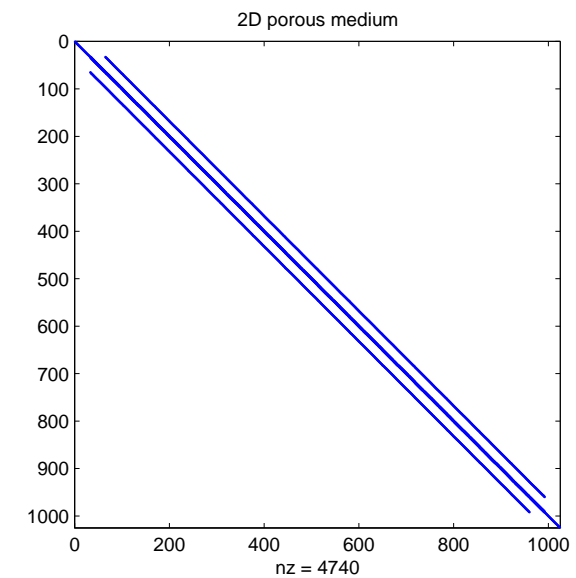
Modèle transport (Pollock, 1988; Andrew et al.,
1990; Labolle, 2000, Delay, 2005)

Marche aléatoire + Schéma explicite d'ordre 1

$$\mathbf{X}(t + dt) = \mathbf{X}(t) + dt \cdot \mathbf{V} + \sqrt{2D_m dt} \mathbf{Z} \mathbf{w}$$

Interpolation linéaire pour évaluer la vitesse d'une particule

Échange des particules entre les processeurs avec les opérations send et recv de la librairie MPI



Modèles numériques

Macro dispersion

Moment d'ordre 0 ou masse totale $M(w, t) = \frac{\text{Nombre de particules présentes}}{N_p}$

Moments d'ordre 1 ou centre de masse $\left\{ \begin{array}{l} \bar{x}(w, t) \approx \frac{1}{N_p} \sum_{m=1}^{N_p} x_m(w, t) \\ \bar{y}(w, t) \approx \frac{1}{N_p} \sum_{m=1}^{N_p} y_m(w, t) \end{array} \right.$

Moments d'ordre 2 ou étalement $\left\{ \begin{array}{l} S_x(w, t) \approx \frac{1}{N_p} \sum_{m=1}^{N_p} x_m(w, t)^2 - \bar{x}(w, t)^2 \\ S_y(w, t) \approx \frac{1}{N_p} \sum_{m=1}^{N_p} y_m(w, t)^2 - \bar{y}(w, t)^2 \end{array} \right.$

Dérivées temporelles des moments ou dispersions

$$D_x(w, t) = \frac{dS_x(w, t)}{dt}$$

$$D_y(w, t) = \frac{dS_y(w, t)}{dt}$$

Monte Carlo




$$D_x(t) \approx \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} D_x(w_i, t)$$

$$D_y(t) \approx \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} D_y(w_i, t)$$

Est-ce qu'on peut améliorer les méthodes numériques ???

Écoulement



Écoulement en milieu anisotrope = Éléments finis mixtes avec maillage non structuré

Écoulement 3D = Méthode de sous-domaines avec Aitken-Schwarz

Est-ce qu'on peut améliorer les méthodes numériques ?

Transport

1° Niveau de modification

Particle Tracking method

Performances du parallélisme : Kaludercic, 2004

Physiques

Dispersion : Kinzelbach, 1987

Sorption avec isotherme : Tompson, 1993

Sorption avec cinétique : Kinzelbach, 1987

Réaction du 1° Ordre : Huang et al., 2003

Est-ce qu'on peut améliorer les méthodes numériques ?

Transport

2° Niveau de modification

Particle Tracking method - Vortex Method

Points communs

Lignes caractéristiques

Adaptation à la forme de l'écoulement

Introduction simple de lois physiques

Pas de diffusion numérique

Différences : suivi d'une particule ou d'un ensemble de particule

Traitement de
la diffusion

Marche aléatoire (Scheidegger, 1954)

PSE (Particle strength exchange, Degond et al., 1989)

Vitesse de diffusion (Degond et al., 1990)

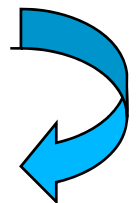
Probabiliste

Déterministes

Traitement de la dispersion : Gradient de dispersion pour Particle Tracking method

(Kinzelbach, 1987)

Analogie avec l'équation de Fokker Planck



Est-ce qu'on peut améliorer les méthodes numériques ?

Transport

Particle Tracking method ou Vortex Method

Conservation locale du fluide

dans une maille



Schéma d'interpolation à

divergence nulle de la vitesse

Conservation locale de la
masse du soluté aux interfaces



Discontinuité de la vitesse

et de la dispersion



Interpolation linéaire ou bilinéaire / Réflexion

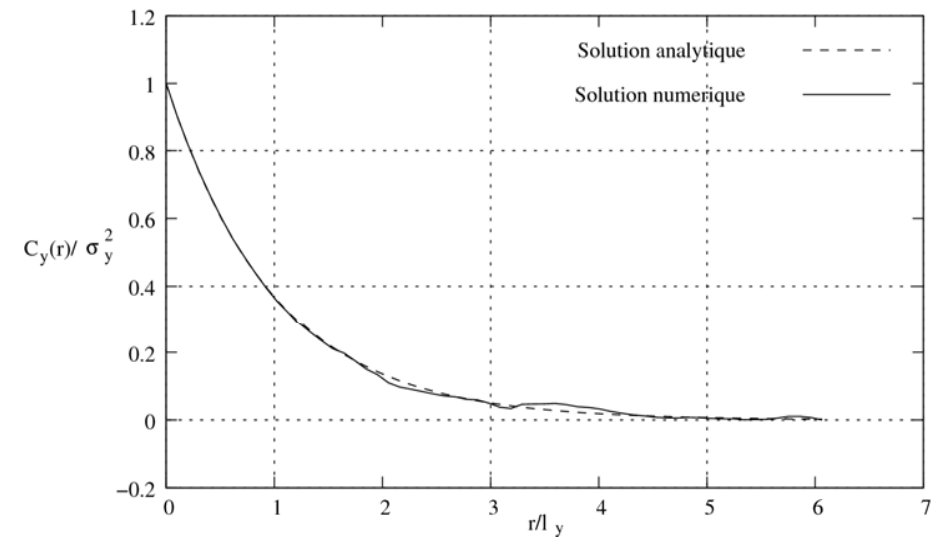
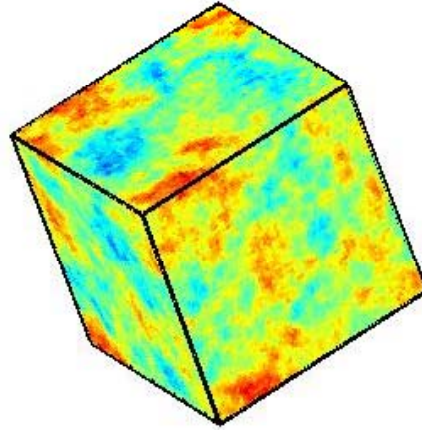
Labolle, Uffink, Semra, Ackerer, Hoteit ...

Pour Vortex method, 1 pas de temps commun à toutes les particules

Connaître le champ de concentration : but Vortex Method

Validation

Génération perméabilité K



Grille 2048*128*128

Données en entrée		Données en sortie		Erreur relative (en %)	Erreur relative (en %)
Variance $\sigma_{y\text{entrée}}^2$	Longueur de corrélation $\rho_{y\text{entrée}}$	Variance $\sigma_{y\text{sortie}}^2$	Longueur de corrélation $\rho_{y\text{sortie}}$		
0,25	10,00	0,215922	9,73073	13,63	2,69
1,00	10,00	0,863688	9,73073	13,63	2,69
2,00	10,00	1,727380	9,73073	13,63	2,69
4,00	10,00	3,454760	9,73073	13,63	2,69
6,25	10,00	5,398060	9,73073	13,63	2,69

Analyse :

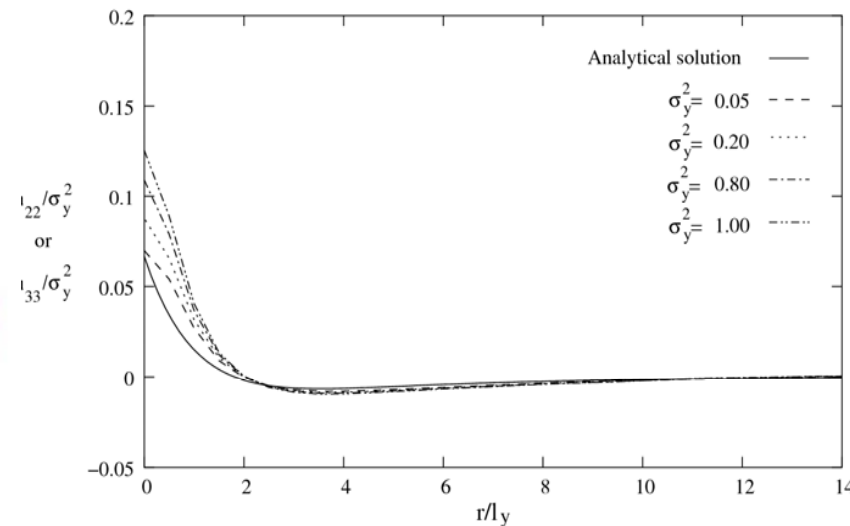
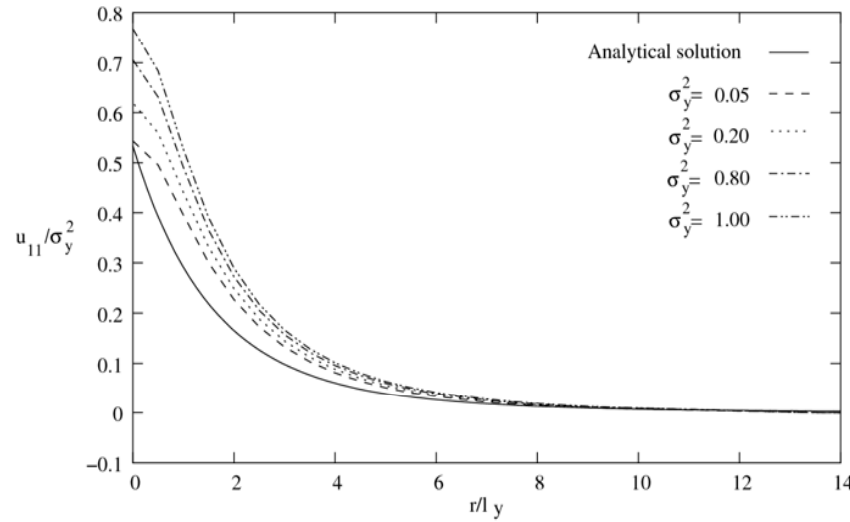
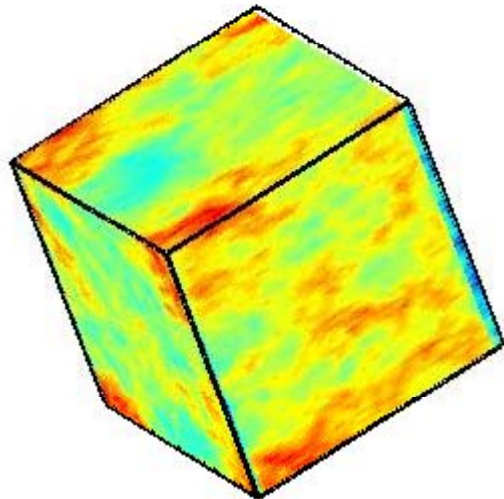
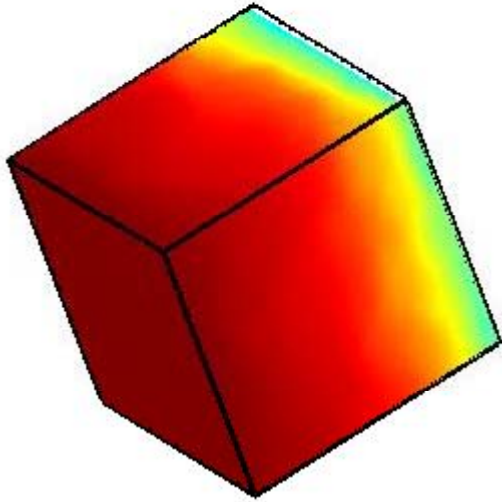
- Estimation moyennée des paramètres.

- Influence du pas de maille.

Validation

Estimation écoulement

$\sigma_{y\text{sortie}}^2$	Variance U_{xx}	Solution analytique	Erreur relative (en %)	Moyenne \underline{U}_x	Solution analytique	Erreur relative (en%)
0,215992	0,111079	0,115196	+3,820	1,02255	1,00	-2,255
0,870477	0,57623	0,464254	-24,12	1,09825	1,00	-9,825
1,727380	1,63410	0,921269	-77,37	1,20931	1,00	-20,93
3,454760	6,27052	1,842540	-240,3	1,46520	1,00	-46,52
5,398060	19,2398	2,878970	-568,3	1,80932	1,00	-80,93

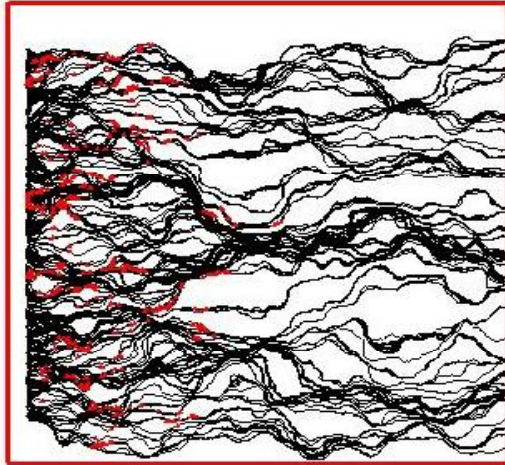


Analyse :

- Estimation moyennée des paramètres.
- Comparaison à d'autres méthodes numériques ou à la méthode de perturbations

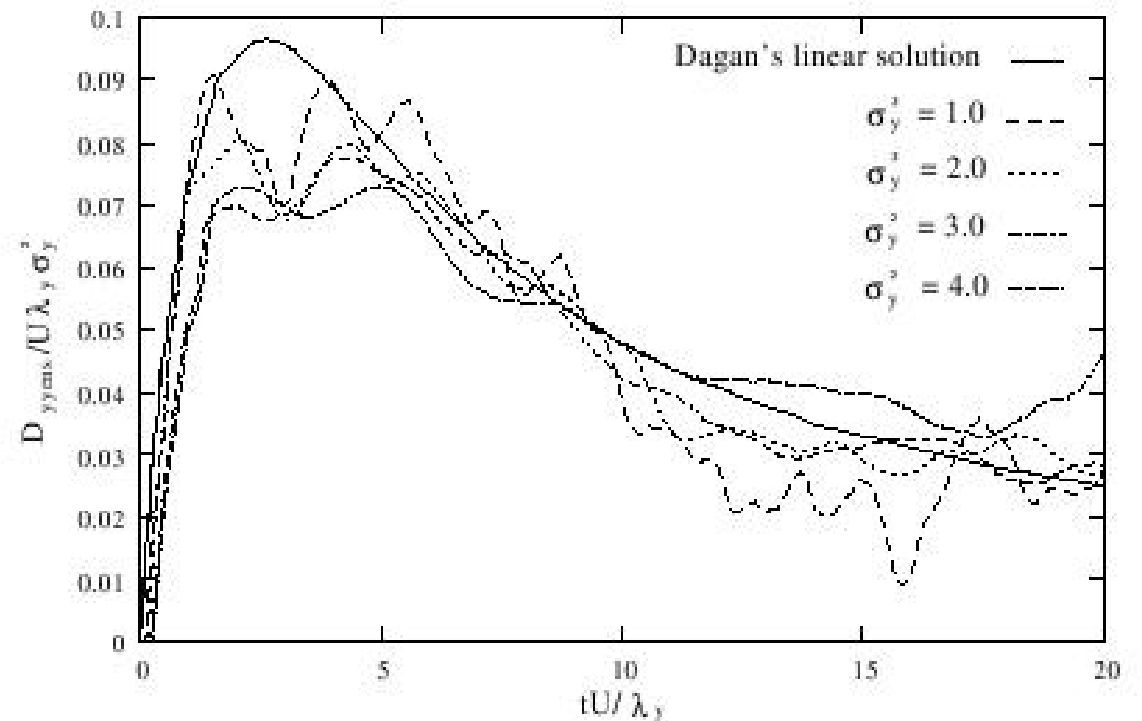
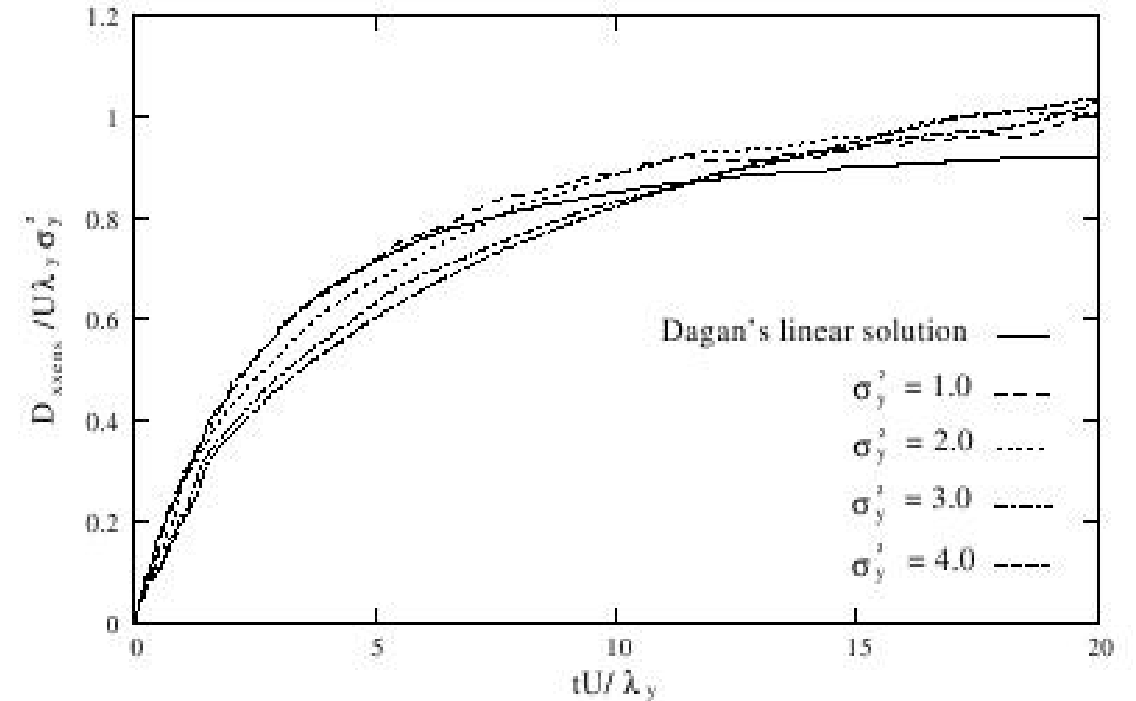
Validation

Estimation de la macro dispersion

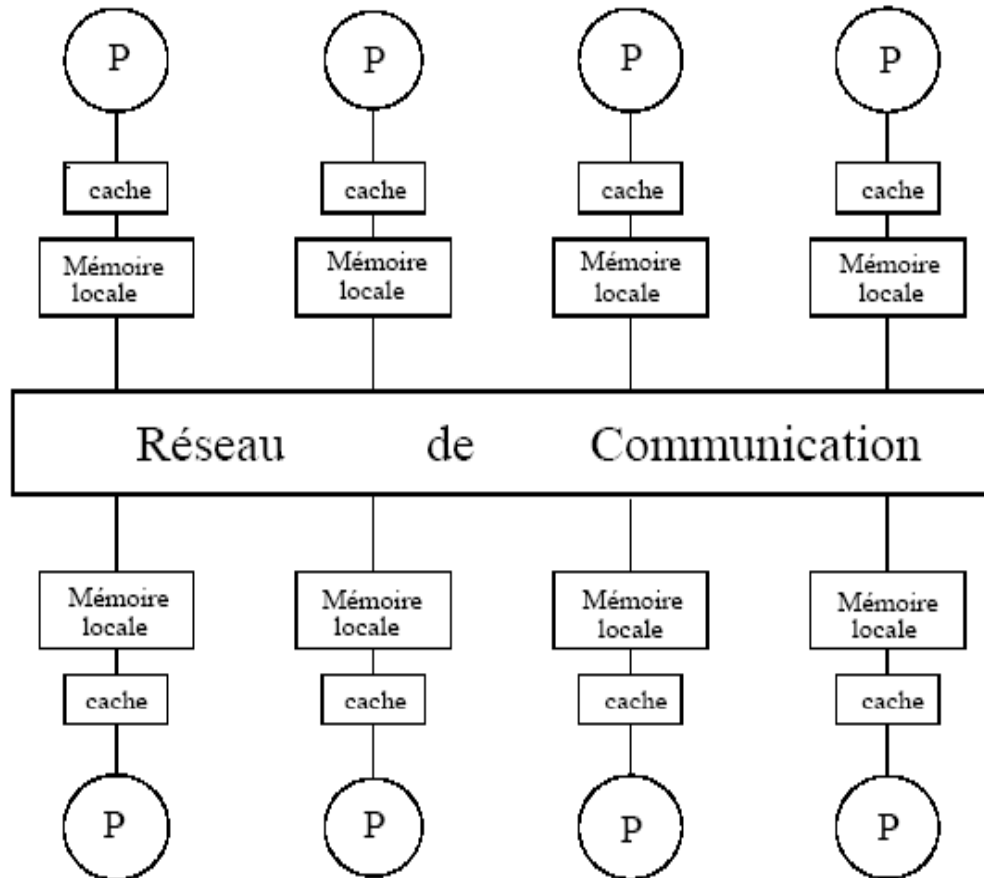


Analyse :

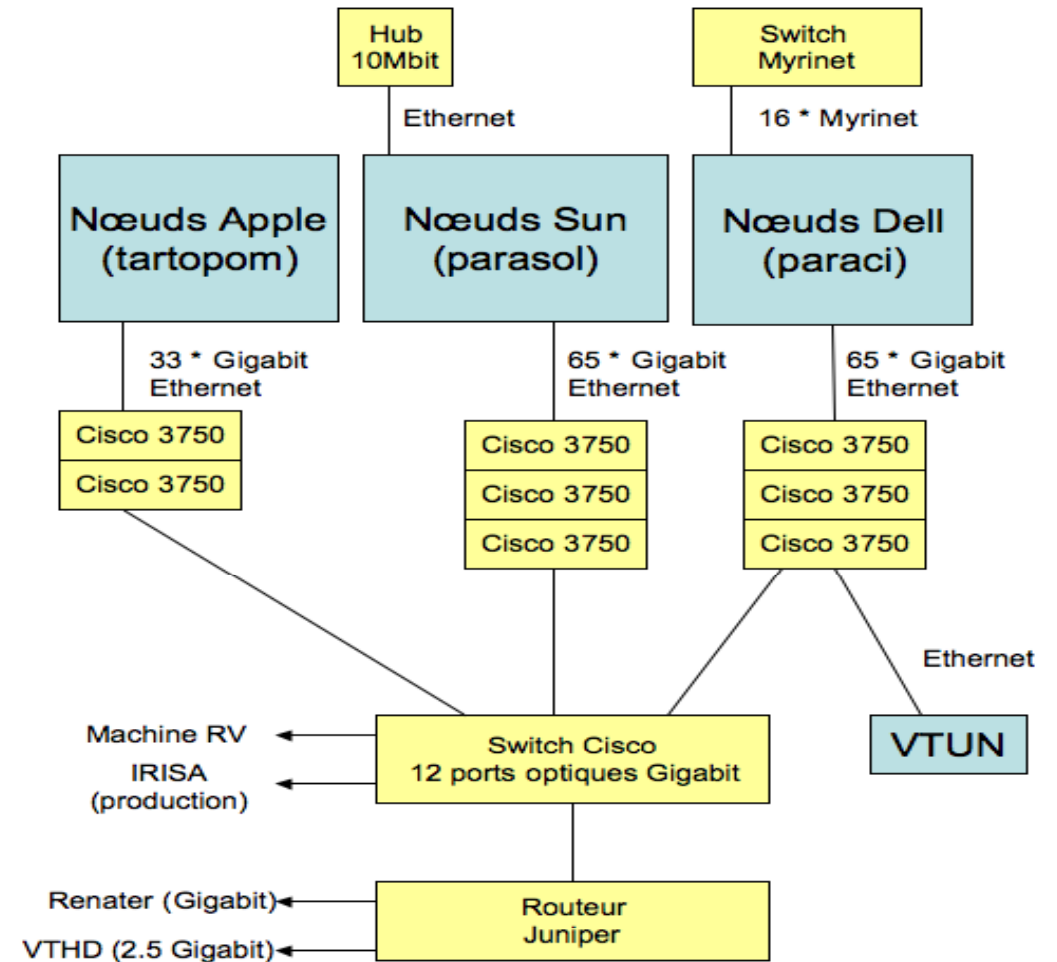
- Estimation moyennée des paramètres
- Comparaison à d'autres méthodes numériques ou à la méthode de perturbations



Architecture Parallèle



Mémoire distribuée



2 noeuds de 32 bi – processeurs
(Proc AMD Opteron 2Ghz avec 2Go de RAM)

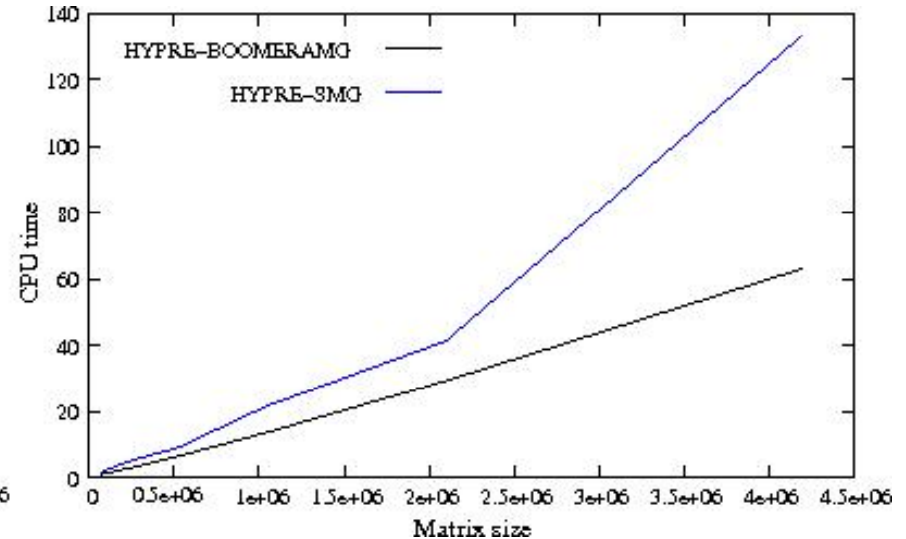
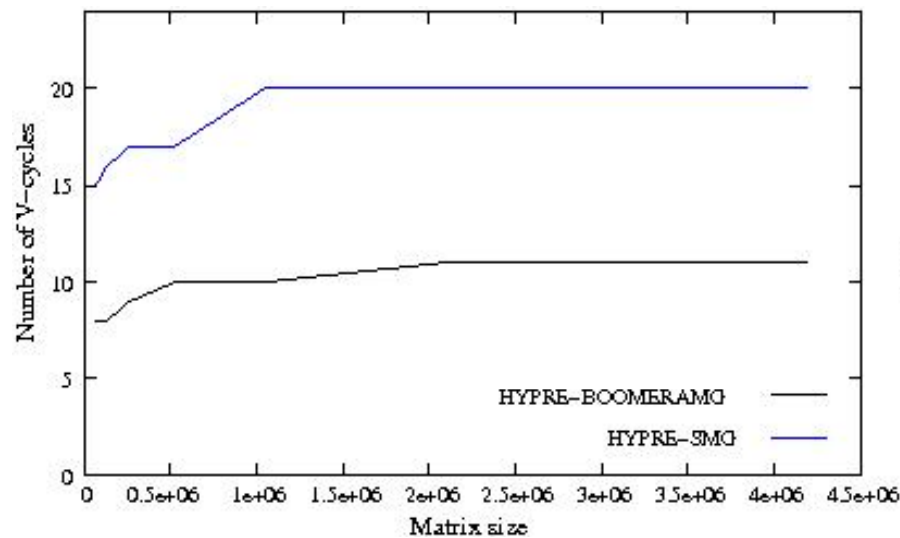
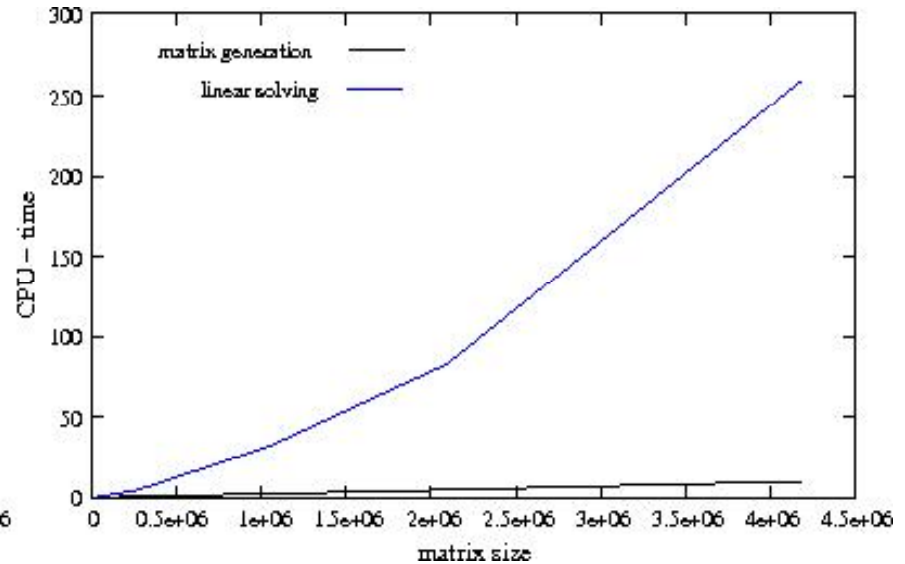
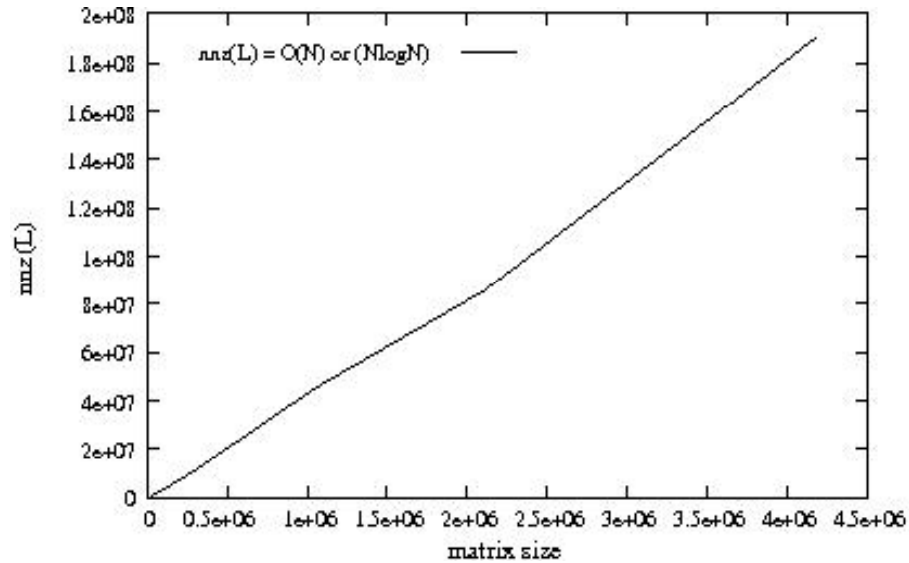
Analyse mathématique

Choix du solveur

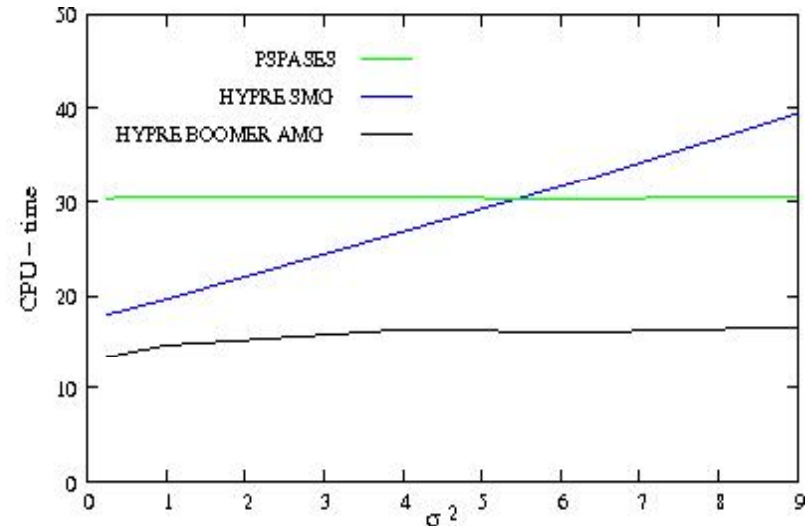
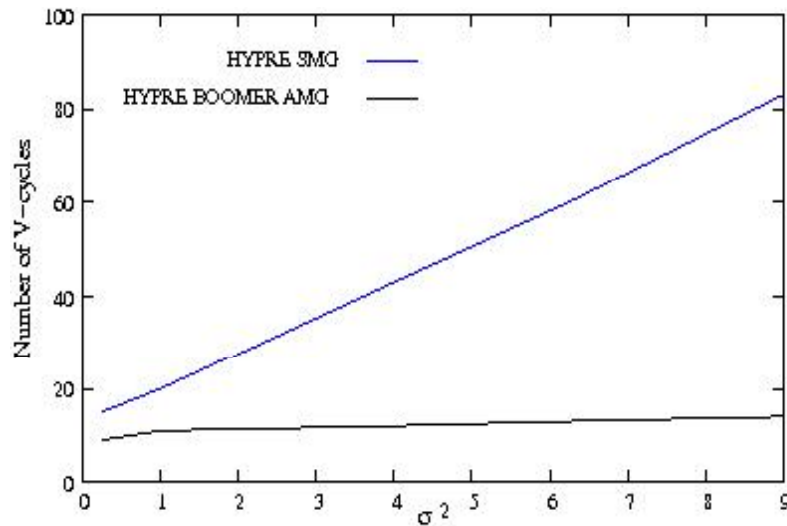
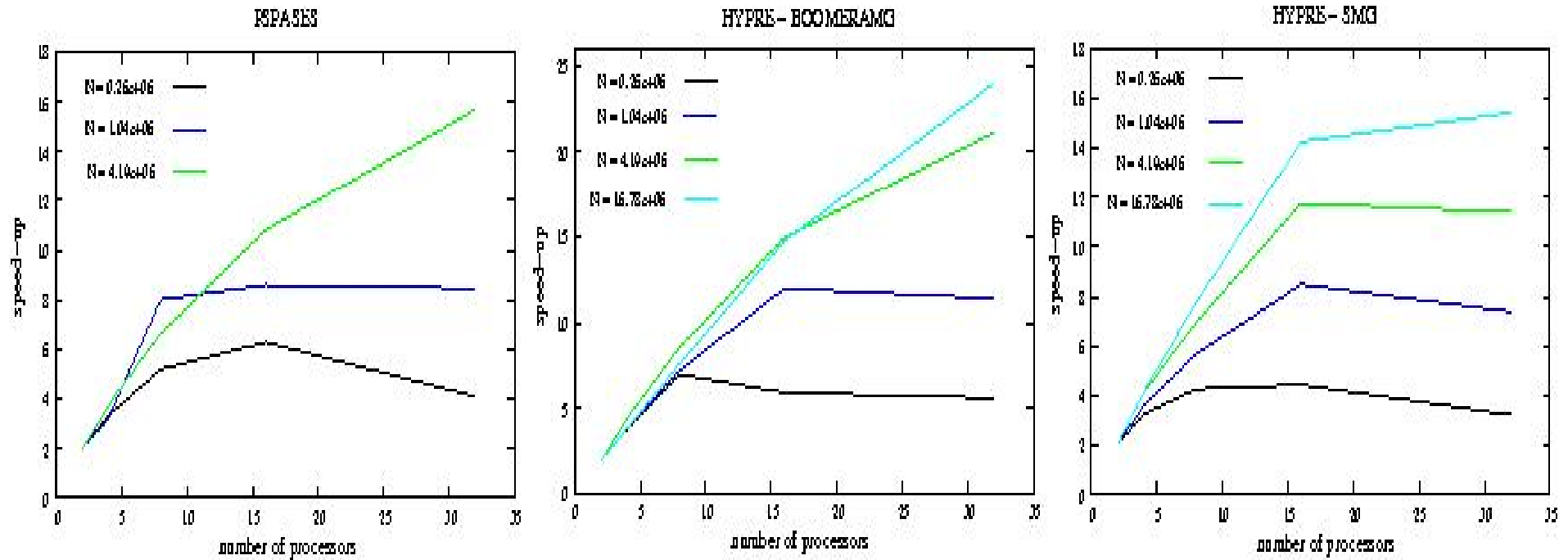
PSPASES (méthode directe)

HYPRE BOOMER AMG (méthode multigrille)

HYPRE SMG (méthode multigrille)

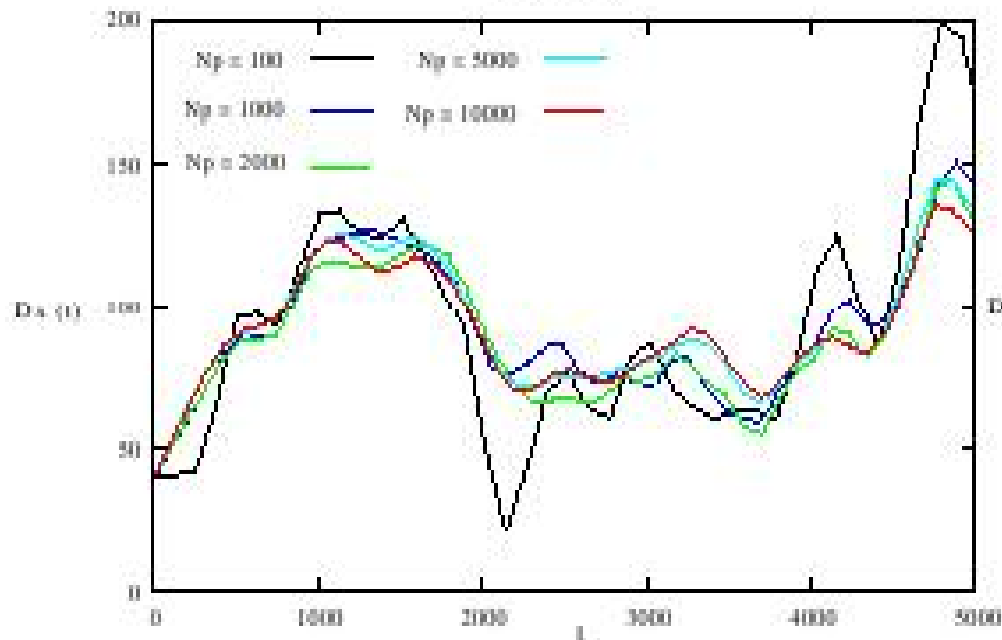


Analyse mathématique

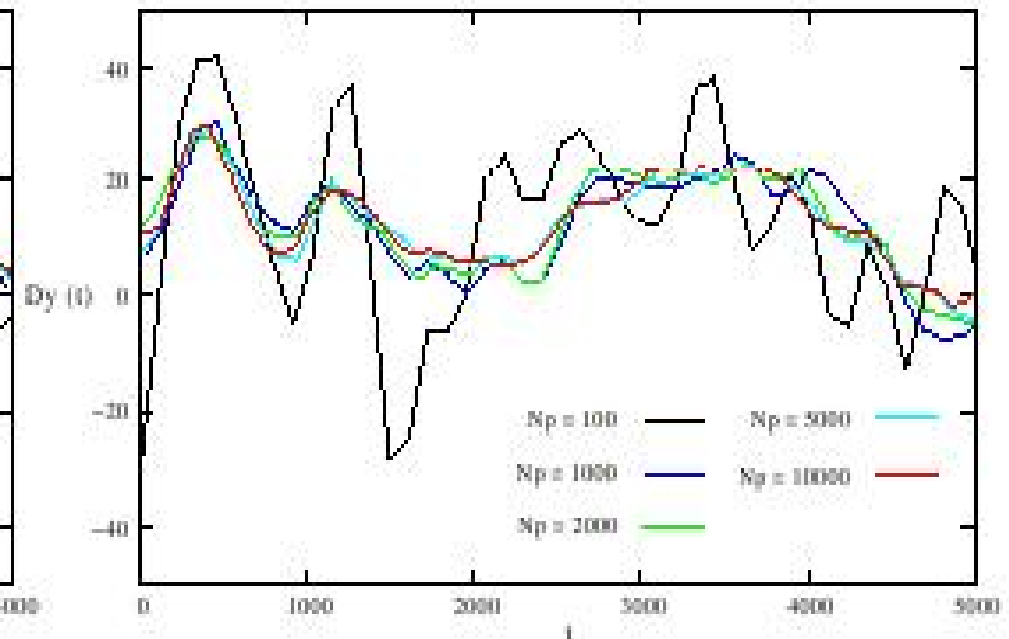
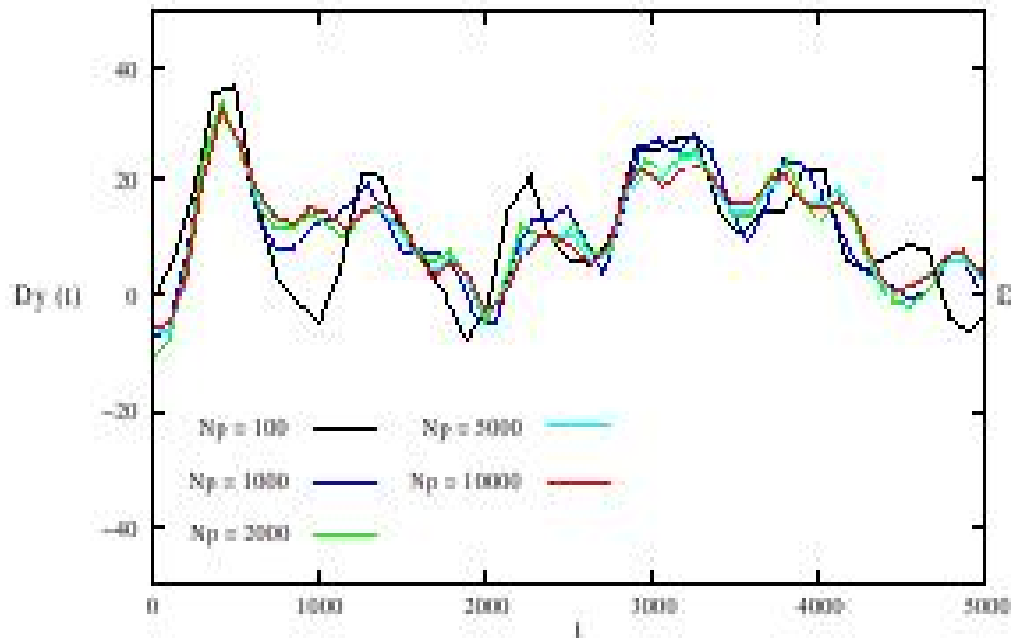
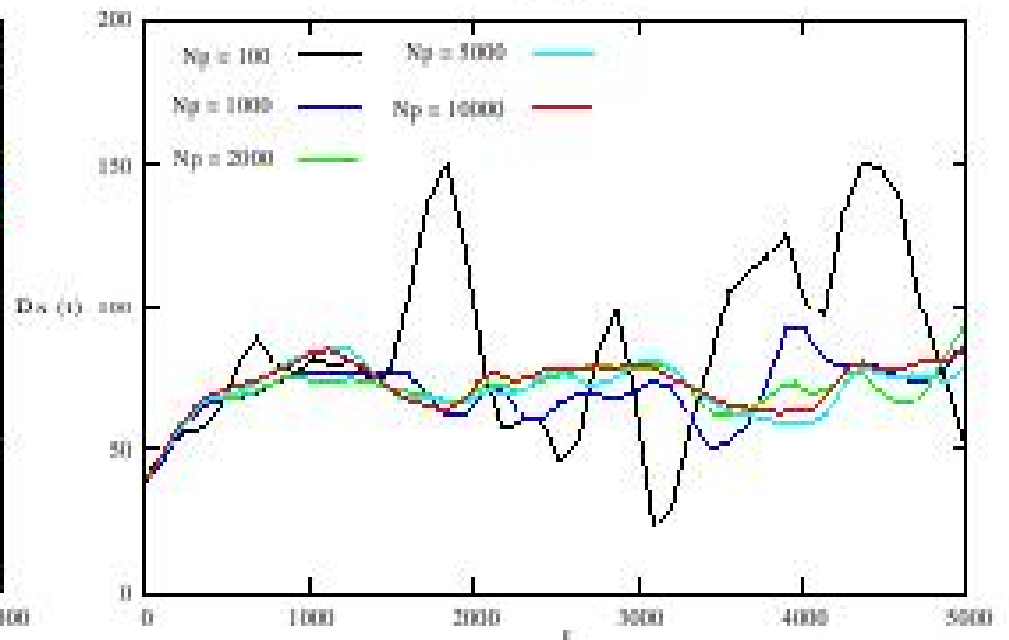


Pour le 2D, le lauréat est HYPRE BOOMER AMG. On fait quoi pour le 3D ?

Advection

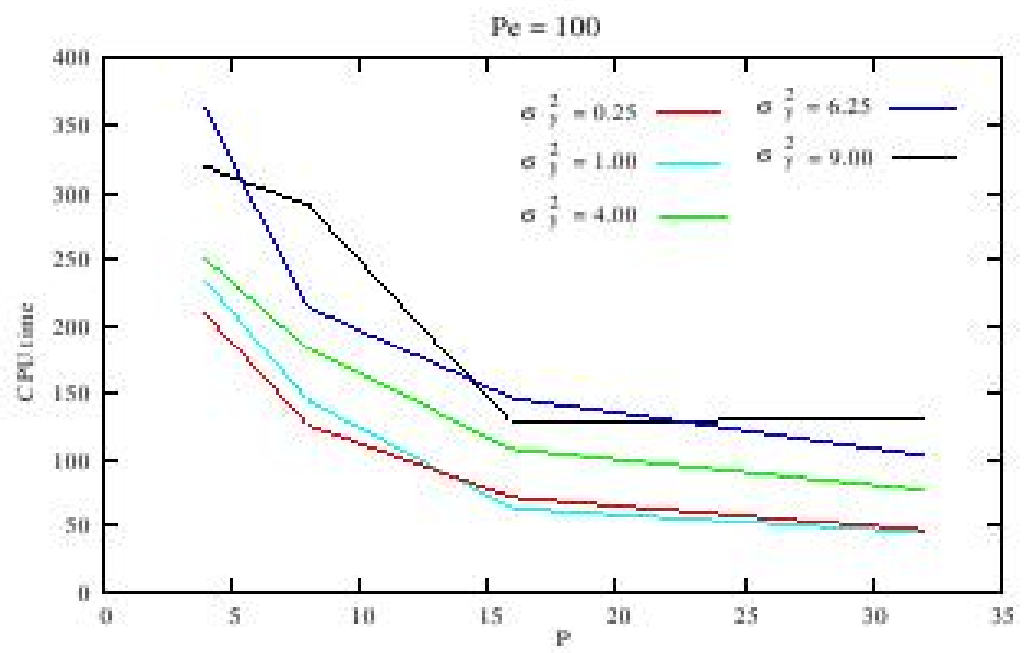
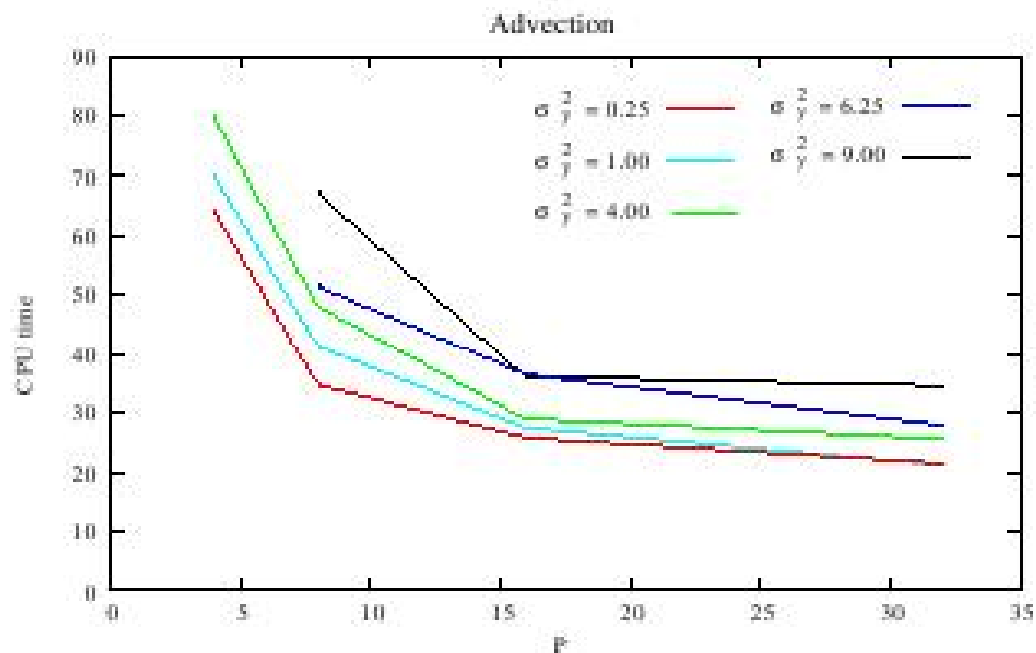
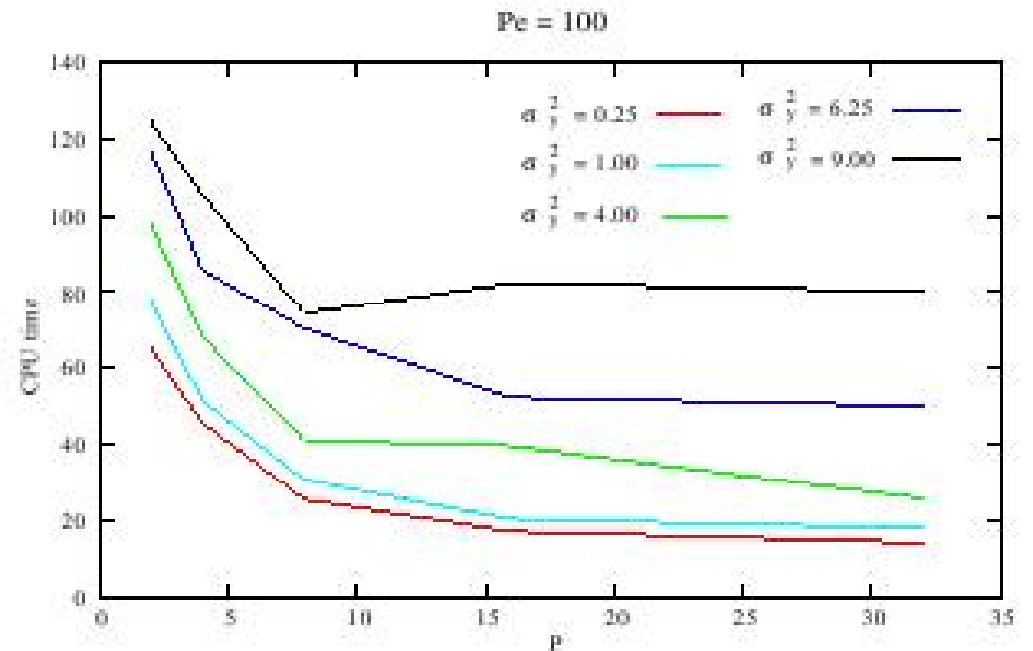
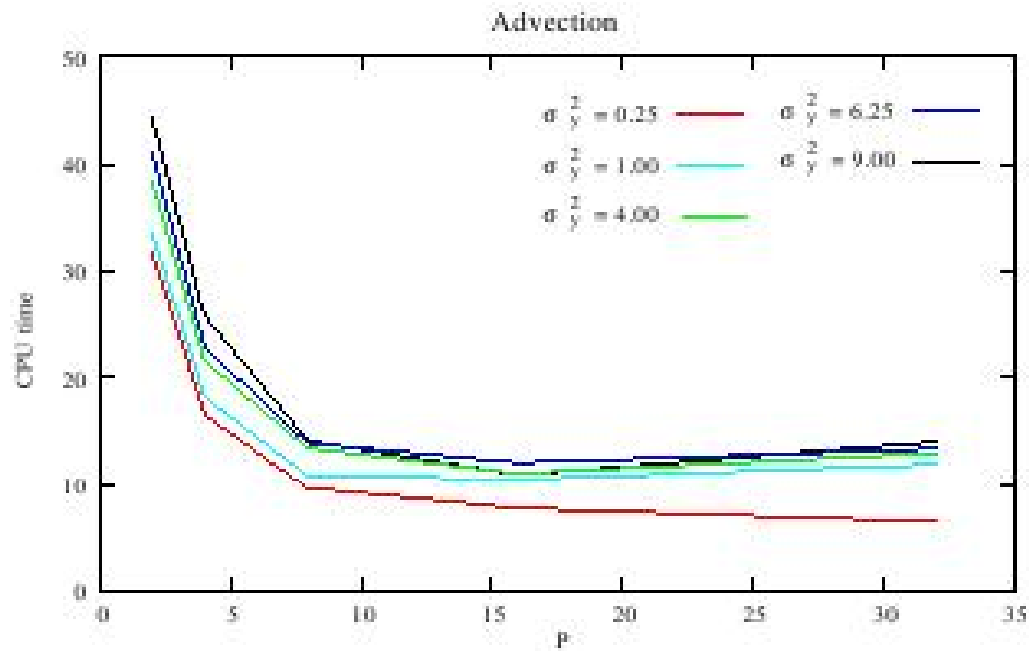


Pc = 100



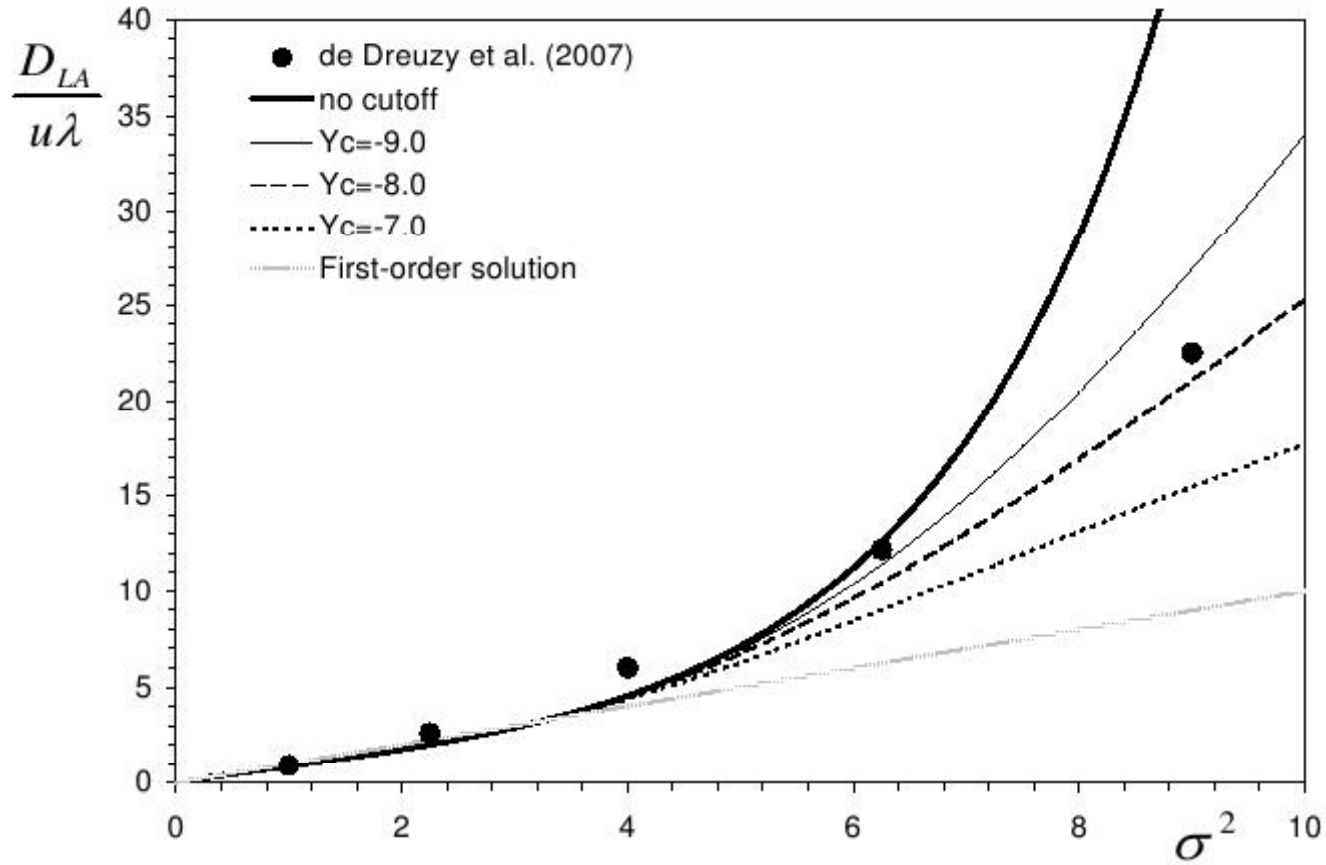
Analyse mathématique

Performances du tracker en 2D



Analyse physique

Pour le 2D, match France (de Dreuzy) – Italie (Fiori) / Euro 2008



Y_c	Variance
Aucun	223,29
-9,00	197,04
-8,00	199,91
-7,00	198,01
-6,00	Rien
-5,00	123,50

Analyse physique

Y a du boulot pour le 3D !!!

