



Simulations de problèmes d'écoulements diphasiques en milieu poreux dans un environnement parallèle

Eli Laucoin, Florian Caro

CEA Saclay

Journées MOMAS diphase 4–5 septembre 2008

Plan



1. Cadre de travail
2. Modèle
 - Modèle mathématique
 - Schéma numérique
3. Validations
 - Cas test non-linéaire stationnaire homogène
 - Cas test non-linéaire stationnaire hétérogène
 - Cas test non-linéaire instationnaire homogène
4. Cas d'application
 - Contexte physique
 - Performances
5. Conclusions et perspectives

Cadre de travail



Problème de stockage des déchets radioactifs de moyenne activité à vie longue (déchets B) :

- Loi 2006 sur le stockage des déchets radioactifs : prise en compte du dégagement d'hydrogène par corrosion de l'acier contenu dans les colis car possibilité de fracturation de la roche environnante
- Besoin de simulations numériques permettant de mieux prévoir l'évolution à long terme de ces stockages
- Benchmark Couplex Gaz proposé par l'ANDRA : mise en évidence des difficultés liées à ce type de problèmes (échelles d'espace et de temps considérées, temps de calcul, dégénérescence du modèle ...)
- Retour d'expérience sur Couplex Gaz
 - Temps de calcul séquentiel \implies besoin de simulations dans un contexte de calculs haute performance afin de traiter des géométries réalistes avec plusieurs millions de mailles
 - Développement de modules sur la base d'un noyau numérique parallèle actuellement utilisé au CEA pour les problèmes d'hydraulique monophasique et diphasique (Trio_U, OVAP, MP-Cube)

Modèle mathématique et schéma numérique



— Modèle continu

$$M(u, v) \begin{bmatrix} \partial_t u \\ \partial_t v \end{bmatrix} - \operatorname{div} \left(A(u, v) \begin{bmatrix} \nabla u \\ \nabla v \end{bmatrix} \right) = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_u \\ \mathcal{F}_v \end{pmatrix}.$$

u, v inconnues, $M \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ matrice de masse pleine, $A \in \mathbb{R}^{4 \times 4}$ matrice de *diffusion* pleine et $\mathcal{F}_u, \mathcal{F}_v$ termes sources sur les inconnues u et v .

- Schéma numérique : volumes finis diamants pour la discrétisation en espace, schéma d'Euler implicite pour la discrétisation temporelle et méthode de point fixe pour la résolution du système non linéaire (inconnues u_{n+1}^{k+1} et v_{n+1}^{k+1})

$$\frac{1}{\Delta t} \mathcal{M}(u_n^k, v_n^k) \begin{bmatrix} u_{n+1}^{k+1} - u_n^k \\ v_{n+1}^{k+1} - v_n^k \end{bmatrix} - \mathcal{A}(u_n^k, v_n^k) \begin{bmatrix} u_{n+1}^{k+1} \\ v_{n+1}^{k+1} \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_u \\ \mathcal{F}_v \end{pmatrix}.$$



Validations

Cas test linéaire stationnaire homogène



$$-\text{div} \left[\begin{pmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1 \end{pmatrix} \nabla \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \right] = f \text{ dans } \Omega = [-1, 1]^2,$$

- Conditions aux limites : Dirichlet et Neumann
- Solutions exactes :

$$\begin{cases} u = 2 + \cos(\pi x) \\ v = 2 + \sin(\pi x) \end{cases}$$

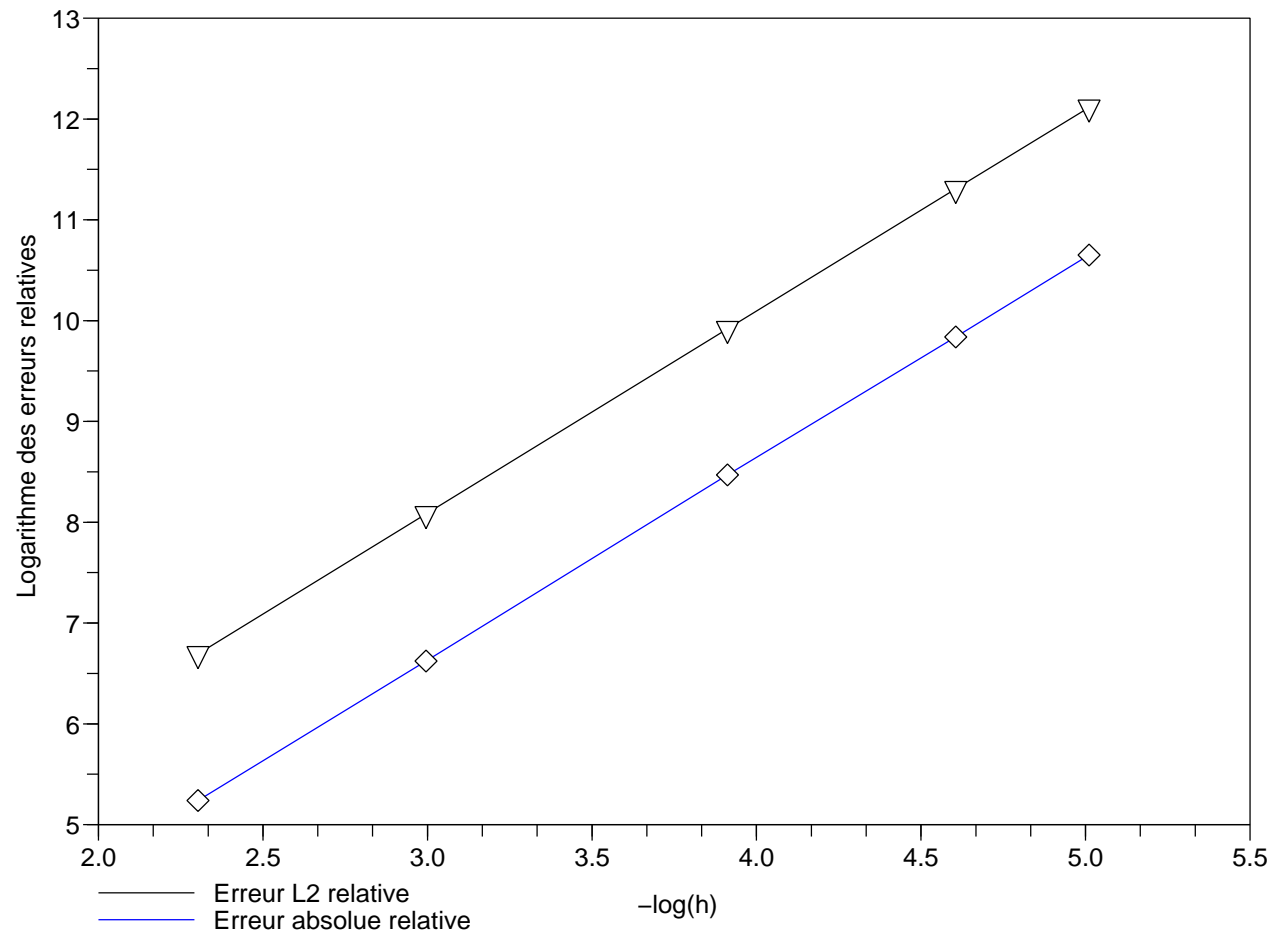
- Solveur BICGSTAB et préconditionneur ILU 4 (seuil relatif à 10^{-13})
- Erreurs L^2 et L^∞ relatives

Maillage	Nombre de mailles	Erreur L^2	L^∞
10×10	800	1.24×10^{-3}	5.31×10^{-3}
20×20	3 200	3.09×10^{-4}	1.33×10^{-3}
50×50	20 000	4.93×10^{-5}	2.1×10^{-4}
100×100	80 000	1.23×10^{-5}	5.34×10^{-5}
150×150	180 000	5.48×10^{-6}	2.37×10^{-5}

Cas test linéaire stationnaire homogène



Evolution des erreurs relatives en fonction de la taille du maillage



Cas test non-linéaire stationnaire homogène



Modèle

$$-\text{div} \left[\begin{pmatrix} -\lambda_l P_c' \mathbf{k} & \lambda_l \mathbf{k} \\ \mathbf{0} & \lambda_g P_g \mathbf{k} \end{pmatrix} \nabla \begin{pmatrix} S_l \\ P_g \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_l \\ \mathcal{F}_g \end{pmatrix},$$

avec

$$\begin{cases} \lambda_l = \frac{\sqrt{S_l} \left[1 - (1 - S_l^{1/m})^m \right]^2}{\mu_l}, \\ \lambda_g = \frac{\sqrt{1 - S_l} (1 - S_l^{1/m})^{2m}}{\mu_g}, \\ P_c = P_r (S_l^{-1/m} - 1)^{1/n}. \end{cases}$$

et \mathbf{k} tenseur de perméabilité absolue constant en espace.

Solutions exactes et paramètres



- Domaine $[-1, 1]^2$
- Solutions exactes

$$\begin{cases} S_l^e = S_0 - \frac{(1-x^2)(1-y^2)}{\alpha} \\ P_g^e = P_0(1 + 0.2 \sin(\pi x)x \sin(\pi y)). \end{cases}$$

- Paramètres physiques

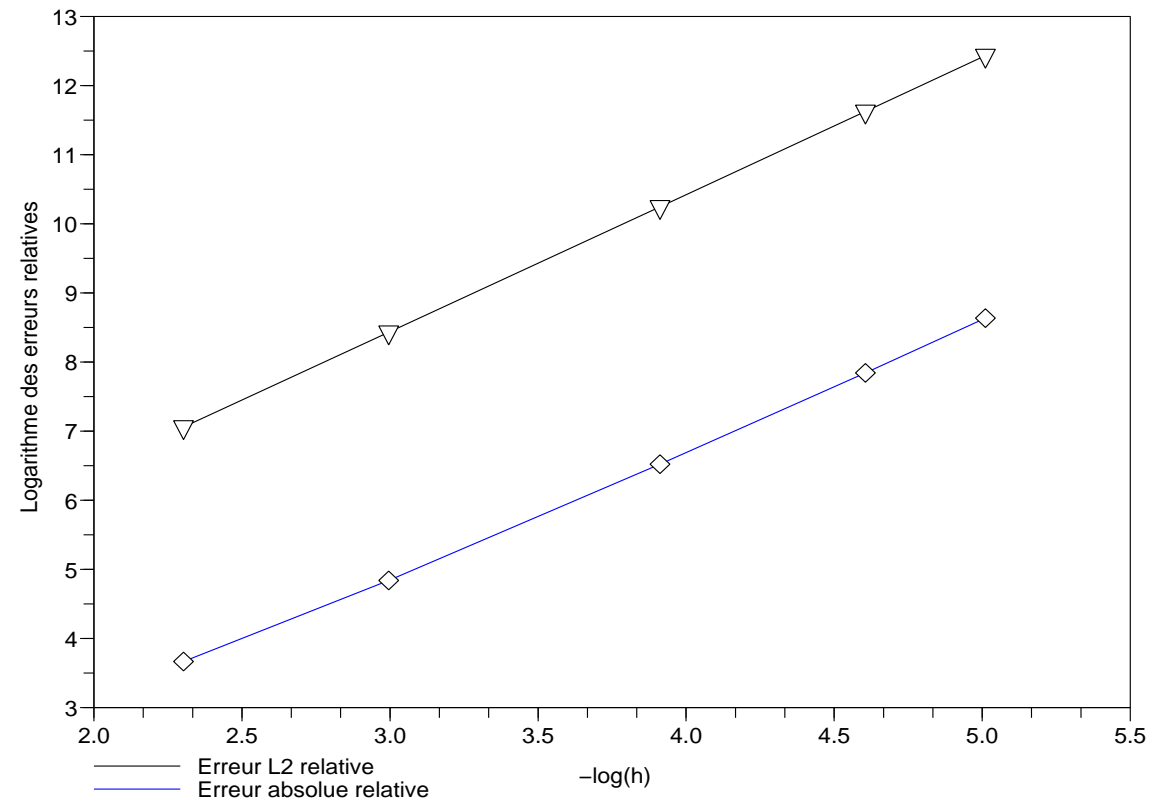
Viscosité du liquide (Pa · s)	804×10^{-6}
Viscosité du gaz (Pa · s)	185×10^{-7}
P_r (Pa)	2×10^6
Paramètre de Van Genuchten	1.5
Perméabilité absolue (m ²)	10^{-18}
α	3
S_0	0.2
P_0 (Pa)	5.5×10^6

Résultats numériques

Paramètres de calculs : solveur BICGSTAB et préconditionneur ILU 2
(seuil relatif 10^{-15})



Evolution des erreurs relatives en fonction de la taille du maillage



Cas test non-linéaire instationnaire homogène



— Modèle

$$\Phi \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -P_g & (1 - S_l) \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \partial_t S_l \\ \partial_t P_g \end{bmatrix} - \operatorname{div} \left[\begin{pmatrix} -\lambda_l P_c' \mathbf{k} & \lambda_l \mathbf{k} \\ \mathbf{0} & \lambda_g P_g \mathbf{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_l \\ P_g \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_l \\ \mathcal{F}_g \end{pmatrix}$$

avec λ_l , λ_g et P_c définies comme auparavant

- Domaine $[-1, 1]^2$
- Solutions exactes

$$\begin{cases} S_l = \frac{1 + \sin(\pi x) \exp(-t)/2}{2}, \\ P_g = 10^5 \times ((1 - x^2) \exp(-t) + 2) \end{cases}$$

Paramètres



— Paramètres physiques

Viscosité du liquide (Pa.s)	804×10^{-6}
Viscosité du gaz (Pa.s)	185×10^{-7}
P_r (Pa)	2×10^6
Paramètre de Van Genuchten	1.5
Perméabilité absolue ($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)	10^{-18}
Porosité (-)	0.3

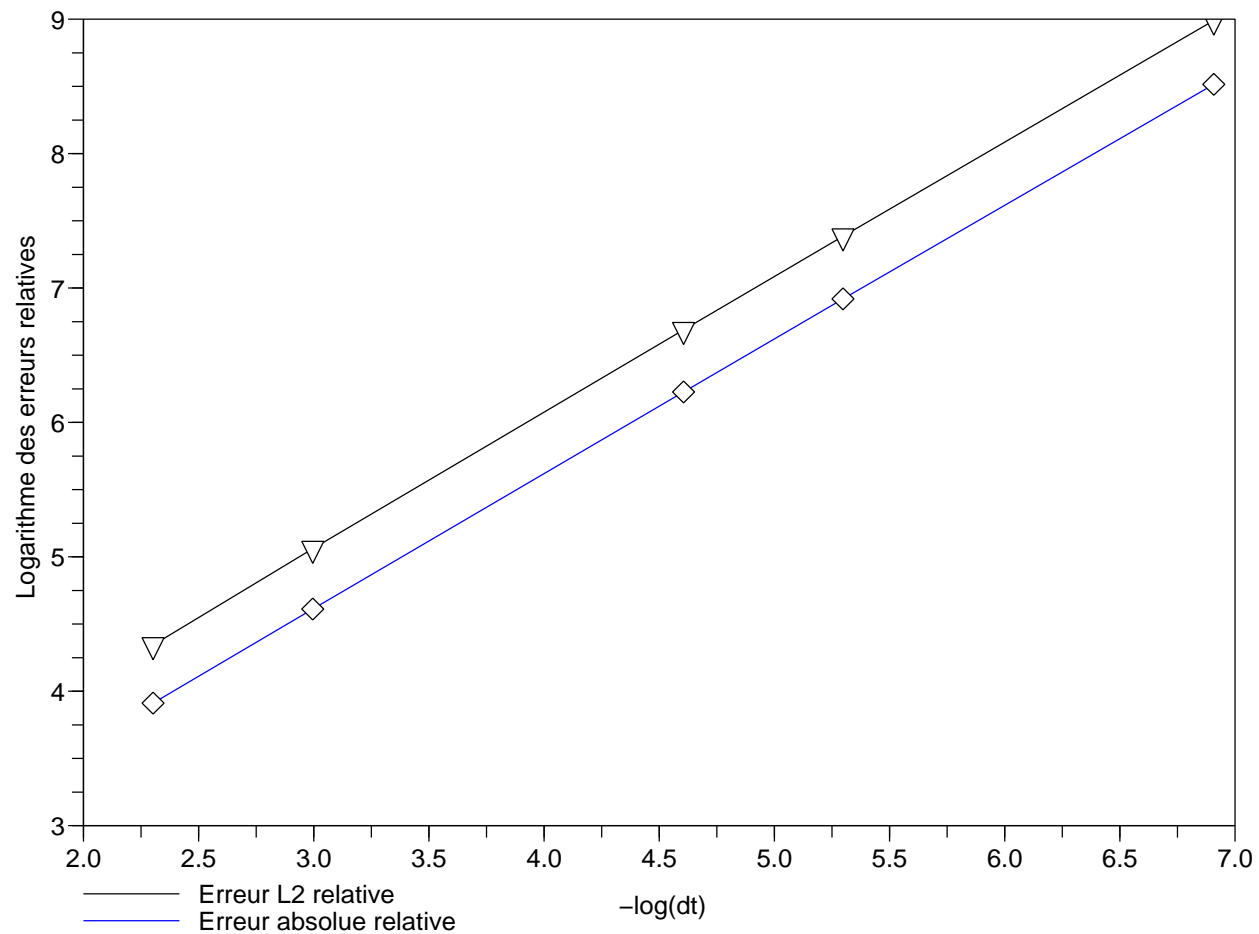
— Paramètres numériques

Solveur	BICGSTAB
Préconditionneur	ILU 2
Maillage	12 800 triangles
Temps final (an)	1

Résultats numériques



Evolution des erreurs relatives en fonction du pas de temps





Cas d'application

Contexte physique



Cas d'application Couplex gaz 1b *simplifié*

— Modèle physique

$$M(S_l, P_g) \begin{bmatrix} \partial_t S_l \\ \partial_t P_g \end{bmatrix} - \text{div} \left[A(S_l, P_g) \begin{pmatrix} S_l \\ P_g \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_l \\ \mathcal{F}_g \end{pmatrix}$$

avec M et A matrices dépendant non linéairement des inconnues saturation liquide S_l et pression de gaz P_g

— Constantes physiques : données couplex gaz 1b

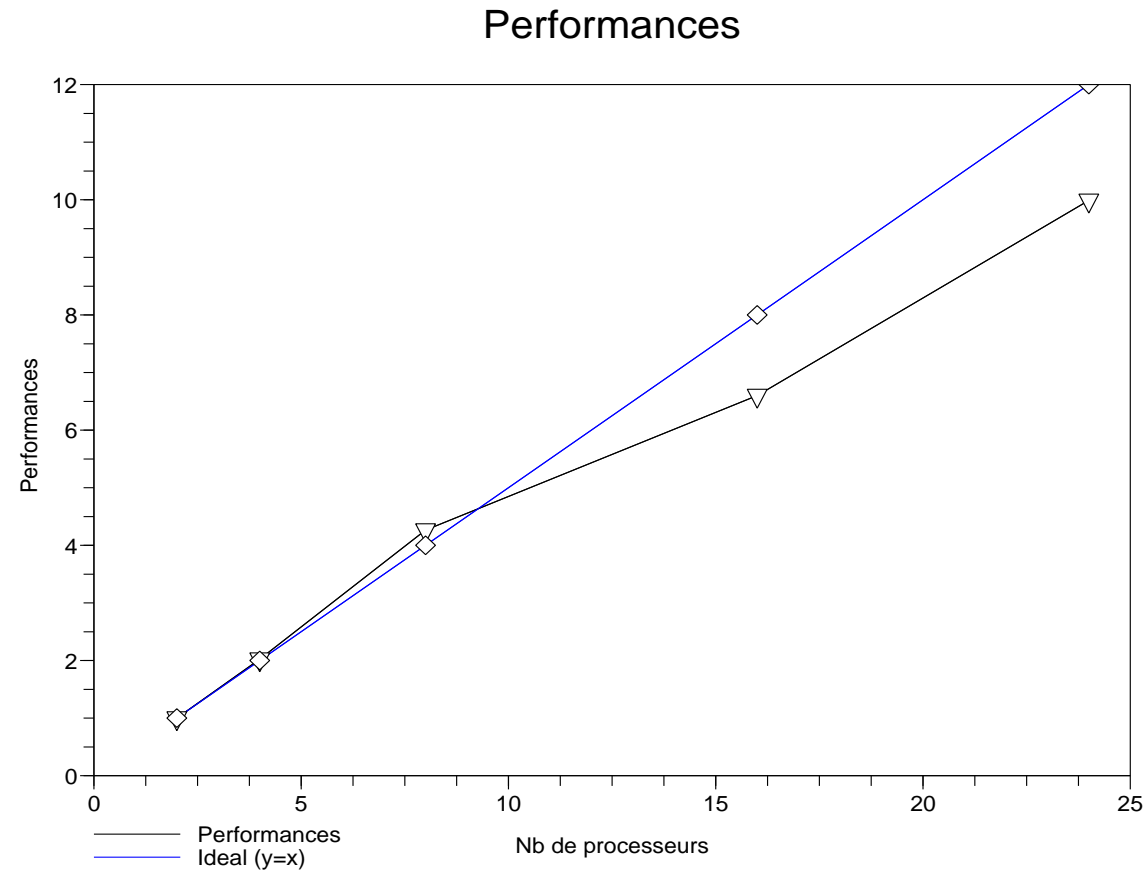
— Paramètres des milieux : pas de jeux résiduels, hétérogénéités “moindres” dans les autres milieux géologiques

Paramètres de calcul



- Solveur linéaire : BICGSTAB
- Préconditionneur : SPAI 1 0.4
- Maillage : 466 522 triangles
- Nombre de pas de temps : 115 (400 ans)

Performances



Remarque : 30 heures de calcul sur 2 processeurs et 3 heures sur 24 processeurs

Conclusions et perspectives



- Développement d'un module permettant de traiter les problèmes d'écoulements diphasique en milieu poreux dans un environnement parallèle
- *Flexibilité* pour passer d'un jeu de variable un autre (4 jeux de variables testés)
- Convergence en temps et en espace sur des cas tests analytiques
- Bonne scalabilité

- Test avec d'autres jeux de variables
- Problèmes pour traiter les fortes hétérogénéités (choix d'une autre discrétisation spatiale ?)