
Résolution de l'équation de transport en milieu poreux par un schéma CVFE

Marie-Eve Stoeckel

EDF R&D, LNHE
6, quai Watier
F-78401 Chatou cedex
marie-eve.stoeckel@edf.fr

RÉSUMÉ. Le schéma CVFE (Control Volume Finite Elements) a été développé pour mieux résoudre l'équation de transport en milieu poreux, en particulier pour la modélisation de scénarios de stockage en profondeur de déchets radioactifs. La principale caractéristique du schéma CVFE est le traitement du terme convectif, qui se fait en introduisant la loi de Darcy et un décentrement (amont ou variable). Les données à fournir pour la modélisation ne sont plus les vitesses mais le champ des charges et la distribution spatiale des perméabilités sur le domaine qui doivent être définies par élément pour une meilleure gestion des interfaces dans le traitement des hétérogénéités. Un soin particulier est apporté au traitement des termes de bords : les conditions aux limites Dirichlet sont définies par une condition équivalente en flux imposé. Le schéma CVFE a été appliqué au cas COUPLEXI, exercice de modélisation défini par l'ANDRA pour la simulation du transfert de radionucléides depuis un stockage de déchets radioactifs en formation géologique profonde jusqu'à la surface. Les résultats obtenus sont conservatifs, monotones et sont identiques à ceux obtenus par les différents participants à l'exercice COUPLEXI.

ABSTRACT. The Control Volume Finite Elements (CVFE) is used to solve the transfer equation in porous media in the scope of nuclear waste storage in the geological setting. The main feature of this numerical scheme is the direct introduction of Darcy's law in the convective term. The used data are hydraulic heads and permeabilities and not the usual velocity field. The boundary terms are also defined and computed more precisely as in a classic Finite Elements scheme. The CVFE has been applied to solve the COUPLEXI modeling exercise, defined by ANDRA (the French Agency for Nuclear Waste Management) for the modeling of transfer radionuclides released from a deep nuclear waste storage to the discharge areas. The results show that the CVFE scheme respects well the mass balance and is validated by the results of the COUPLEXI exercise participants.

MOTS-CLÉS : modélisation hydrogéologique, transport, schéma numérique, éléments finis, CVFE, stockage, COUPLEX, déchets radioactifs.

KEYWORDS: hydrogeological modeling, transfer, numerical scheme, finite elements, CVFE, storage, COUPLEX, radioactive waste.

1. Introduction

Le logiciel de transport de polluant SUBIEF2D propose plusieurs méthodes de résolution. Celle adaptée et utilisée pour la modélisation en deux dimensions du transport dans les eaux souterraines est basée sur la méthode des éléments finis (SUPG, Streamline Upwind Petrov Galerkin). Cette méthode repose sur la résolution de la forme non conservative de l'équation de convection-dispersion et a montré ses limites en termes de bilans de masse, de monotonie et de dispersion numérique. Le schéma CVFE (Control Volume Finite Elements) a été adapté pour mieux résoudre le transport non réactif en milieu poreux, en particulier pour la modélisation de scénarios de stockage en profondeur de déchets radioactifs. Ce schéma a déjà été appliqué à d'autres problématiques telles que la résolution des équations d'Euler (Selmin, 1992) et de l'écoulement et du transport de polluant dans un milieu multiphasique (Letniowski *et al.*, 1991, Forsyth *et al.*, 1991, Unger *et al.*, 1995, Wu *et al.*, 1995 et Helming *et al.*, 1998). Les différents résultats obtenus par ces auteurs montrent que ce schéma est monotone et conservatif.

Cet article décrit les bases de l'application du schéma CVFE à la problématique du transport non réactif en milieu poreux. Le schéma CVFE est appliqué au COUPLEX1, exercice de modélisation proposé par l'ANDRA (ANDRA, 2001), pour mieux cerner les avantages et les limites de ce schéma.

2. Description du schéma CVFE

Le schéma CVFE résout la forme conservative de l'équation de transport. Le traitement du terme convectif se fait en introduisant la loi de Darcy et un décentrement (qui peut être amont ou variable). Les données à fournir pour la modélisation ne sont plus les vitesses mais le champ des charges et la distribution spatiale des perméabilités sur le domaine.

2.1. Discrétisation de l'équation de transport en milieu poreux

Modéliser le transport de masse en milieu poreux revient à résoudre l'équation de convection-dispersion suivante :

$$\frac{\partial(\theta RC)}{\partial t} + \text{div}\left(C\bar{U} - \overline{\overline{D}}\text{grad}(C)\right) = Q_s C_s + S$$

avec :

R : facteur de retard

C : concentration

θ : porosité

\bar{U} : vitesse de Darcy

\bar{D} : tenseur de dispersion

S : terme source chimique

$Q_s C_s$: débit et concentration entrantes

Après discrétisation temporelle, multiplication par la fonction test φ_i , intégration spatiale sur le domaine à modéliser et utilisation de la formule de Green, cette équation devient :

$$\int_{\Omega} \frac{\theta^{n+1} R^{n+1} C^{n+1} - \theta^n R^n C^n}{dt} \varphi_i d\Omega + \int_{\Gamma} \left(C \bar{U} - \bar{D} \text{grad}(C) \right) \cdot \bar{n} \varphi_i d\sigma - \int_{\Omega} \left(C \bar{U} - \bar{D} \text{grad}(C) \right) \cdot \text{grad}(\varphi_i) d\Omega = \int_{\Omega} (Q_s C_s + S) \varphi_i d\Omega$$

avec n et n+1, indices de temps.

Lorsque C apparaît sans indice, on suppose que C est semi-implicite :

$$C = \alpha C^{n+1} + (1 - \alpha) C^n$$

avec α , coefficient d'implication.

On utilisera l'approximation de Galerkin en éléments finis :

$$\theta R C \approx \sum_j \theta_j R_j C_j \varphi_j$$

Remarquons que cette hypothèse est très forte, l'approximation classique en éléments finis étant :

$$C \approx \sum_j C_j \varphi_j$$

$$\text{On aura alors : } \int_{\Omega} \theta R C \varphi_i d\Omega \approx \sum_j \theta_j R_j C_j \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i d\Omega$$

La matrice de masse est alors « mass-lumpée » :

$$\int_{\Omega} \varphi_i \varphi_j d\Omega \approx \delta_{ij} \int_{\Omega} \varphi_i d\Omega = V_i$$

avec V_i , volume du i^e volume de contrôle défini par le polygone centré sur le noeud i du maillage dual du maillage standard utilisé en éléments finis triangulaires.

La formulation variationnelle devient alors :

$$\frac{\theta_i^{n+1} R_i^{n+1} C_i^{n+1} - \theta_i^n R_i^n C_i^n}{dt} V_i + \int_{\Gamma} \left(C\bar{U} - \overline{\overline{Dgrad(C)}} \right) \cdot \bar{n} \varphi_i d\sigma - \int_{\Omega} \left(C\bar{U} - \overline{\overline{Dgrad(C)}} \right) \cdot \overline{\overline{grad(\varphi_i)}} d\Omega = \int_{\Omega} (Q_s C_s + S) \varphi_i d\Omega$$

2.1.1. Le terme dispersif

D'après l'approximation de C classique selon les fonctions linéaires de bases, le terme de dispersion s'écrit :

$$Diff = \sum_j C_j \int_{\Omega} \overline{\overline{Dgrad(\varphi_j)}} \cdot \overline{\overline{grad(\varphi_i)}} d\Omega$$

En utilisant, $\sum_j C_j \overline{\overline{grad(\varphi_j)}} = 0$ on obtient :

$$Diff = \sum_j (C_j - C_i) \int_{\Omega} \overline{\overline{Dgrad(\varphi_j)}} \cdot \overline{\overline{grad(\varphi_i)}} d\Omega = \sum_{j \in \text{voisin}(i)} (C_j - C_i) \gamma_{ij}$$

avec $\text{voisin}(i)$ représentant tous les nœuds voisins du nœud i dans le maillage et :

$$\gamma_{ij} = \int_{\Omega} \overline{\overline{Dgrad(\varphi_j)}} \cdot \overline{\overline{grad(\varphi_i)}} d\Omega$$

Cette matrice étant symétrique, le flux dispersif sera localement conservatif.

2.1.2. Le terme convectif

La principale différence entre le schéma CVFE et le schéma SUPG réside dans la manière de calculer le terme convectif décrit ci-dessous :

$$Conv = \int_{\Omega} C\bar{U} \cdot \overline{\overline{grad(\varphi_i)}} d\Omega$$

On utilise la loi de Darcy : $\bar{U} = -\bar{K} \text{grad}(h) = -\sum_j h_j \bar{K} \text{grad}(\varphi_j)$

pour obtenir :

$$\text{Conv} = - \sum_{j \in \text{voisin}(i)} h_j \int_{\Omega} \bar{K} \text{grad}(\varphi_j) \cdot \text{grad}(\varphi_i) d\Omega$$

$$\text{Conv} = - \sum_{j \in \text{voisin}(i)} (h_j - h_i) \int_{\Omega} \bar{K} \text{grad}(\varphi_j) \cdot \text{grad}(\varphi_i) d\Omega$$

$$\text{Conv} \approx - \sum_{j \in \text{voisin}(i)} (h_j - h_i) C_{ij} \int_{\Omega} \bar{K} \text{grad}(\varphi_j) \cdot \text{grad}(\varphi_i) d\Omega = \sum_{j \in \text{voisin}(i)} (h_j - h_i) C_{ij} \gamma'_{ij}$$

On peut alors utiliser différentes pondérations spatiales entre les nœuds i et j : le décentrement peut être amont ou variable. Si on choisit le décentrement amont, C_{ij} et γ'_{ij} sont définis de la manière suivante :

$$C_{ij} = C_{ij \text{ ups}} = \beta_{ij} C_i + (1 - \beta_{ij}) C_j$$

et $\begin{cases} \text{si } (h_j - h_i) \gamma'_{ij} > 0 \text{ alors } \beta_{ij} = \beta \geq 0.5 \text{ ie. } i \text{ est le nœud amont} \\ \text{sin on } \beta_{ij} = 1 - \beta \end{cases}$

$$\gamma'_{ij} = \int_{\Omega} \bar{K} \text{grad}(\varphi_j) \cdot \text{grad}(\varphi_i) d\Omega$$

Par contre, si on choisit la méthode des limiteurs de flux, le décentrement est variable et C_{ij} est alors définie de la manière suivante :

$$C_{ij} = C_{ij \text{ ups}} + \sigma(r_{ij}) \left[\frac{C_{ij \text{ dwn}} - C_{ij \text{ ups}}}{2} \right]$$

avec $C_{ij \text{ dwn}}$, le nœud aval entre les nœuds i et j et r_{ij} , le tenseur représentant la fraction molaire suivante :

$$r_{ij} = \frac{C_i - C_{2up}}{C_j - C_i} \quad \text{si } i = \text{ups}(i, j)$$

$$= \frac{C_j - C_{2up}}{C_i - C_j} \quad \text{si } j = \text{ups}(i, j)$$

avec C_{2up} , le nœud situé à l'amont du point amont.

Le limiteur de flux $\sigma(r_{ij})$ est défini par (voir Unger *et al.*, 1995) :

$$\sigma(r_{ij}) = 0 \quad \text{si } r_{ij} \leq 0$$

$$= \frac{2r_{ij}}{1 + r_{ij}} \quad \text{si } r_{ij} > 0$$

Le décentrement variable peut provoquer de la dispersion numérique au voisinage du front de pollution. D'après Unger *et al.* (1995), l'utilisation de limiteurs de flux permet de réduire fortement cette dispersion grâce au coefficient r_{ij} . Ce coefficient permet en quelque sorte de détecter les variations brutales de concentrations entre le nœud amont et son propre nœud amont (2up) et de pondérer les concentrations entre les nœuds amont et aval dans les zones où le front de concentration est raide.

2.1.3. Les termes de bord

Le terme de bord peut être décomposé en trois termes selon le type de conditions aux limites : conditions de sortie libre, conditions de Neuman et conditions de Dirichlet :

$$\text{Bord} = \int_{\Gamma} \left(C\bar{U} - \overline{\overline{D}} \text{grad}(C) \right) \cdot \bar{n} \varphi_i d\sigma = \text{Bord}_{\text{libre}} + \text{Bord}_{\text{Neu}} + \text{Bord}_{\text{Dir}}$$

2.1.3.1. Sortie libre

Classiquement, on suppose que pour les frontières de ce type le flux dispersif est nul : $\overline{\overline{D}} \text{grad}(C) \cdot \bar{n} = 0$. Cette hypothèse permet d'aboutir à l'expression suivante :

$$\text{Bord}_{\text{libre}} = \int_{\Gamma_{\text{libre}}} C\bar{U} \cdot \bar{n} \varphi_i d\sigma$$

En utilisant la loi de Darcy : $\bar{U} = -\overline{\overline{K}} \nabla h$ et les notations définies par la figure 1, ce terme devient :

$$\text{Bord}_{\text{libre}} = - \int_{\Gamma_{i+}} C_i \bar{K}_{\Gamma_{i+}} \nabla h_i^+ \cdot \bar{n}_i^+ \phi_i d\sigma - \int_{\Gamma_{i-}} C_i \bar{K}_{\Gamma_{i-}} \nabla h_i^- \cdot \bar{n}_i^- \phi_i d\sigma$$

$$\text{Bord}_{\text{libre}} = -C_i \bar{K}_{\Gamma_{i+}} \nabla h_i^+ \cdot \bar{n}_i^+ \int_{\Gamma_{i+}} \phi_i d\sigma - C_i \bar{K}_{\Gamma_{i-}} \nabla h_i^- \cdot \bar{n}_i^- \int_{\Gamma_{i-}} \phi_i d\sigma$$

$$\text{Bord}_{\text{libre}} = -C_i \left(\bar{K}_{\Gamma_{i+}} \nabla h_i^+ \cdot \bar{n}_i^+ \frac{dl_i^+}{2} + \bar{K}_{\Gamma_{i-}} \nabla h_i^- \cdot \bar{n}_i^- \frac{dl_i^-}{2} \right)$$

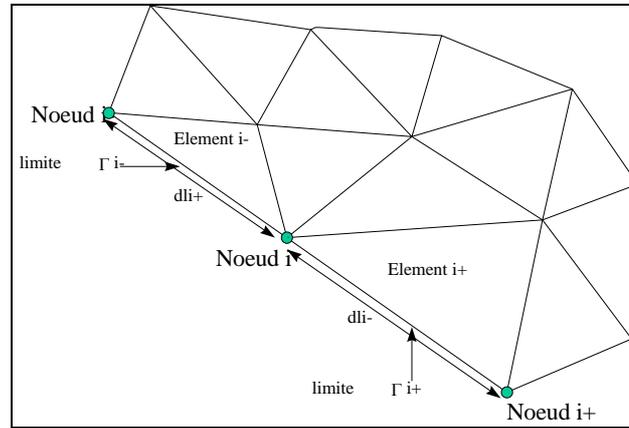


Figure 1. Exemple et notations utilisées autour du noeud i

Le terme total « sortie libre » $\sum_{i \in \Gamma_{\text{libre}}} \int_{\Gamma_{\text{libre}}} C_i \bar{U} \cdot \bar{n}_i \phi_i d\sigma$ peut alors être vu comme étant la somme suivante (si l'élément de bord k est délimité par les nœuds i_1 et i_2) :

$$\sum_{k \in \Gamma_{\text{libre}}} (C_{i_1} + C_{i_2}) \left[\bar{K}_k \nabla h_k \cdot \bar{n}_k \frac{dl_k}{2} \right]$$

Pour chaque élément de bord k , le gradient ∇h_k est considéré comme étant fonction des charges h_1 , h_2 et h_3 ainsi que des coordonnées spatiales des nœuds i_1 , i_2

et i_3 . Si nous supposons que la charge dépend des coordonnées spatiales :

$h = a_k X + b_k Y + c_k$, avec a_k, b_k et c_k constants pour l'élément k , le gradient $\bar{\nabla}h_k = \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}$ peut être estimé simplement en résolvant un système composé de trois équations.

2.3.1.2. Conditions de Dirichlet

Il est possible d'imposer « fortement » les concentrations. Le système ne sera pas résolu aux nœuds pour lesquels la concentration est imposée. Cette manière de procéder peut entraîner des erreurs numériques. Pour éviter ces erreurs, il est possible d'imposer les concentrations de manière « faible » en utilisant un flux équivalent :

$$\text{Bord}_{\text{Dir}} = \int_{\Gamma_{\text{Dir}}} \left(C_{\text{dir}} \bar{U} - \overline{\overline{D \text{grad}(C)}} \right) \cdot \bar{n} \varphi_i d\sigma$$

La première partie de ce terme peut être calculée de manière analogue à celle utilisée pour le calcul du terme convectif pour les frontières « sortie libre » :

$$\int_{\Gamma_{\text{Dir}}} C_{\text{dir}} \bar{U} \cdot \bar{n} \varphi_i d\sigma = -C_{\text{dir}} \left[\overline{\overline{K_{\Gamma i+}}} (\bar{\nabla}h_i^+ \cdot \bar{n}_i^+) \frac{dl_i^+}{2} + \overline{\overline{K_{\Gamma i-}}} (\bar{\nabla}h_i^- \cdot \bar{n}_i^-) \frac{dl_i^-}{2} \right]$$

Pour la seconde partie de ce terme, on procède à nouveau de manière analogue mais il s'agira cette fois-ci d'estimer les gradients de concentrations $\overline{\overline{\nabla C_i^+}}$ et $\overline{\overline{\nabla C_i^-}}$ qui sont constants par éléments et calculés comme $\overline{\overline{\nabla h_i^+}}$ et $\overline{\overline{\nabla h_i^-}}$.

On peut alors exprimer cette seconde partie comme étant :

$$- \int_{\Gamma_{\text{Dir}}} \overline{\overline{D \text{grad}(C)}} \cdot \bar{n} \varphi_i d\sigma = -\overline{\overline{D_i}} \left[\overline{\overline{\nabla C_i^+}} \cdot \bar{n}_i^+ \frac{dl_i^+}{2} + \overline{\overline{\nabla C_i^-}} \cdot \bar{n}_i^- \frac{dl_i^-}{2} \right]$$

3. Application à l'exercice COUPLEX 1

3.1. Description de l'exercice

Cet exercice permet de modéliser à grande échelle un stockage de déchets radioactifs en deux dimensions (ANDRA, 2001a). Il reprend les paramètres géologiques simplifiés du site de l'Est de l'ANDRA. Le colis de déchets radioactifs se situe à une profondeur de 450 m dans une couche d'argile. Celle-ci est entourée de deux couches calcaires (voir figure 2). Il s'agit de simuler la migration des radionucléides une fois les conteneurs corrodés.

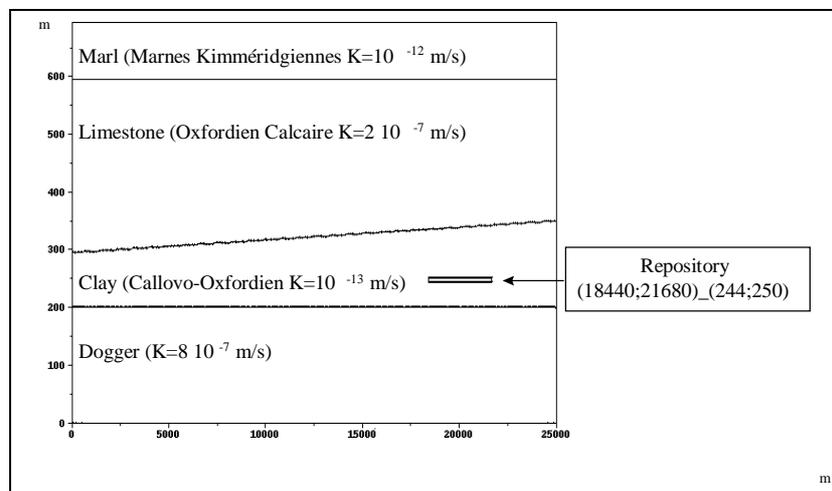


Figure 2. Géométrie du modèle et propriétés des couches géologiques

3.2. Calcul de l'hydrodynamique

La simulation des écoulements a été effectuée grâce au logiciel ESTEL2D qui repose sur la méthode des éléments finis, le solveur utilisé étant GMRES. Le maillage est composé de 100 744 éléments triangulaires et très dense au niveau du stockage. Les propriétés physiques présentent des contrastes importants entre zones. Comme le montre la figure 3, l'écoulement est orienté est-ouest dans le Dogger et l'Oxfordien Calcaire. La couche d'argile joue le rôle d'isolant hydraulique. Sa faible perméabilité ne permet pas le rééquilibrage des charges entre le Dogger et l'Oxfordien calcaire. On observe une inversion du gradient de charge au niveau de l'emplacement choisi pour le stockage. La vitesse de Darcy est très faible dans les argiles (au maximum $2.8 \cdot 10^{-6}$ m/an). Par conséquent, la migration des radionucléides y est régie essentiellement par la diffusion moléculaire.

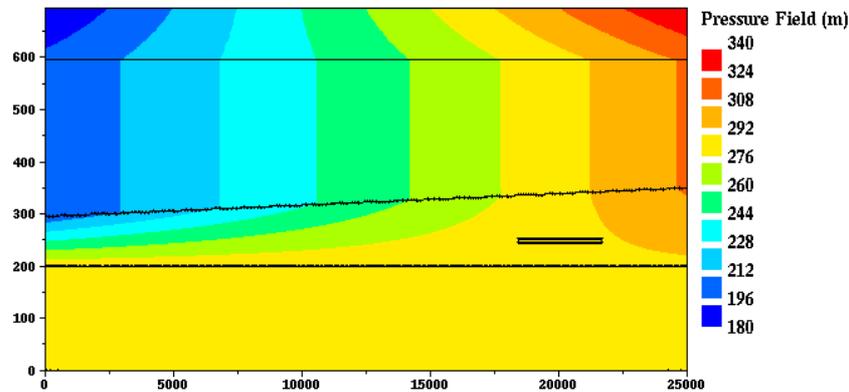


Figure 3. *Potentiel hydraulique calculé avec ESTEL2D*

3.3. Le transport des éléments radioactifs

On considère, sur une durée de 10^7 ans, l'iode 129 qui est un radionucléide très mobile (peu de sorption et pas de précipité). En plus des phénomènes de convection, diffusion et dispersion, on tient compte de la décroissance radioactive de cet élément dont la demi-vie est de $1.57 \cdot 10^7$ ans. Le terme correspondant est ajouté dans l'équation de transport décrite à la section 1.

Les principales difficultés de l'exercice sont, d'une part, l'échelle de temps très grande et, d'autre part, la grande variabilité des paramètres de diffusion, de dispersion et de porosité ainsi que les forts contrastes de vitesse. Les résultats obtenus sont présentés figure 4. Ces isoconcentrations sont similaires à celles obtenues par les différents participants à l'exercice COUPLEX (ANDRA, 2001b) qui ont essentiellement utilisés des codes de calculs basés sur des méthodes volumes finis ou éléments finis avec des schémas d'intégration en temps du second ordre.

Ces résultats ont été obtenus avec des pas de temps de 5 000 ans et un temps de calcul de l'ordre de douze heures et sont identiques, que la discrétisation en temps soit implicite ou explicite. En comparaison, avec le même pas de temps, la résolution avec la méthode SUPG provoque de nombreuses oscillations. De plus, on vérifie sur cet exemple que le schéma CVFE est bien monotone et que le bilan de masse est respecté, ce qui n'est pas le cas lors de l'utilisation de SUPG.

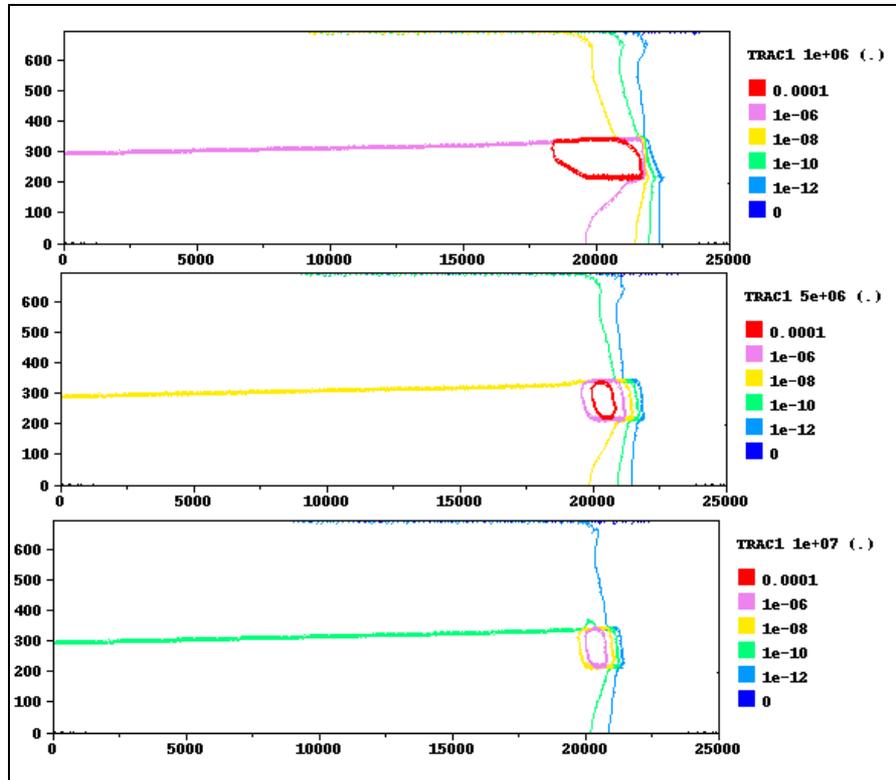


Figure 4. Isoconcentrations à 10^6 , 5.10^6 et 10^7 ans

4. Conclusion

Globalement, l'application de la méthode CVFE à l'exercice COUPLEX confirme que ce schéma apporte des réponses satisfaisantes aux problèmes majeurs que sont la monotonie et la conservation de la masse. La résolution de l'équation de transport sous sa forme conservative, le traitement du terme convectif tel qu'il est présenté dans ce travail ainsi que les modifications apportées au niveau des traitements des termes de bord permettent de mieux résoudre le système.

Il reste néanmoins des limites à l'utilisation du schéma CVFE. En effet, l'utilisation de ce schéma induit, dans certains cas, de la dispersion numérique due au décentrement amont utilisé dans le calcul du terme de convection. Les calculs montrent que l'option de décentrement variable ne permet pas de réduire cette dispersion. Enfin, l'utilisation du schéma CVFE pour la résolution du transport doit reposer sur une résolution préalable très précise de l'écoulement. Pour certaines simulations, les conditions aux limites Dirichlet pour l'écoulement, définies d'une

manière forte, conduisent à une mauvaise résolution du système qui provoque, par la suite, des phénomènes non physiques à ces limites lors du calcul du transport.

5. Bibliographie

ANDRA, *The Couplex Test Case*, 2001a.

ANDRA, *Couplex Workshop CEMRACS*, ANDRA DS/SR/01.0551, 2001b.

Dierssch H.J.G., « About the difference between the convective form and the divergence form of the transport equation », *Feflow white Papers*, WASY, 1998.

Helming R. and Hubert R., « Comparison of Galerkin-type discretization techniques for two-phase flow in heterogeneous porous media », *Advances in Water Ressources*, vol. 21, n° 8, 1998, p. 697-711.

Forsyth P.A., *A control volume finite element method for local mesh refinement*, SPE 18415, 1989.

Forsyth P.A., « A control volume finite element approach to NAPL groundwater contamination », *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, vol. 12, n° 5, 1991, p. 1029-1057.

Forsyth P.A., Wu Y.S. and Pruess K., « Robust numerical methods for saturated-unsaturated flow with dry initial conditions in heterogeneous media », *Advances in Water Ressources*, vol. 18, 1995, p. 25-38.

Forsyth PA, *Study of unsaturated zone flow and transport models of fractured tuff*, Report TR-108536, EPRI, Palo alto, CA, 1998.

Letniowski F.W. and Forsyth P.A., « A control volume finite element method for three-dimensional NAPL groundwater contamination » R., *International Journal for numerical methods in fluids*, vol. 13, 1991, p. 955-970.

Selmin V., « The node centered finite volume approach : bridge between finite differences and finite elements », *Comp. Meth. Appl. Mech. Engin.*, vol. 102, 1992, p. 107-138.

Sonier F. and Eymard R., *Mathematical and numerical properties of control volume finite element scheme for reservoir simulation*, SPE 27267, 1993.

Unger A.J.A., Forsyth P.A. and Sudiky E.A., « Variable spatial and temporal weighting schemes for use in multi-phase compositional problems », *Advances in Water Ressources*, vol. 19, n° 1, 1996, p. 1-27.

Wu Y.S., Forsyth P.A. and Jiang H., « A consistent approach for applying numerical boundary conditions for multiphase subsurface flow », *Journal of Contaminant Hydrology*, vol. 23, p. 157-184, 1996.