



Modèles couplés en milieu poreux : transport réactif et fractures

Laila AMIR

Directeurs de thèse : Michel KERN, Jean E. ROBERTS
Correspondant ITASCA : Daniel BILLAUX

Soutenance de thèse
18 Décembre 2008

Partie I : transport réactif

1 Chimie et transport

- Lois chimiques
- Convection-diffusion

2 Modèle couplé

- Formulation mathématique
- Algorithme pour l'approche globale

3 Résultats numériques

Partie I : transport réactif

- 1 Chimie et transport
 - Lois chimiques
 - Convection-diffusion
- 2 **Modèle couplé**
 - Formulation mathématique
 - Algorithme pour l'approche globale
- 3 Résultats numériques

Partie I : transport réactif

- 1 Chimie et transport
 - Lois chimiques
 - Convection-diffusion
- 2 Modèle couplé
 - Formulation mathématique
 - Algorithme pour l'approche globale
- 3 Résultats numériques

Partie II : intersection des fractures

- 4 Problème modèle avec fractures
- 5 Modélisation numérique
 - Décomposition de domaine
 - Formulation mixte
- 6 Résultats numériques
- 7 Un préconditionneur

Partie II : intersection des fractures

- 4 Problème modèle avec fractures
- 5 Modélisation numérique
 - Décomposition de domaine
 - Formulation mixte
- 6 Résultats numériques
- 7 Un préconditionneur

Partie II : intersection des fractures

- 4 Problème modèle avec fractures
- 5 Modélisation numérique
 - Décomposition de domaine
 - Formulation mixte
- 6 Résultats numériques
- 7 Un préconditionneur

Partie II : intersection des fractures

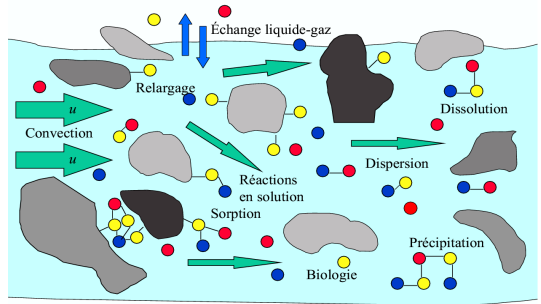
- 4 Problème modèle avec fractures
- 5 Modélisation numérique
 - Décomposition de domaine
 - Formulation mixte
- 6 Résultats numériques
- 7 Un préconditionneur

Part I

Partie I: transport réactif dans un milieu poreux

Phénomènes hydrogéologiques

- **Transport**
 - advection
 - diffusion
- **Chimie**
 - réaction
 - sorption



Couplage des phénomènes

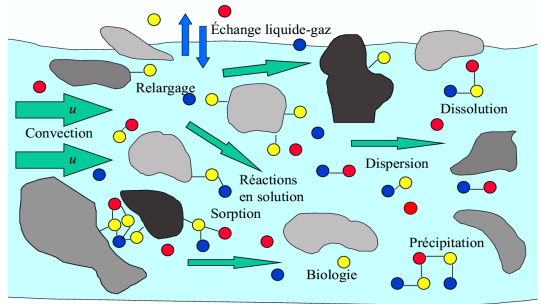
Entre **transport** et **chimie**

Choisir une méthode de couplage

Méthode globale ou séquentielle?

Phénomènes hydrogéologiques

- **Transport**
 - advection
 - diffusion
- **Chimie**
 - réaction
 - sorption



Couplage des phénomènes

Entre **transport** et **chimie**

Choisir une méthode de couplage

Méthode globale ou séquentielle?

Chimie

Equilibre chimique

Réactions chimiques:

$$x_i \Leftrightarrow \sum_{j=1}^{N_c} S_{ij} c_j, \quad i = 1, \dots, N_x$$

$$y_i \Leftrightarrow \sum_{j=1}^{N_c} A_{ij} c_j + \sum_{j=1}^{N_s} B_{ij} s_j, \quad i = 1, \dots, N_y,$$

c_j composants aqueux (mobiles) , s_j composants sorbés (immobiles),
 x_i espèces secondaires aqueuses , espèces secondaires sorbées y_i .

Modèle mathématique

Système d'équations non-linéaires

Loi d'action de masse

$$\log x = S \log c + \log K_x,$$

$$\log y = A \log c + B \log s + \log K_y.$$

Conservation de la masse

$$c + S^t x + A^T y = T, \quad T \text{ connu par transport}$$

$$s + B^T y = W, \quad W \text{ imposé}$$

Total dissout : $C = c + S^T x$, Total fixé : $F = A^T y$.

$$C = \Phi(T), \quad F = \Psi(T)$$

Le rôle du modèle chimique est de **séparer** les espèces en partie mobile et partie immobile

Modèle mathématique

Système d'équations non-linéaires

Loi d'action de masse

$$\log x = S \log c + \log K_x,$$

$$\log y = A \log c + B \log s + \log K_y.$$

Conservation de la masse

$$c + S^t x + A^T y = T, \quad T \text{ connu par transport}$$

$$s + B^T y = W, \quad W \text{ imposé}$$

Total dissout : $C = c + S^T x$, Total fixé : $F = A^T y$.

$$C = \Phi(T), \quad F = \Psi(T)$$

Le rôle du modèle chimique est de **séparer** les espèces
en partie mobile et partie immobile

Résolution du système chimique

Logarithme des inconnues

- On utilise **logarithme** des inconnues c , s ($lc = \log c$, $ls = \log s$)
- Le système chimique devient :

$$H \begin{pmatrix} lc \\ ls \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{lc} + S^T e^{(\log K_x + S lc)} + A^T e^{(\log K_y + A lc + B ls)} - T \\ e^{ls} + B^T e^{(\log K_y + A lc + B ls)} - W \end{pmatrix} = 0,$$



Avantage : concentrations positives

ψ connu, on utilise le développement de Taylor, on obtient

Jacobian

$$\psi'(T) = A^T y (A \ B) (H')^{-1} \begin{pmatrix} I \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Résolution du système chimique

Logarithme des inconnues

- On utilise **logarithme** des inconnues c , s ($lc = \log c$, $ls = \log s$)
- Le système chimique devient :

$$H \begin{pmatrix} lc \\ ls \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{lc} + S^T e^{(\log K_x + S lc)} + A^T e^{(\log K_y + A lc + B ls)} - T \\ e^{ls} + B^T e^{(\log K_y + A lc + B ls)} - W \end{pmatrix} = 0,$$



Avantage : concentrations positives

ψ connu, on utilise le développement de Taylor, on obtient

Jacobian

$$\psi'(T) = A^T y (A \ B) (H')^{-1} \begin{pmatrix} I \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Transport

Transport dans un milieu poreux

Equation de diffusion-advection

$$\omega \frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div}(\mathbf{D} \operatorname{grad} c) + \operatorname{div}(\mathbf{u}c) = f$$

Tenseur de dispersion

$$\mathbf{D} = d_e \mathbf{I} + |\mathbf{u}| [\alpha_l \mathbf{E}(\mathbf{u}) + \alpha_t (I - \mathbf{E}(\mathbf{u}))], \quad E_{ij}(\mathbf{u}) = \frac{u_i u_j}{|\mathbf{u}|}$$

Conditions aux bords

$$\mathbf{D} \operatorname{grad} c \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_N, \quad c = c_d \text{ sur } \Gamma_D.$$

Transport hétérogène

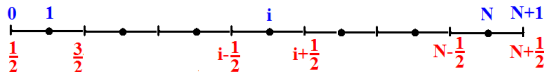
Equation de diffusion-advection

$$\omega \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\underbrace{-D \frac{\partial c}{\partial x}}_{\varphi_d} + \underbrace{uc}_{\varphi_a} \right] = f \quad \text{for } 0 < x < L$$

Discrétisation en espace : volumes finis

$$\omega_i h_i \frac{dc_i}{dt} + (\varphi_{d,i+\frac{1}{2}} + \varphi_{a,i+\frac{1}{2}} - \varphi_{d,i-\frac{1}{2}} - \varphi_{a,i-\frac{1}{2}}) dt = 0$$

où $\varphi_{d,i+\frac{1}{2}} = -D_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{c_{i+1} - c_i}{h_{i+\frac{1}{2}}} \right)$ et $\varphi_{a,i+\frac{1}{2}} = uc_i$



Advection et diffusion implicites

$$\omega_i h_i (c_i^{n+1} - c_i^n) + (\varphi_{d,i+\frac{1}{2}}^{n+1} + \varphi_{a,i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \varphi_{d,i-\frac{1}{2}}^{n+1} - \varphi_{a,i-\frac{1}{2}}^{n+1}) \Delta t = 0$$

Advection explicite et diffusion implicite

$$\omega_i h_i (c_i^{n+1} - c_i^n) + (\varphi_{d,i+\frac{1}{2}}^{n+1} + \varphi_{a,i+\frac{1}{2}}^n - \varphi_{d,i-\frac{1}{2}}^{n+1} - \varphi_{a,i-\frac{1}{2}}^n) \Delta t = 0$$

Splitting: diffusion implicite et advection explicite

$$\Delta t = M \Delta t_a,$$

Etape d'advection

$$c_i^{n,m+1} = c_i^{n,m} - \frac{\Delta t_a \mathbf{u}}{h_i} (c_i^{n,m} - c_{i-1}^{n,m}), \quad m = 0, \dots, M-1$$

Etape de diffusion

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{D_{i-\frac{1}{2}}}{h_{i-\frac{1}{2}}} \Delta t\right) c_{i-1}^{n+1} + \left(\omega_i h_i + \frac{D_{i+\frac{1}{2}}}{h_{i+\frac{1}{2}}} \Delta t + \frac{D_{i-\frac{1}{2}}}{h_{i-\frac{1}{2}}} \Delta t\right) c_i^{n+1} - \frac{D_{i+\frac{1}{2}}}{h_{i+\frac{1}{2}}} \Delta t c_{i+1}^{n+1} \\ & \qquad \qquad \qquad = \omega_i h_i c_i^{n,M} \end{aligned}$$

Advection et diffusion implicites

$$\omega_i h_i (c_i^{n+1} - c_i^n) + (\varphi_{d,i+\frac{1}{2}}^{n+1} + \varphi_{a,i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \varphi_{d,i-\frac{1}{2}}^{n+1} - \varphi_{a,i-\frac{1}{2}}^{n+1}) \Delta t = 0$$

Advection explicite et diffusion implicite

$$\omega_i h_i (c_i^{n+1} - c_i^n) + (\varphi_{d,i+\frac{1}{2}}^{n+1} + \varphi_{a,i+\frac{1}{2}}^n - \varphi_{d,i-\frac{1}{2}}^{n+1} - \varphi_{a,i-\frac{1}{2}}^n) \Delta t = 0$$

Splitting: diffusion implicite et advection explicite

$$\Delta t = M \Delta t_a,$$

Etape d'advection

$$c_i^{n,m+1} = c_i^{n,m} - \frac{\Delta t_a \mathbf{u}}{h_i} (c_i^{n,m} - c_{i-1}^{n,m}), \quad m = 0, \dots, M-1$$

Etape de diffusion

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{D_{i-\frac{1}{2}}}{h_{i-\frac{1}{2}}} \Delta t\right) c_{i-1}^{n+1} + \left(\omega_i h_i + \frac{D_{i+\frac{1}{2}}}{h_{i+\frac{1}{2}}} \Delta t + \frac{D_{i-\frac{1}{2}}}{h_{i-\frac{1}{2}}} \Delta t\right) c_i^{n+1} - \frac{D_{i+\frac{1}{2}}}{h_{i+\frac{1}{2}}} \Delta t c_{i+1}^{n+1} \\ & \qquad \qquad \qquad = \omega_i h_i c_i^{n,M} \end{aligned}$$

Advection et diffusion implicites

$$\omega_i h_i (c_i^{n+1} - c_i^n) + (\varphi_{d,i+\frac{1}{2}}^{n+1} + \varphi_{a,i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \varphi_{d,i-\frac{1}{2}}^{n+1} - \varphi_{a,i-\frac{1}{2}}^{n+1}) \Delta t = 0$$

Advection explicite et diffusion implicite

$$\omega_i h_i (c_i^{n+1} - c_i^n) + (\varphi_{d,i+\frac{1}{2}}^{n+1} + \varphi_{a,i+\frac{1}{2}}^n - \varphi_{d,i-\frac{1}{2}}^{n+1} - \varphi_{a,i-\frac{1}{2}}^n) \Delta t = 0$$

Splitting: diffusion implicite et advection explicite

$$\Delta t = M \Delta t_a,$$

Etape d'advection

$$c_i^{n,m+1} = c_i^{n,m} - \frac{\Delta t_a \mathbf{u}}{h_i} (c_i^{n,m} - c_{i-1}^{n,m}), \quad m = 0, \dots, M-1$$

Etape de diffusion

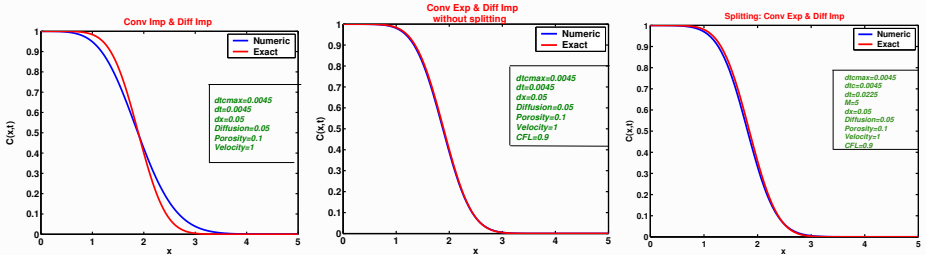
$$\begin{aligned} \left(-\frac{D_{i-\frac{1}{2}}}{h_{i-\frac{1}{2}}} \Delta t\right) c_{i-1}^{n+1} + \left(\omega_i h_i + \frac{D_{i+\frac{1}{2}}}{h_{i+\frac{1}{2}}} \Delta t + \frac{D_{i-\frac{1}{2}}}{h_{i-\frac{1}{2}}} \Delta t\right) c_i^{n+1} - \frac{D_{i+\frac{1}{2}}}{h_{i+\frac{1}{2}}} \Delta t c_{i+1}^{n+1} \\ = \omega_i h_i c_i^{n,M} \end{aligned}$$

Résultats : cas homogène

La solution analytique

$$c(x, t) = \frac{C_d}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{\omega x - \mathbf{u}t}{2\sqrt{\omega \mathbf{D}t}} \right) + \exp \left(\frac{\mathbf{u}x}{\mathbf{D}} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{\omega x + \mathbf{u}t}{2\sqrt{\omega \mathbf{D}t}} \right).$$

Comparaison de la solution numérique et exacte

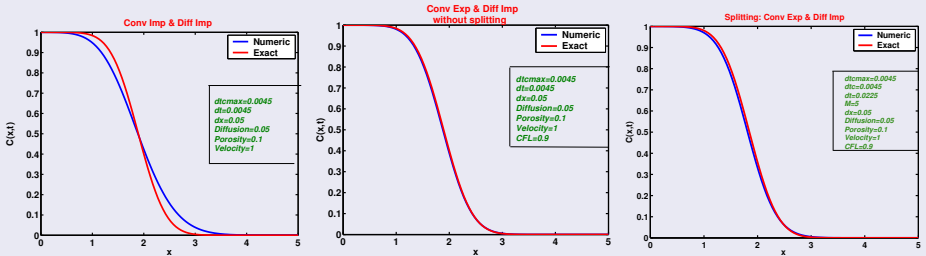


Résultats : cas homogène

La solution analytique

$$c(x, t) = \frac{C_d}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{\omega x - \mathbf{u}t}{2\sqrt{\omega \mathbf{D}t}} \right) + \exp \left(\frac{\mathbf{u}x}{\mathbf{D}} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{\omega x + \mathbf{u}t}{2\sqrt{\omega \mathbf{D}t}} \right).$$

Comparaison de la solution numérique et exacte



Résultats : cas hétérogène

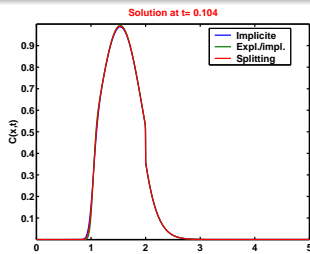
Cas test

	Milieu A	Milieu B
Porosité	1	2
Diffusion	1e-2	1
Longueur	2	3
Vitesse	10	10
Maillage	1600	1200

Conditions :

aux bords $c_d = c_g = 0$
initiale

$$c_0 = \exp \left[-3(1/2 - x)^2 \right]$$



Erreur d'approximation

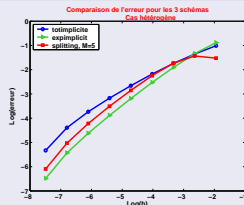
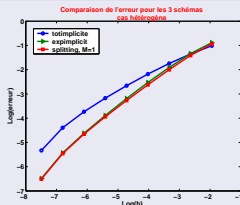
- Maillage raffiné

$$h_A = 1/2^{10} \Rightarrow$$

Solution de référence

- Maillages grossiers

$$h_A = \{1/2^q\}_{q=1, \dots, 9}$$



Résolution par la méthode de décomposition d'opérateurs

Volumes finis pour l'étape
d'advection

$$\omega \frac{c^{n,*} - c^n}{\Delta t} + \text{div}(\mathbf{u}c^n) = 0$$

Éléments finis mixtes hybrides pour
l'étape de diffusion

$$\omega \frac{c^{n+1} - c^{n,*}}{\Delta t} - \text{div}(\mathbf{D}\nabla c^{n+1}) = f$$

Avantages

- Conservation de la masse
- Bonne représentation des fronts
- Dispersion numérique limitée

Avantages

- La concentration et son gradient sont calculés simultanément
- Continuité de flux
- Tenseur dispersion plein

Résolution par la méthode de décomposition d'opérateurs

Volumes finis pour l'étape
d'advection

$$\omega \frac{c^{n,*} - c^n}{\Delta t} + \text{div}(\mathbf{u}c^n) = 0$$

Éléments finis mixtes hybrides pour
l'étape de diffusion

$$\omega \frac{c^{n+1} - c^{n,*}}{\Delta t} - \text{div}(\mathbf{D}\nabla c^{n+1}) = f$$

Avantages

- Conservation de la masse
- Bonne représentation des fronts
- Dispersion numérique limitée

Avantages

- La concentration et son gradient sont calculés simultanément
- Continuité de flux
- Tenseur dispersion plein

\mathcal{W}_h = espace de Raviart–Thomas–Nédélec d'ordre le plus bas,
et \mathcal{M}_h = l'espace des fonctions constantes sur chaque élément K de \mathcal{T}_h
On pose $\mathbf{r} = \mathbf{D}\nabla c$, et on cherche $c_h \in \mathcal{M}_h$ et $\mathbf{r}_h \in \mathcal{W}_h$

Volumes finis pour l'advection

$$\int_K \omega \frac{c_h^{n,m+1} - c_h^{n,m}}{\Delta t_a} + \int_{\partial K} c_h^{n,m*} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_K = 0, \quad \text{pour } m = 0, \dots, M-1,$$

où $c_h^{n,m*}$ est la concentration amont.

Éléments finis mixte hybrides pour la diffusion

$$\int_K \omega \frac{c_h^{n+1} - c_h^{n,M}}{\Delta t} + \int_K \operatorname{div} \mathbf{r}_h^{n+1} = \int_K f, \quad K \in \mathcal{T}_h,$$

$$\int_{\Omega} D^{-1} \mathbf{r}_h^{n+1} \cdot \mathbf{u} - \int_{\Omega} c_h^{n+1} \operatorname{div} \mathbf{u} = - \int_{\partial \Omega} c_d \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{\Omega}, \quad \mathbf{u} \in \mathcal{W}_h.$$

Implémentation dans 3FLO (code ITASCA)

- Ecoulement transitoire
- Transport VF et EFMH
- Discrétisation en temps avec décomp. d'opérateurs

Comparaison de résultats 3FLO et solution analytique

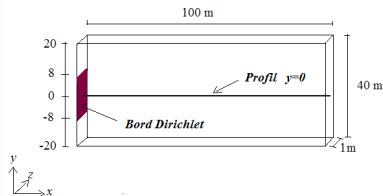
Cas test

Tetra : $\Delta x = 2$, $\Delta y = 2$, $\Delta z = 1$

Cond. bd: $c_d = 10$ if $|y| \leq a$, ($a = 8$)

Deux régimes sont testés :

- diffusif: $Pe = 1$ ($D_L = 2$, $D_T = 0.2$)
- advectif: $Pe = 10$ ($D_L = 0.2$, $D_T = 0.02$).



Implémentation dans 3FLO (code ITASCA)

- Ecoulement transitoire
- Transport VF et EFMH
- Discrétisation en temps avec décomp. d'opérateurs

Comparaison de résultats 3FLO et solution analytique

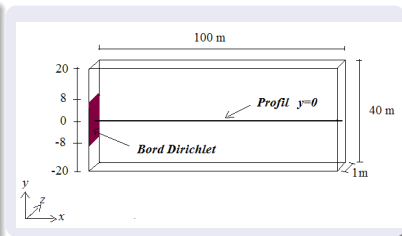
Cas test

Tetra : $\Delta x = 2$, $\Delta y = 2$, $\Delta z = 1$

Cond. bd: $c_d = 10$ if $|y| \leq a$, ($a = 8$)

Deux régimes sont testés :

- diffusif: $Pe = 1$ ($D_L = 2$, $D_T = 0.2$)
- advectif: $Pe = 10$ ($D_L = 0.2$, $D_T = 0.02$).



Implémentation dans 3FLO (code ITASCA)

- Ecoulement transitoire
- Transport VF et EFMH
- Discrétisation en temps avec décomp. d'opérateurs

Comparaison de résultats 3FLO et solution analytique

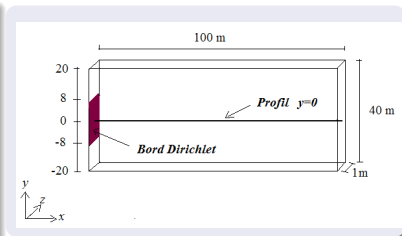
Cas test

Tetra : $\Delta x = 2$, $\Delta y = 2$, $\Delta z = 1$

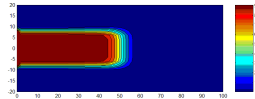
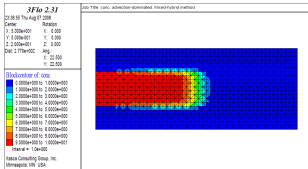
Cond. bd: $c_d = 10$ if $|y| \leq a$, ($a = 8$)

Deux régimes sont testés :

- diffusif: $Pe = 1$ ($D_L = 2$, $D_T = 0.2$)
- advectif: $Pe = 10$ ($D_L = 0.2$, $D_T = 0.02$).

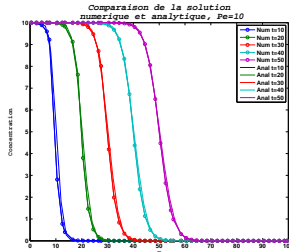


Régime advectif

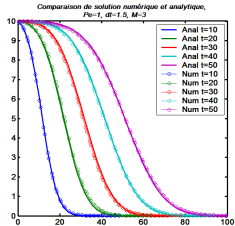
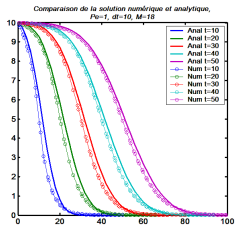
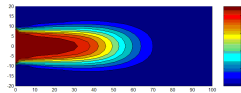
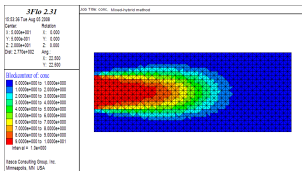


Solution numérique,
 $\Delta t=10$, $M=18$

Solution analytique



Régime diffusif



Couplage transport et chimie

Formulation couplée

Transport pour chaque espèce et composant

$$\begin{aligned} \omega \frac{\partial x_i}{\partial t} + L(x_i) &= r_i^x, & \omega \frac{\partial c_j}{\partial t} + L(c_j) &= r_j^c, \\ \omega \frac{\partial y_i}{\partial t} &= r_i^y, & \omega \frac{\partial s_j}{\partial t} &= r_j^s, \end{aligned}$$

Éliminer les termes de réactions (inconnus) r_i et r_j
en utilisant la loi de conservation de masse



Formulation couplée:

$$\begin{aligned} \omega \frac{\partial T^{ic}}{\partial t} + L(C^{ic}) &= 0, & ic &= 1, \dots, N_c \\ T_{ix}^{ic} &= C_{ix}^{ic} + F_{ix}^{ic} & ic &= 1, \dots, N_c \text{ and } ix = 1, \dots, N_x \\ F_{ix} &= \Psi(T_{ix}) & ix &= 1, \dots, N_x. \end{aligned}$$

Formulation couplée

Transport pour chaque espèce et composant

$$\begin{aligned} \omega \frac{\partial x_i}{\partial t} + L(x_i) &= r_i^x, & \omega \frac{\partial c_j}{\partial t} + L(c_j) &= r_j^c, \\ \omega \frac{\partial y_i}{\partial t} &= r_i^y, & \omega \frac{\partial s_j}{\partial t} &= r_j^s, \end{aligned}$$

Éliminer les termes de réactions (inconnus) r_i et r_j
en utilisant la loi de conservation de masse



Formulation couplée:

$$\begin{aligned} \omega \frac{\partial T^{ic}}{\partial t} + L(C^{ic}) &= 0, & ic &= 1, \dots, N_c \\ T_{ix}^{ic} &= C_{ix}^{ic} + F_{ix}^{ic} & ic &= 1, \dots, N_c \text{ and } ix = 1, \dots, N_x \\ F_{ix} &= \Psi(T_{ix}) & ix &= 1, \dots, N_x. \end{aligned}$$

Différentes algorithmes de couplage

- SIA (Yeh et Tripathi 1989, Carrayrou 2004)
- DSA (Hammond et Valocchi 2005, Saaltink 1998)
- Méthode de réduction (Knabner, Kraeutle 2006)
- DAE (Erhel, de Dieuleveult 2008)

Nouvelle approche globale

$$\begin{cases} \omega \frac{C^{n+1} - C^n}{\Delta t} + \omega \frac{F^{n+1} - F^n}{\Delta t} + L(C^{n+1}) = 0 \\ T^{n+1} = C^{n+1} + F^{n+1} \\ F^{n+1} = \Psi(T^{n+1}) \end{cases}$$



$$f(C^{n+1}, T^{n+1}, F^{n+1}) = 0 \quad \text{Système non linéaire}$$

- Méthode de Newton exacte ou inexacte?

Différentes algorithmes de couplage

- SIA (Yeh et Tripathi 1989, Carrayrou 2004)
- DSA (Hammond et Valocchi 2005, Saaltink 1998)
- Méthode de réduction (Knabner, Kraeutle 2006)
- DAE (Erhel, de Dieuleveult 2008)

Nouvelle approche globale

$$\begin{cases} \omega \frac{C^{n+1} - C^n}{\Delta t} + \omega \frac{F^{n+1} - F^n}{\Delta t} + L(C^{n+1}) = 0 \\ T^{n+1} = C^{n+1} + F^{n+1} \\ F^{n+1} = \Psi(T^{n+1}) \end{cases}$$



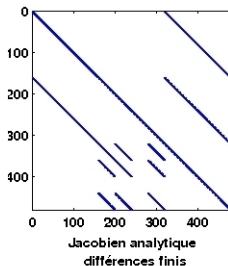
$$f(C^{n+1}, T^{n+1}, F^{n+1}) = 0 \quad \text{Système non linéaire}$$

- Méthode de Newton exacte ou inexacte?

Structure de la matrice Jacobienne

$$\text{Jacobien : } f'(C, T, F) = \begin{pmatrix} (\omega I + \Delta t L) & 0 & \omega I \\ -I & I & -I \\ 0 & -\Psi'(T) & I \end{pmatrix}$$

$\Psi'(T)$ La matrice Jacobienne de chimie

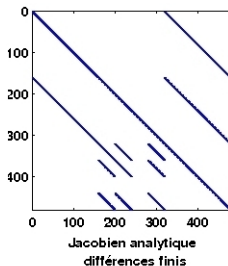


- Stockage de la matrice Jacobienne est coûteux, la taille de la matrice est $3N_x N_c$

Structure de la matrice Jacobienne

$$\text{Jacobien : } f'(C, T, F) = \begin{pmatrix} (\omega I + \Delta t L) & 0 & \omega I \\ -I & I & -I \\ 0 & -\Psi'(T) & I \end{pmatrix}$$

$\Psi'(T)$ La matrice Jacobienne de chimie



- Stockage de la matrice Jacobienne est coûteux, la taille de la matrice est $3N_x N_c$

Méthode de Newton Krylov

- GMRES, TFQMR et BiCGStab nécessite seulement le **produit de la matrice Jacobienne fois un vecteur**.

peut être approché par **differences finis** ou calculé **exactement**.

* **Approximation numérique**: soit x un point, et v un vecteur, l'approximation est

$$Jv = f'(x)v \approx \frac{f(x + \epsilon v) - f(x)}{\epsilon} \quad (\epsilon \text{ petit})$$

* **Calcul analytique**

$$J \begin{pmatrix} v_C \\ v_T \\ v_F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\omega + \Delta t L)v_C \\ -v_C + v_T - v_F \\ v_F - \Psi'(T)v_T \end{pmatrix}$$

Méthode de Newton Krylov

- GMRES, TFQMR et BiCGStab nécessite seulement le **produit de la matrice Jacobienne fois un vecteur**.

peut être approché par **differences finis** ou calculé **exactement**.

* **Approximation numérique**: soit x un point, et v un vecteur, l'approximation est

$$Jv = f'(x)v \approx \frac{f(x + \epsilon v) - f(x)}{\epsilon} \quad (\epsilon \text{ petit})$$

- * **Calcul analytique**

$$J \begin{pmatrix} v_C \\ v_T \\ v_F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\omega + \Delta t L)v_C \\ -v_C + v_T - v_F \\ v_F - \Psi'(T)v_T \end{pmatrix}$$

Méthode de Newton Krylov

- Résoud le système linéaire par une méthode **iterative**.
- **Methods de Newton inexacte**

- **Approximation** de la direction de Newton:

$$\|f'(x_k)d + f(x_k)\| \leq \eta \|f(x_k)\| \quad (0 < \eta < 1)$$

- Choix du terme η ?

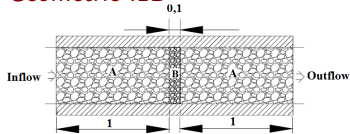
- * Garder une convergence quadratique (localement)

- * Eviter une résolution trop précise du système linéaire

- $\eta = \gamma \|f(x_k)\|^2 / \|f(x_{k-1})\|^2$ (Kelley, Eisenstat et Walker)

Benchmark MoMaS 1D "easy"

● Géométrie :1D



A: $perm = 0.01$, $poros = 0.25$, $W = 1$

B: $perm = 10^{-5}$, $poros = 0.5$, $W = 10$

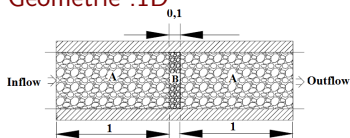
Conc. Totale	T_1	T_2	T_3	T_4
	0	-2	0	2
Injection $t \in [0, 5000]$	0.3	0.3	0.3	0
Lessivage $t \in [5000, \dots]$	0	-2	0	2

● Tableau Morel : Equilibre

	X_1	X_2	X_3	X_4	S	K
C_1	0	-1	0	0	0	10^{-12}
C_2	0	1	1	0	0	1
C_3	0	-1	0	1	0	1
C_4	0	-4	1	3	0	10^{-1}
C_5	0	4	3	1	0	10^{+35}
CS_1	0	3	1	0	1	10^{+6}
CS_2	0	-3	0	1	2	10^{-1}

Benchmark MoMaS 1D "easy"

- Géométrie :1D



A: $perm = 0.01$, $poros = 0.25$, $W = 1$

B: $perm = 10^{-5}$, $poros = 0.5$, $W = 10$

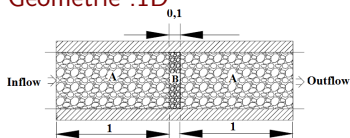
Conc. Totale	T_1	T_2	T_3	T_4
	0	-2	0	2
Injection $t \in [0, 5000]$	0.3	0.3	0.3	0
Lessivage $t \in [5000, \dots]$	0	-2	0	2

- Tableau Morel : Equilibre

	X_1	X_2	X_3	X_4	S	K
C_1	0	-1	0	0	0	10^{-12}
C_2	0	1	1	0	0	1
C_3	0	-1	0	1	0	1
C_4	0	-4	1	3	0	10^{-1}
C_5	0	4	3	1	0	10^{+35}
CS_1	0	3	1	0	1	10^{+6}
CS_2	0	-3	0	1	2	10^{-1}

Benchmark MoMaS 1D "easy"

- Géométrie :1D



A: $perm = 0.01$, $poros = 0.25$, $W = 1$

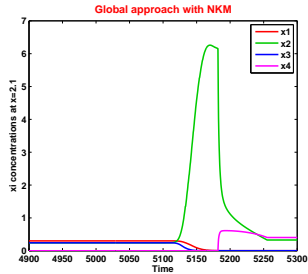
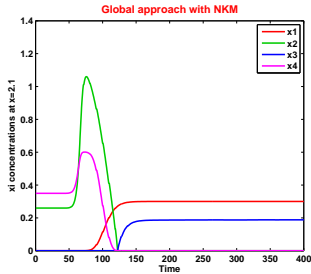
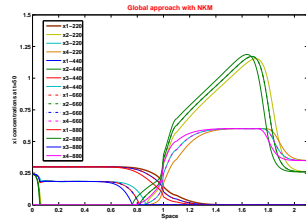
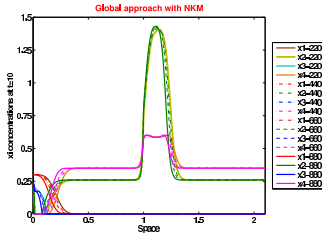
B: $perm = 10^{-5}$, $poros = 0.5$, $W = 10$

Conc.	T_1	T_2	T_3	T_4
Totale	0	-2	0	2
Injection $t \in [0, 5000]$	0.3	0.3	0.3	0
Lessivage $t \in [5000, \dots]$	0	-2	0	2

- Tableau Morel : Equilibre

	X_1	X_2	X_3	X_4	S	K
C_1	0	-1	0	0	0	10^{-12}
C_2	0	1	1	0	0	1
C_3	0	-1	0	1	0	1
C_4	0	-4	1	3	0	10^{-1}
C_5	0	4	3	1	0	10^{+35}
CS_1	0	3	1	0	1	10^{+6}
CS_2	0	-3	0	1	2	10^{-1}

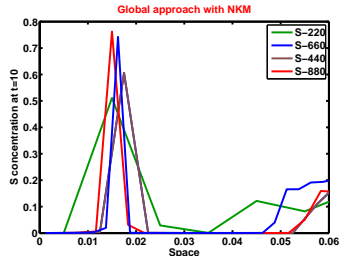
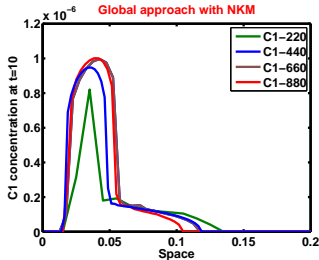
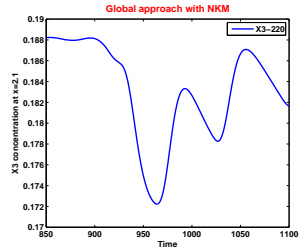
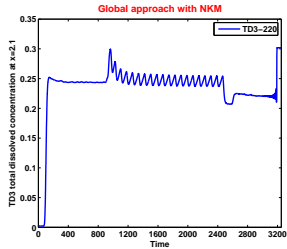
Injection et lessivage



Oscillations

Conséquence de la discrétisation en espace pour le système chimique (V. Lagneau et J. van der Lee).

Influence du maillage



comparison temps CPU pour trois méthodes

(Application à un autre cas test Phreeqc "échange d'ions")

Entre deux pas de temps:

- **SIA** : entre 20 et 27 iter.

no. itér. ↗ quand no. points ↗

- **NKM** : moins de 6 itér NLin.

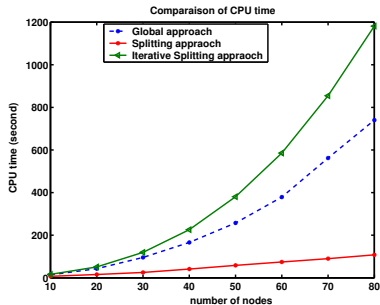
Une étape de Newton:

entre 10 et 15 itér. Lin.

no. NLin. itér \rightsquigarrow quand no. points

no. itér. Lin. ↗ quand no. points ↗

⇒ L'approche globale peut probablement être amélioré par l'utilisation d'un bon préconditionneur



Conclusion et perspectives

- Etude du transport non réactif 3D
 - Etude du transport réactif 1D
 - Couplage par une approche globale
 - Utilisation de la méthode de Newton-Krylov
 - benchmark MoMaS 1D easy
-
- Extension 2D et 3D
 - Phénomène de précipitation
 - Etude d'un préconditionneur

Part II

Intersection des fractures dans un milieu poreux

Intersection des fractures

- Modèles pour la modélisation des fractures
- Raffinement du maillage dans les fractures
- Fractures comme des interfaces
 - Plus perméable
 - Continuité de la pression et discontinuité du flux
 - Moins perméable
 - Discontinuité de la pression et du flux
- Nouvelle contribution
 - Théorique → Intersection des fractures
 - Numérique → 3D
 - Configurations arbitraires
 - Préconditionneur



L'équation d'écoulement dans un milieu poreux

Equation de la conservation de masse

$$\mathbf{div}(\vec{u}) = f$$

\vec{u} : vitesse de Darcy

f : le terme source

Loi de Darcy

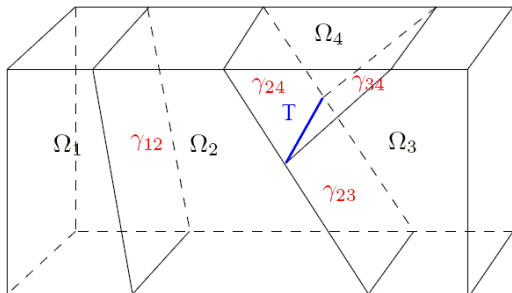
$$\vec{u} = -K \vec{\nabla} P$$

P : la pression

K : le tenseur de perméabilité

Problème modèle avec fractures

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{div}(\vec{u}) = f & \text{dans } \Omega \\ \vec{u} = -K \vec{\nabla} P & \text{dans } \Omega \\ P = P_d & \text{sur } \partial\Omega_D \\ \vec{u} \cdot \vec{\nu} = 0 & \text{sur } \partial\Omega_N \end{array} \right.$$



Décomposition de domaine

$$P_{D_i} \left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{div}_i(\vec{u}_i) = f_i & \text{dans } \Omega_i \\ \vec{u}_i = -K_i \vec{\nabla} P_i & \text{dans } \Omega_i \\ P_i = P_{d_i} & \text{sur } \Gamma_{D_i} \\ \vec{u}_i \cdot \vec{\nu}_i = 0 & \text{sur } \Gamma_{N_i} \\ p_i = p_{i,j} + \frac{d_{i,j}}{4K_{i,j}^n} (\xi \vec{u}_i \cdot \vec{\nu}_i - (1 - \xi) \vec{u}_j \cdot \vec{\nu}_j) & \text{sur } \gamma_{i,j} \end{array} \right.$$

$$P_{\gamma_{ij}} \left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{div}_{\gamma_{ij}}(\vec{u}_{ij}) = f_{ij} + \underbrace{(\vec{u}_i \cdot \vec{\nu}_i + \vec{u}_j \cdot \vec{\nu}_j)}_{\neq 0} & \text{dans } \gamma_{ij} \\ \vec{u}_{ij} = -d_{ij} K_{ij} \vec{\nabla}_{\gamma_{ij}} P_{ij} & \text{dans } \gamma_{ij} \\ P_{ij} = P_{d_{ij}} & \text{sur } \partial\gamma_{ij} \cap \partial\Omega_D \\ \vec{u}_{ij} \cdot \vec{\nu}_{ij} = 0 & \text{sur } \partial\gamma_{ij} \cap \partial\Omega_N, \end{array} \right.$$

$$P_T \left\{ \begin{array}{ll} P_{23} = P_{24} = P_{34} = P_T & \text{sur } T \\ \vec{u}_{23} \cdot \vec{\nu}_{23} + \vec{u}_{24} \cdot \vec{\nu}_{24} + \vec{u}_{34} \cdot \vec{\nu}_{34} = 0 & \text{sur } T \end{array} \right.$$

Formulation mixte

Trouver : $(\mathbf{u}, \mathbf{P}) \in W \times M$ tel que :

$$\begin{cases} \alpha(\mathbf{u}, \mathbf{v}) - \beta(\mathbf{v}, \mathbf{P}) &= -L_d(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in W \\ \beta(\mathbf{u}, \mathbf{r}) &= L_f(\mathbf{r}) \quad \forall \mathbf{r} \in M. \end{cases}$$

$$W = \left\{ \mathbf{u} = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3, \mathbf{u}_4, \mathbf{u}_{12}, \mathbf{u}_{23}, \mathbf{u}_{24}, \mathbf{u}_{34}) : \begin{aligned} &\mathbf{u}_i \in H(\mathbf{div}, \Omega_i), \\ &(\mathbf{u}_i \cdot \vec{\nu}_i + \mathbf{u}_j \cdot \vec{\nu}_j) \in L^2(\gamma_{ij}), \quad \mathbf{u}_{ij} \in H(\mathbf{div}, \gamma_{ij}) \\ &\text{et } (\mathbf{u}_{23} \cdot \vec{\nu}_{23} + \mathbf{u}_{24} \cdot \vec{\nu}_{24} + \mathbf{u}_{34} \cdot \vec{\nu}_{34}) \in L^2(T) \end{aligned} \right\}$$

$$M = \left\{ \mathbf{P} = (\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, \mathbf{P}_3, \mathbf{P}_4, \mathbf{P}_{12}, \mathbf{P}_{23}, \mathbf{P}_{24}, \mathbf{P}_{34}, \mathbf{P}_T) : \begin{aligned} &\mathbf{P}_i \in L^2(\Omega_i), \\ &\mathbf{P}_{ij} \in L^2(\gamma_{ij}), \text{ et } \mathbf{P}_T \in L^2(T) \end{aligned} \right\}$$

Formes bilinéaires

$$\begin{aligned}
 \alpha(u, v) &= \sum_i \int_{\Omega_i} K_i^{-1} u_i \cdot v_i + \sum_{i,j} \int_{\gamma_{ij}} (d K_{ij}^T)^{-1} u_{ij} \cdot v_{ij} \\
 &+ \sum_{(i,j) \in S} \int_{\gamma_{i,j}} \frac{d_{i,j}}{4K_{i,j}^n} ((\xi u_i \cdot \nu_i - (1 - \xi) u_j \cdot \nu_j) u_i \cdot \vec{\nu}_i \\
 &+ (\xi u_j \cdot \nu_j - (1 - \xi) u_i \cdot \nu_i) u_j \cdot \nu_j) \\
 \beta(u, r) &= \sum_i \int_{\Omega_i} \operatorname{div}_i u_i r_i + \sum_{i,j} \left[\int_{\gamma_{ij}} (\operatorname{div}_{\gamma_{ij}} u_{ij} - (u_i \cdot \nu_i + u_j \cdot \nu_j)) r_{ij} \right] \\
 &+ \int_T (u_{23} \cdot \nu_{23} + u_{24} \cdot \nu_{24} + u_{34} \cdot \nu_{34}) r_T,
 \end{aligned}$$

Formes linéaires

$$\begin{aligned}
 L_f(r) &= \sum_i \int_{\Omega_i} f_i r_i + \sum_{i,j} \int_{\gamma_{ij}} f_{ij} r_{ij} \\
 L_d(v) &= \sum_i \int_{\Gamma_{D_i}} P_{d_i} v_i \cdot \nu_i + \sum_{i,j} \int_{\partial \gamma_{ij} \cap \partial \Omega_D} P_{d_{\gamma_{ij}}} v_{ij} \cdot \nu_{ij}
 \end{aligned}$$

Théorie de Babuska Brezzi



L'existence et l'unicité

Formes bilinéaires

$$\begin{aligned}
 \alpha(u, v) &= \sum_i \int_{\Omega_i} K_i^{-1} u_i \cdot v_i + \sum_{i,j} \int_{\gamma_{ij}} (d K_{ij}^T)^{-1} u_{ij} \cdot v_{ij} \\
 &+ \sum_{(i,j) \in S} \int_{\gamma_{i,j}} \frac{d_{i,j}}{4K_{i,j}^n} ((\xi u_i \cdot \nu_i - (1-\xi) u_j \cdot \nu_j) u_i \cdot \vec{\nu}_i \\
 &+ (\xi u_j \cdot \nu_j - (1-\xi) u_i \cdot \nu_i) u_j \cdot \nu_j) \\
 \beta(u, r) &= \sum_i \int_{\Omega_i} \operatorname{div}_i u_i r_i + \sum_{i,j} \left[\int_{\gamma_{ij}} (\operatorname{div}_{\gamma_{ij}} u_{ij} - (u_i \cdot \nu_i + u_j \cdot \nu_j)) r_{ij} \right] \\
 &+ \int_T (u_{23} \cdot \nu_{23} + u_{24} \cdot \nu_{24} + u_{34} \cdot \nu_{34}) r_T,
 \end{aligned}$$

Formes linéaires

$$\begin{aligned}
 L_f(r) &= \sum_i \int_{\Omega_i} f_i r_i + \sum_{i,j} \int_{\gamma_{ij}} f_{ij} r_{ij} \\
 L_d(v) &= \sum_i \int_{\Gamma_{D_i}} P_{d_i} v_i \cdot \nu_i + \sum_{i,j} \int_{\partial \gamma_{ij} \cap \partial \Omega_D} P_{d_{\gamma_{ij}}} v_{ij} \cdot \nu_{ij}
 \end{aligned}$$

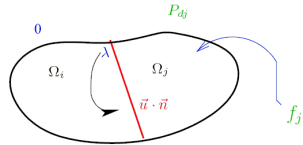
Théorie de Babuska Brezzi \Rightarrow L'existence et l'unicité

Réduction à un problème d'interface

Opérateur Steklov-Poincaré :

$$S_i(\lambda) = -(\vec{u}_i \cdot \vec{v}_i)(0, 0, \lambda)$$

$$\chi_i(f_i, P_{di}) = (\vec{u}_i \cdot \vec{v}_i)(f_i, P_{di}, 0)$$



$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{div}_i(\vec{u}_i) = 0 & (f_i) \text{ dans } \Omega_i \\ \vec{u}_i = -K_i \vec{\nabla} P_i & \text{dans } \Omega_i \\ P_i = 0 & (P_{di}) \text{ sur } \Gamma_{Di} \\ \vec{u}_i \cdot \vec{v}_i = 0 & \text{sur } \Gamma_{Ni} \\ P_i = \lambda & (0) \text{ dans } \gamma_{ij}. \end{array} \right.$$

Le problème à l'interface γ :

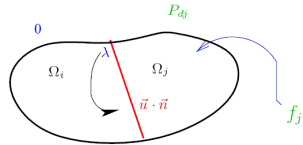
$$\left\{ \begin{array}{ll} \sum_i S_i(\lambda) - \mathbf{div}(d K_\gamma \vec{\nabla} \lambda) = f_\gamma + \sum_i \chi_i(f_i, P_{di}) & \text{dans } \gamma \\ \lambda = P_{d\gamma} & \text{sur } \partial\gamma \cap \partial\Omega_D, \end{array} \right.$$

Réduction à un problème d'interface

Opérateur Steklov-Poincaré :

$$S_i(\lambda) = -(\vec{u}_i \cdot \vec{v}_i)(0, 0, \lambda)$$

$$\chi_i(f_i, P_{di}) = (\vec{u}_i \cdot \vec{v}_i)(f_i, P_{di}, 0)$$



$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{div}_i(\vec{u}_i) = 0 & (f_i) \text{ dans } \Omega_i \\ \vec{u}_i = -K_i \vec{\nabla} P_i & \text{dans } \Omega_i \\ P_i = 0 & (P_{di}) \text{ sur } \Gamma_{Di} \\ \vec{u}_i \cdot \vec{v}_i = 0 & \text{sur } \Gamma_{Ni} \\ P_i = \lambda & (0) \text{ dans } \gamma_{ij}. \end{array} \right.$$

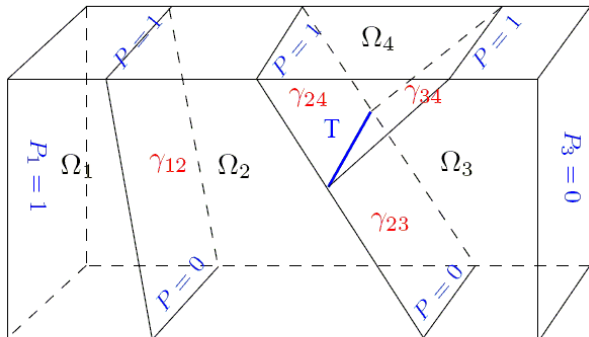
Le problème à l'interface γ :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \sum_i S_i(\lambda) - \mathbf{div}(d K_\gamma \vec{\nabla} \lambda) = f_\gamma + \sum_i \chi_i(f_i, P_{di}) & \text{dans } \gamma \\ \lambda = P_{d\gamma} & \text{sur } \partial\gamma \cap \partial\Omega_D, \end{array} \right.$$

Résultats numériques

Test case 1

$$\vec{u} \cdot \vec{n} = 0$$



$$\vec{u} \cdot \vec{n} = 0$$

Décomposition de domaine sans fracture

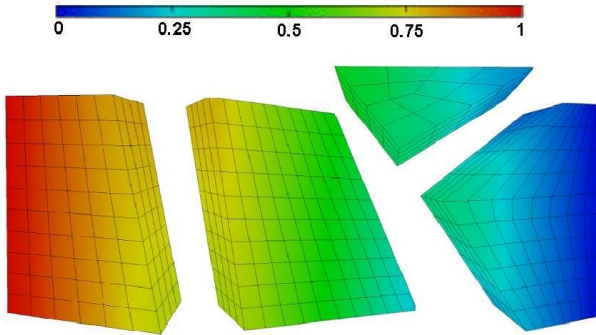


Figure: Pression donnée par le modèle : $K_i = 1$, $i = 1, \dots, 4$

Décomposition de domaine avec fracture

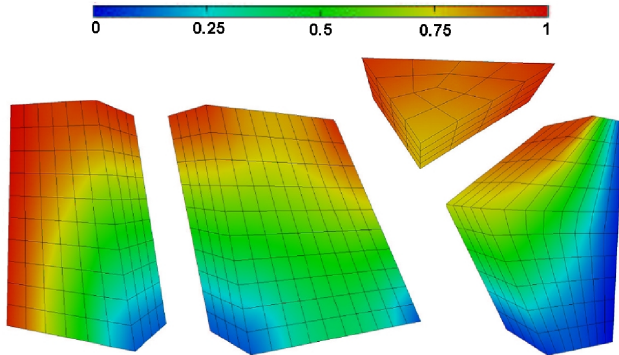


Figure: Pression donnée par le modèle : $dK_\gamma = 100$, $K_i = 1$, $i = 1, \dots, 4$

Le préconditionneur

Le système

$$\left(\sum_i \mathcal{S}_i - d K_\gamma \Delta\right)(\lambda) = b \quad \text{sur } \gamma$$

Le préconditionneur

DDM sans fracture \rightarrow Neumann-Neumann $\left(\sum_i \mathcal{S}_i^{-1}\right)^{-1}$

DDM avec fracture:

Ordres différentiels:

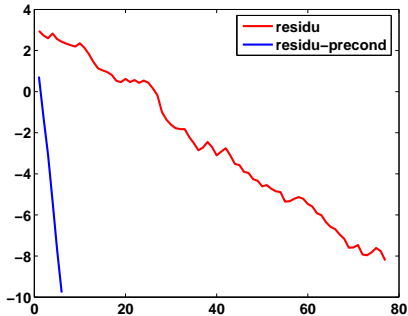
$$\mathcal{S}_i \rightarrow 1$$

$$\Delta \rightarrow 2$$

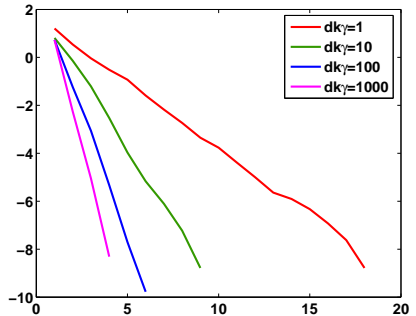
Un bon choix de préconditionneur est $(d K_\gamma \Delta)^{-1}$

Tests d'efficacité du préconditionneur

Test de préconditionneur
(case $dk_\gamma = 100$)



Test de préconditionneur
(avec différentes valeurs de dk_γ)



Conclusion et perspectives

- Etude théorique
- Configuration arbitraire en 3D
- Intersection de fractures
- Préconditionneur
- Hexahédres irréguliers

- Tetrahédres, maillage nonconforme
- Extension à l'équation du transport

Solution analytique

$$c(x, y, t) = \frac{xc_0}{(16\pi D_L)^2} \int_0^t \tau^{-\frac{3}{2}} f(\tau) d\tau$$

$$f(\tau) = \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{a+y}{(4D_T\tau)^{\frac{1}{2}}} \right] + \operatorname{erf} \left[\frac{a-y}{(4D_T\tau)^{\frac{1}{2}}} \right] \right\} \exp \left[- \left(\frac{x-v\tau}{(4D_L\tau)^{\frac{1}{2}}} \right)^2 \right].$$