

# **Couplage de codes pour le transfert de fluides et de solutés**

**dans les milieux géologiques :  
une approche par composants logiciels**

**Le projet Hydrogrid**

Michel Kern

*INRIA Rocquencourt*

## Buts du projet

- **Simuler** l'écoulement et le transport de polluants dans le sous-sol ;
- Prendre en compte des **couplages** (chimie – transport, écoulement – transport, fracture – milieu poreux, maillages non raccordés) ;
- **Paralléliser** les codes individuels, et mettre en oeuvre sur une **grille** (plusieurs grappes de PC) à l'aide de **Padico<sup>TM</sup>** (Grid-RMI) ;
- Étudier les liens entre couplage **numérique** et couplage **informatique**.

## Les équipes

**Aladin** Rennes, méthodes numériques, parallélisation (J. Erhel, B. Philippe, H. Hotteit)

**Estime** Rocquencourt, méthodes numériques, milieux poreux, décomposition domaine (J. Jaffré, M. Kern, V. Martin)

**Paris** Rennes, conception de grilles, HPC (C. Perez)

**Ascii** Rennes, parallélisation, réseaux (H. Leroy)

**TPC** Géosciences Univ. Rennes, modélisation hydrogéologie, réseaux de fractures (Ph. Davy, J.-R. de Dreuzy)

**HTMP** IMFS Univ. Strasbourg, modélisation hydrogéologie, méthodes numériques (Ph. Ackerer, H. Hotteit)

## Modèles physiques (1)

**Transport réactif** Couplage chimie – transport  
dissolution chimique **augmente** perméabilité,  
transport **contrôle** quelles réactions chimique ont lieu ;

**Intrusion d'eau salée** Couplage écoulement – transport  
écoulement **conditionne** diffusion sel vers eau douce,  
concentration en sel **détermine** viscosité eau.

Écoulement, transport : EDP ; Chimie : EDO ou EDA

## Modèles physiques (2)

**Milieus fracturés** Couplage milieu 3D – fracture 2D ou fracture 2D – réseau 3D  
fractures structures sans épaisseur, augmentent la perméabilité  
**voies préférentielles** pour le transport.

**Stockage profond de déchets nucléaires** Couplages numériques champ proche :  
physique **détaillée**, **petites** échelles spatio-temporelles ;  
champ lointain : physique **simplifiée**, **grandes** échelles spatio-temporelles.

## Couplage multi-physique Écoulement avec contraste de densité

EDP couplées, **non-linéaires** (pression, vitesse)  $\leftrightarrow$  (concentration).

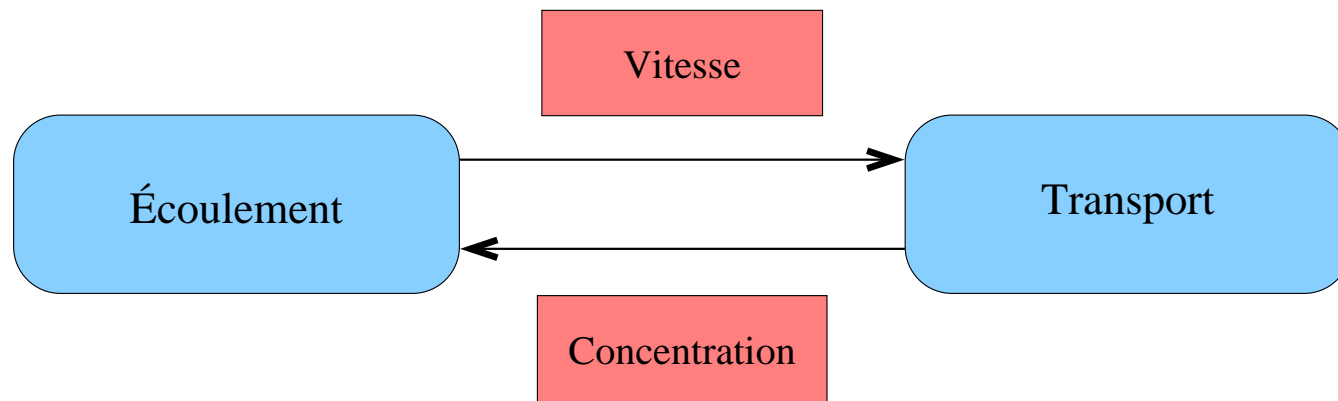
Physique **complexe** : instabilités, recirculations.

Écoulement : **diffusion**. Implicite, calcul précis de la vitesse (EF mixtes hybrides).

Transport : **convection** – **diffusion**. Explicite, résolution des fronts, conservation masse (EF discontinus).

Parallélisation des codes : **sous-domaines**.

## Couplage « algébrique »



Décomposition d'opérateur : garder des codes **transport** et **écoulement** **séparés**.

Peut-on **combiner** **décomposition d'opérateur** et une **méthode implicite globale** ?

## Couplage multi-physique Transport réactif

Transport d'espèces réagissant entre elles et avec la roche.

Équilibre chimique instantané : couplage **EDP**–**équation algébrique**.

3 méthodes de couplage :

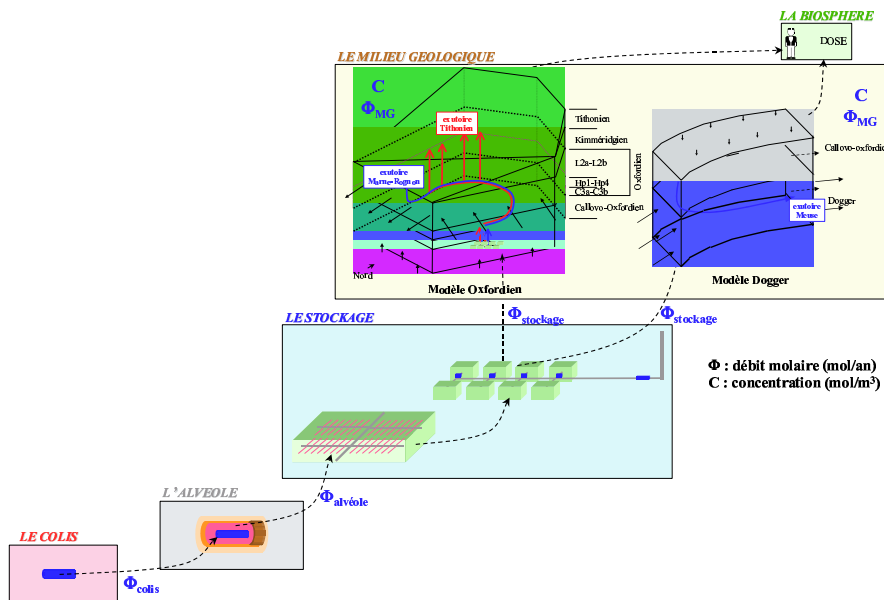
**Pas-à-pas** transport (linéaire), puis chimie (non-linéaire) :  $N_{\text{espèces}}$  éq. transport,  
 $N_{\text{points}}$  syst. algébriques (+ : simple, – : peu précis) ;

**Itératif** idem, jusqu'à convergence (compromis usuel) ;

**Globale** système non-linéaire,  $N_{\text{espèces}} N_{\text{points}}$  (+ : précis, – : coûteux).

Couplage global par **Newton-Krylov** : pas de Jacobien.

## Stockage de déchets nucléaires



- Horizon temporel : **million d'années**, échelles spatiales **métrique à kilométrique** ;
- Forts **contrastes** de coefficients : traiter chaque sous-domaine avec un maillage et un pas de temps **adapté** ;

## Couplage « géométrique »

- Décomposition de domaine **sans recouvrement** ;
- Maillages **non raccordés** ;
- Conditions de transmission de type **Robin** (Després, Nataf).
- Couplage **implicite** global.

Validation : écoulement autour d'un stockage (V. Martin).

Sur chaque sous-domaine :

- Modèle physique, méthode numérique peuvent être **différentes** ;
- Parallélisme type SMP.

## Couplage multi-numérique Milieu fracturé

- Réseau complexe de fractures
- Détermination des lois hydrauliques ;
- Grand nombre de fractures ( $10^4$ ), distribution statistique ;

Nouvelle méthode à deux échelles :

- Écoulement dans une fracture ;
- Écoulement dans un réseau de lien.

Couplage entre les niveaux.

## Stratégie générale

- Chaque phénomène simulé par un code **spécifique** : pas de modification, environnement propre ;
- Schémas numériques appropriés : **conservation** invariants physiques, respect échelles ;
- Chaque code devient un **composant** logiciel : interface bien définie (maintenance des codes) ;
- Couplage numérique : pas-à-pas, itératif, global ? **convergence** – **interdépendance**
- Couplage **informatique** : Corba sur une grille ? **indépendance** du réseau, Paco++ (ACI Grid RMI), **passage** à l'échelle.

## Composants logiciels parallèles

Partie **explicite** : **décomposition de domaine** (MPI, Metis)

Systemes linéaires

- Méthode **multi-frontale** (Mumps), interface avec **explicite** ?
- Décomposition de domaine, **préconditionneur** ?

Un code sous **OpenMP**.

Chimie : parallélisme embarrassant, **équilibrage** ??

Une code = un composant

Définition des **interfaces** pour les couplages.

## Courtier d'objets haute performance

- Courtiers existant basés sur TCP/IP, grilles utilisent protocoles variés (haute performance);
- **Passage à l'échelle** : transmission d'objets « volumineux » : matrice, maillage (redistribution).

ACI Grid-RMI : **Paco++**. Définition d'objets parallèles ( encapsulation des codes ), communication **interne** via MPI, **couplage** via Corba.

Montrer que des couplages par composants peuvent être **efficace**.

## Grille

Basé sur exécuteur **PadicoTM** (ACI Grid-RMI, C. Perez).

Permet d'utiliser Corba ou Java RMI sur réseaux **rapides** (Myrinet, SCI)

Cible : **grappes** de PC (Rennes, Grenoble, Rocquencourt ?), via VTHD

