

Méthodes de Newton-Krylov pour le couplage transport chimie en milieu poreux

Laila AMIR ^{1,2} & Michel KERN ²

¹ ITASCA Consultants

² INRIA Rocquencourt

38^{ème} Congrès National d'Analyse Numérique
(1 juin 2006)

1 Introduction

2 Chimie et Transport

- Rappel des lois chimiques
- Convection-diffusion

3 Couplage

- Formulation mathématique
- Algorithme numérique
- Résultats

4 Conclusion

1 Introduction

2 Chimie et Transport

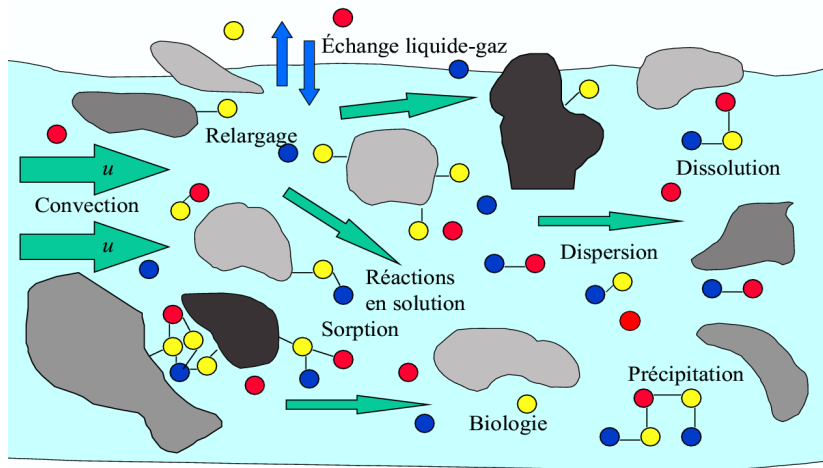
- Rappel des lois chimiques
- Convection-diffusion

3 Couplage

- Formulation mathématique
- Algorithme numérique
- Résultats

4 Conclusion

Phénomènes chimiques et hydrogéologiques



- 1 Introduction
- 2 Chimie et Transport
 - Rappel des lois chimiques
 - Convection-diffusion
- 3 Couplage
 - Formulation mathématique
 - Algorithme numérique
 - Résultats
- 4 Conclusion

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, s_j composants sorbés, x_i espèces secondaires aqueuses, y_i espèces secondaires fixées.

Système d'équations non-linéaires

Lois d'action de masse

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

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

Conservation des espèces

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

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

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

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

Équation de diffusion–convection

$$\omega \frac{\partial c}{\partial t} - \mathbf{D} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \mathbf{u} \frac{\partial c}{\partial x} = f \quad \text{pour } 0 < x < L$$

$$c = c_d \text{ sur } \Gamma_D \quad \text{et} \quad -\mathbf{D} \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \text{ sur } \Gamma_N \quad + \text{C. Initiales.}$$

Méthode de différences finies espace-temps

$$\omega \frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} - \mathbf{D} \frac{c_{j+1}^{n+\theta} - 2c_j^{n+\theta} + c_{j-1}^{n+\theta}}{\Delta x^2} + \mathbf{u} \frac{c_j^{n+\theta} - c_{j-1}^{n+\theta}}{\Delta x} = f_j^{n+\theta}$$

$$c^{n+\theta} = \theta c^{n+1} + (1 - \theta) c^n \quad \text{schéma de Crank Nicolson } (\theta = 1/2)$$

- Schéma implicite
- Inconditionnellement stable
- Décentré en amont

- 1 Introduction
- 2 Chimie et Transport
 - Rappel des lois chimiques
 - Convection-diffusion
- 3 Couplage**
 - Formulation mathématique
 - Algorithmes numériques
 - Résultats
- 4 Conclusion

Le système couplé

Advection-diffusion pour l'espèce mobile p : $L(p) = -\mathbf{D} \frac{\partial^2 p}{\partial^2 x} + \mathbf{u} \frac{\partial p}{\partial x}$

Transport pour chaque espèce et composant

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

Le transport couplé à la chimie s'écrit :

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

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



$$f(C^{n+1}, T^{n+1}, F^{n+1}) = 0$$

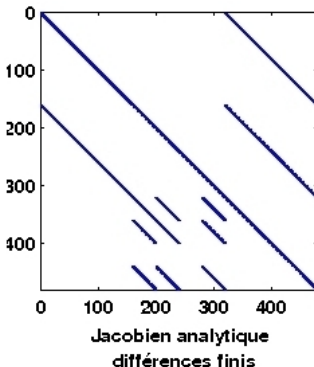
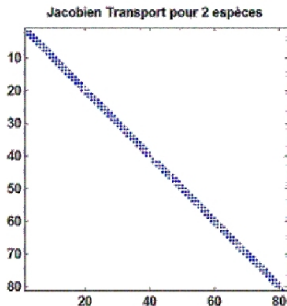
$$\text{avec } f(C, T, F) = \begin{pmatrix} F + (I + \Delta t L)C - C^n - F^n \\ T - C - F \\ F - \Psi(T) \end{pmatrix}.$$

- Système non linéaire
- Résolution par Newton ?
- Newton exact ou inexact ?

Structure de la matrice Jacobienne

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

$\Psi'(T)$ jacobien de la chimie



- Stockage et calcul du jacobien couteux, matrice de taille $3N_X N_C * 3N_X N_C$

Méthode de Newton Krylov

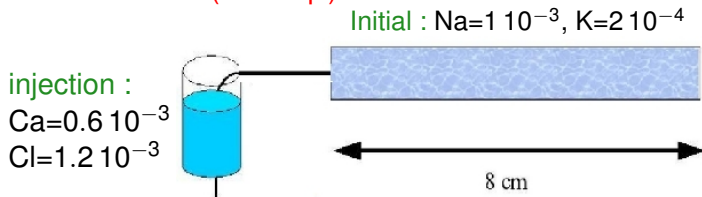
- Résoudre le système linéaire par une méthode **itérative**
- GMRES, TFQMR et BiCGStab demandent seulement le produit jacobien-vecteur (calcul analytique et par différences finies)
- **Newton inexact**
 - **Approximation** de la direction de Newton d :

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

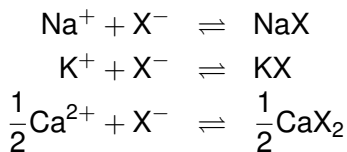
- Choix de η ?
 - * Garder la convergence quadratique (locale)
 - * Inutilité de la résolution précise du système linéaire
- C.T. Kelley, Eisenstat et Walker
 - $\eta = \gamma \|f(x_k)\|^2 / \|f(x_{k-1})\|^2 \quad (\gamma=0.9)$

Présentation d'un cas test

Echanges d'ions : ex11 (Phreeqc)

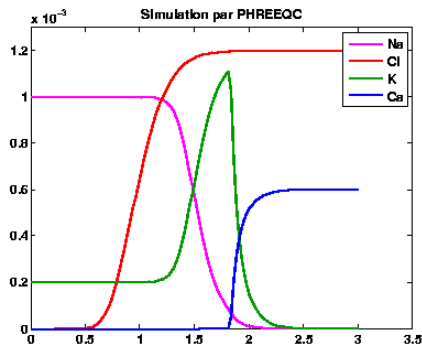
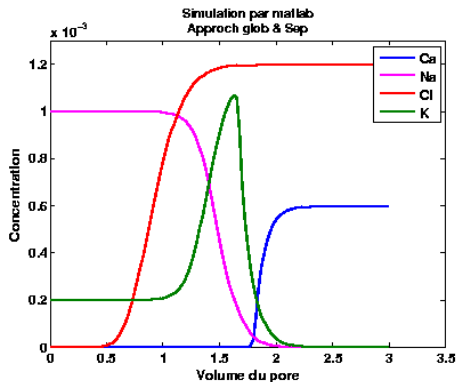


Les réactions chimiques :



3 composantes aqueuses et 1 composante sorbante

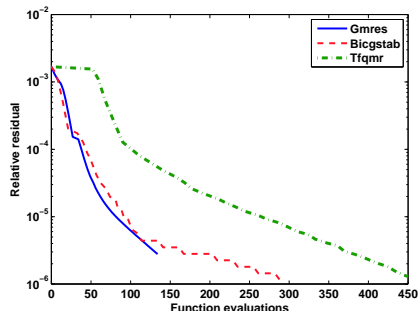
Résultats numériques



- Les résultats obtenus par les 2 approches sont similaires au résultat de référence (PhreeQC)

Test d'efficacité des solveurs linéaires

- Le Solveur GMRES appelle moins de fois la fonction objective que les autres solveurs
- Bicgstab et TFQMR demandent deux produits matrice Jacobienne vecteur par itération linéaire.



- 1 Introduction
- 2 Chimie et Transport
 - Rappel des lois chimiques
 - Convection-diffusion
- 3 Couplage
 - Formulation mathématique
 - Algorithmes numériques
 - Résultats
- 4 Conclusion

- Etude du transport réactif 1D
 - Couplage par une approche global
 - Validation sur un exemple
 - Comparaison des résultats
-
- Etude du transport réactif en 2D et 3D
 - Prise en compte de phénomène de précipitation
 - Newton-Krylov préconditionnée