

PARADIS: modélisation stochastique du transport de soluté dans un milieu hétérogène

Jocelyne ERHEL, Inria, Rennes

Anthony BEAUDOIN, Institut Pprime, Poitiers

Jean-Raynald de DREUZY, Géosciences, Rennes

Géraldine PICHOT, Inria, Rennes

Mots-clés : milieu poreux hétérogène, modèle stochastique, méthode multigrille, marcheur aléatoire

La modélisation mathématique et la simulation numérique permettent d’analyser l’écoulement de l’eau et le transport de solutés dans un milieu souterrain fortement hétérogène. La très forte variabilité de la conductivité hydraulique, due à l’histoire de la lente formation des couches géologiques, est la clef pour comprendre la dynamique de l’écoulement et du transport souterrains [10]. Pour effectuer des prévisions sur des ressources d’intérêt économique (eau, pétrole, gaz), il est indispensable de quantifier l’incertitude des simulations. En outre, il faut réaliser un changement d’échelle à partir des résultats de simulations pour analyser le comportement global d’un aquifère.

Ce cadre applicatif conduit à choisir une modélisation stochastique des phénomènes d’écoulement et de transport, où les données physiques, en particulier la conductivité hydraulique, sont modélisées par des champs aléatoires. Il en résulte que la vitesse de l’écoulement et la concentration des solutés sont également des champs aléatoires dont il faut quantifier la variabilité [7].

Nous considérons ici un modèle d’écoulement fluide stationnaire, monophasique, en milieu saturé:

$$\begin{cases} \epsilon v = -K \nabla h, \\ \nabla \cdot (\epsilon v) = q, \end{cases} \quad (1)$$

où ϵv est la vitesse de Darcy, h est la charge hydraulique, ϵ est la porosité, K est la conductivité (un champ aléatoire) et q est un terme puits-source. La vitesse solution de ce modèle est alors utilisée dans un modèle de transport d’un soluté inerte par advection-dispersion:

$$\frac{\partial(\epsilon c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon c v) - \nabla \cdot (\epsilon D \nabla c) = 0, \quad (2)$$

où c est la concentration du soluté, D est le coefficient de dispersion. Les deux modèles ne sont pas couplés et sont linéaires mais la modélisation stochastique induit plusieurs difficultés numériques. De nombreuses études ont été récemment consacrées à ces modèles stochastiques et à leur résolution numérique.

La première étape consiste à générer les données aléatoires, par exemple un champ de conductivité hydraulique avec une loi log-normale corrélée. Ensuite, dans le modèle d’écoulement, il faut choisir une méthode de quantification d’incertitude, couplée à une discrétisation spatiale [2],[15], [6]. Puis, dans le modèle de transport, il faut gérer un champ de vitesse aléatoire dont la distribution probabiliste n’est connue qu’à travers le premier modèle d’écoulement [1].

Nous proposons un modèle numérique intégrant ces différentes étapes et permettant de quantifier la macro-dispersion d’un soluté inerte. Une analyse théorique a fourni des estimations d’erreur a priori [5]. Nous avons ainsi analysé cette macro-dispersion dans le cas d’un milieu 2D avec une conductivité hydraulique log-normale et une corrélation exponentielle, à la fois en advection pure, en advection-diffusion moléculaire [8] (voir aussi un commentaire [14] et notre réponse [9]), et en advection-dispersion cinématique [4]. L’étude de la macro-dispersion dans un milieu 3D est en cours.

Dans cet article, nous détaillons les différentes étapes de simulation, en justifiant les choix effectués. Nous montrons des résultats expérimentaux de convergence pour un milieu 3D avec une conductivité hydraulique log-normale corrélée. Le modèle est mis en oeuvre dans le logiciel PARADIS, qui est intégré à la plate-forme H2OLab [11] (<http://h2olab.inria.fr>).

Nous avons choisi une approche non intrusive de Monte-Carlo, qui effectue plusieurs tirages aléatoires des données et réalise une simulation pour chaque échantillon, de façon à limiter la dimension des systèmes discrets. En effet, pour analyser le comportement asymptotique en temps de la macro-dispersion, le domaine de calcul doit être de grande taille et il est nécessaire de recourir au calcul à haute performance.

De plus, les simulations sont indépendantes et peuvent être lancées simultanément dans une architecture distribuée, telle qu'une grille de calcul [12]. Il s'avère que dans les cas considérés, la méthode de Monte-Carlo est efficace grâce aux propriétés ergodiques du problème [8].

La génération de la perméabilité est réalisée en utilisant une transformée de Fourier discrète [16], [17]. L'étude expérimentale permet de calibrer le pas de maillage pour bien approcher la loi de distribution. Le modèle d'écoulement est discrétisé à l'aide d'une méthode d'éléments finis mixtes hybrides, garantissant la conservation locale de la masse et permettant de calculer à la fois la charge hydraulique et la vitesse. Le système linéaire, qui est alors symétrique défini positif, est ensuite résolu par une méthode multigrille algébrique [11]. En effet, l'approche algébrique permet de traiter de fortes hétérogénéités et l'approche multigrille permet de traiter de très grands domaines en limitant les besoins en mémoire. De plus, il existe maintenant des logiciels efficaces sur machines parallèles; nous avons utilisé le logiciel HYPRE [13]. Le modèle de transport est discrétisé par une méthode lagrangienne, de type marcheur aléatoire. En effet, le phénomène d'advection domine ici et la plupart des méthodes eulériennes introduiraient une trop forte diffusion numérique. En advection pure, il s'agit simplement d'une méthode des caractéristiques. La diffusion est modélisée par un mouvement brownien classique. Une des difficultés est alors de prouver la convergence du schéma global, avec deux modélisations stochastiques imbriquées [5]. Puisque les particules n'interagissent pas, il est possible de simuler leurs trajectoires en parallèle. Notre algorithme parallèle utilise à la fois cette approche et la distribution par sous-domaines de la vitesse [3].

Grâce à cette approche modulaire, nous pouvons analyser les propriétés mathématiques et numériques des méthodes utilisées dans les différentes étapes. Nous avons d'ores et déjà étudié les problèmes de changement d'échelles en caractérisant la macro-dispersion dans des milieux hétérogènes 2D et 3D. La compréhension de cette dynamique est un premier pas pour traiter des problèmes sociétaux majeurs, comme la gestion des ressources en eau souterraine, la remédiation de sites pollués, le stockage géologique de déchets dangereux.

Références

- [1] S. Attinger and M. Dentz. Exact transversal macrodispersion coefficients for transport in heterogeneous formations. *Stochastic Environmental Risk and Research Assessment*, Volume 18(1):9–15, 2004.
- [2] I. Babuska, F. Nobile, and R. Tempone. A stochastic collocation method for elliptic partial differential equations with random input data. *SIAM Review*, 52(2):317–355, 2010.
- [3] A. Beaudoin, J-R. de Dreuzy, and J. Erhel. An efficient parallel particle tracker for advection-diffusion simulations in heterogeneous porous media. In A.-M. Kermarrec, L. Bougé, and T. Priol, editors, *Euro-Par 2007, LNCS 4641*, pages 717–726. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2007.
- [4] A. Beaudoin, J-R. de Dreuzy, and J. Erhel. Numerical monte-carlo analysis of the influence of pore scale dispersion on macrodispersion in 2d heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, 46:W12537, 2010.
- [5] J. Charrier. Numerical analysis of the advection-diffusion of a solute in random media. Research Report RR-7585, INRIA, March 2011.
- [6] J. Charrier. Strong and weak error estimates for elliptic partial differential equations with random coefficients. *SIAM Journal on numerical analysis*, 50:216–246, 2012.
- [7] G. Dagan, A. Fiori, and I. Jankovic. Flow and transport in highly heterogeneous formations: 1. conceptual framework and validity of first-order approximations. *Water Resources Research*, 9, 2003.
- [8] J.-R. de Dreuzy, A. Beaudoin, and J. Erhel. Asymptotic dispersion in 2D heterogeneous porous media determined by parallel numerical simulations. *Water Resource Research*, 43(W10439, doi:10.1029/2006WR005394), 2007.
- [9] J.-R. de Dreuzy, A. Beaudoin, and J. Erhel. Reply to comment by a. Fiori et al. on "asymptotic dispersion in 2D heterogeneous porous media determined by parallel numerical simulations". *Water Resources Research*, 44(W06604, doi:10.1029/2008WR007010), 2008.

- [10] Ghislain de Marsily, Frédéric Delay, J. Goncalvez, Philippe Renard, Vanessa Teles, and S. Violette. Dealing with spatial heterogeneity. *Hydrogeology Journal*, 13:161–183, 2005.
- [11] J. Erhel, J.-R. de Dreuzy, A. Beaudoin, E. Bresciani, and D. Tromeur-Dervout. A parallel scientific software for heterogeneous hydrogeology. In Ismail H. Tuncer, Ulgen Gulcat, David R. Emerson, and Kenichi Matsuno, editors, *Parallel Computational Fluid Dynamics 2007*, volume 67 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, pages 39–48. Springer, 2009. invited plenary talk.
- [12] J. Erhel, J.-R. de Dreuzy, and E. Bresciani. Multi-parametric intensive stochastic simulations for hydrogeology on a computational grid. In D. Tromeur-Dervout, G. Brenner, D. Emerson, and J. Erhel, editors, *Parallel Computational Fluid Dynamics 2008*, Lecture Notes in Computational Science and Engineering (LNCSE), Lyon, May 2010. accepted contribution.
- [13] R. D. Falgout, J. E. Jones, and U. Meier Yang. Pursuing scalability for Hypre’s conceptual interfaces. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 31(3):326–350, 2005.
- [14] A. Fiori, G. Dagan, and I. Jankovic. Comment on ”asymptotic dispersion in 2D heterogeneous porous media determined by parallel numerical simulations”, by J.-R. de Dreuzy et al. *Water Resources Research*, 44(W06603), 2008.
- [15] O.P. Le Maître and O.M. Knio. *Spectral Methods for Uncertainty Quantification With Applications to Computational Fluid Dynamics*. Scientific Computation. Springer, 2010.
- [16] E. Pardo-Iguzquiza and M. Chica-Olmo. The Fourier integral method: an efficient spectral method for simulation of random fields. *Mathematical Geology*, 25(2):177–217, 1993.
- [17] G. Pichot. About the generation of a log-normal correlated field using spectral simulation. Technical report, Inria, 2012.

Jocelyne ERHEL, Inria, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes, France
 jocelyne.erhel@inria.fr

Anthony BEAUDOIN, Institut Pprime, UPR 3346, CNRS - Université de Poitiers - ENSMA, BP 30179, F86962 Futuroscope Chasseneuil Cedex, France
 anthony.beaudoin@univ-poitiers.fr

Jean-Raynald de DREUZY, Géosciences, UMR 6118, CNRS - Université de Rennes 1, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes Cedex, France
 jean-raynald.de-dreuzy@univ-rennes1.fr

Géraldine PICHOT, Inria, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes Cedex, France
 geraldine.pichot@inria.fr