

Description globale des outils du PGT

Note Technique TN-151008-JVDL
J. van der Lee

HYTEC

HYTEC est une plate-forme de simulation modulaire et évolutive, composée d'un module hydrodynamique (R2D2), d'un module de réaction (CHESS) ainsi que d'un coupleur. Le couplage repose sur une utilisation intensive du Message Passing Interface (MPI), ce qui permet, entre autres, de préserver l'intégrité des modules. L'approche est facilement évolutive et le couplage d'autres modules est actuellement envisagé (un module d'écoulement en rivière, par exemple). Le module CHESS, décrits avec un peu plus de détails ci-après, est également disponible indépendamment de HYTEC.

La version actuelle de HYTEC est en mesure de proposer une liste de possibilités intéressantes:

- **Choix géométrique et paramétrage hydrologique**

HYTEC permet une grande maîtrise de la géométrie du système (domaine global, zones spécifiques, ...) via l'introduction des *zones hydrodynamiques*. Une zone correspond à un objet géométrique de forme quelconque, p.ex. des rectangles, triangles, sphères, polygones, ... ainsi qu'un ensemble de paramètres hydrodynamiques, comme la porosité, la perméabilité, par exemple. La notion des zones nous donne une grande liberté pour introduire l'hétérogénéité du domaine.

- **Configuration géochimique**

Analogue à l'approche pour les paramètres hydrodynamiques du systèmes, la géochimie est également introduite à l'aide d'objets, dits *unités géochimiques*. Chaque unité peut être attachée à une zone hydrodynamique ou à une condition aux limites quelconque. La syntaxe utilisée pour la définition des paramètres géochimiques est identique à celle utilisée par CHESS, ce qui permet une *copier-coller* à partir d'essais en statique.

- **Conditions aux limites**

Le choix de conditions aux limites proposé par HYTEC est complet:

- conditions aux limites sur des sous-parties du bord du domaine:

conditions de Riemann ou Dirichlet pour l'écoulement et le transport, voire conditions mixtes, p.ex. gradient nul, flux chimique *variable* imposé, flux chimique *variable* imposé par l'écoulement, vitesse nulle ou encore la vitesse de Darcy imposée, ruissellement;

- conditions régionalisées, sur des sous-parties du domaine:

p.ex. terme source local (et solution associée), charge hydraulique imposée *variable*, concentration imposée *variable*.

Par analogie avec les zones hydrodynamiques et les unités chimiques, les conditions aux limites sont déclarées comme objets nommés, puis attachées à un bord du domaine. Les conditions peuvent changer au cours du temps (voir ci-dessous).

- **Variabilité de paramètres**

Certains paramètres du système peuvent être changés au cours du calcul, à des temps prédéfinis. Ainsi, la chimie d'une condition aux limites, la porosité, le coefficient de diffusion..., peut changer. Cette option, qui s'applique à un grand nombre de paramètres et de conditions aux limites nous permet en effet de représenter un événement ponctuel quelconque, comme la rupture d'un conteneur, par exemple.

- **Analyse et visualisation des résultats**

Les variables que l'on souhaite suivre en fonction du temps sont présélectionnées par l'utilisateur. Outre les sélections classiques (par exemple pH, Eh, concentration de certaines espèces, etc.), HYTEC permet également la sélection des flux chimiques traversant le bord d'une zone hydrodynamique.

- **Gestion du pas de temps**

La gestion du pas de temps dans HYTEC est automatique, tout en restant entièrement paramétrable par l'utilisateur. En règle général, HYTEC cherche à augmenter le pas de temps si possible, dans le but d'optimiser le temps total nécessaire pour la simulation. Le pas de temps est toutefois limité par les contraintes imposées par le module hydrodynamique et la raideur du couplage transport-chimie.

- **Porosité variable et rétroaction**

La porosité peut changer lorsque certains minéraux précipitent ou se dissolvent au cours du temps. HYTEC prend en compte l'effet du changement de la porosité sur les paramètres hydrodynamiques du système, dont notamment la perméabilité, la diffusivité et la vitesse de transport, ceci en milieu saturé et non-saturé.

- **Gradient thermique**

L'utilisateur peut imposer un gradient thermique, voire une condition thermique aux limites. La température est ensuite utilisée par la chimie via les constantes thermodynamiques ainsi que par l'hydrologie (coefficient de diffusion et viscosité).

- **Saturé et non-saturé**

HYTEC s'applique en zones saturée et non-saturée. Le couplage chimie-transport tient compte du degré de saturation ce qui permet, entre autres, de faire varier la porosité (et donc la perméabilité relative) en fonction de la précipitation et dissolution des phases dans la zone non-saturée.

Outres ces possibilités, l'utilisateur dispose d'un utilitaire de visualisation des résultats, HYPE. Cet outil est indispensable pour l'analyse des résultats mais fournit également une aide à la construction du fichier d'entrée et au lancement du code. Il affiche le maillage créé par le module de transport avec les zones hydrodynamiques et les conditions aux limites. HYPE peut être utilisé au cours de la simulation, ce qui permet d'intervenir sans attendre la fin des calculs si on observe des résultats inattendus.

HYTEC est optimisé et peut fonctionner sur un ordinateur de bureau quelconque, à condition de disposer d'un OS Unix ou Linux. Cela étant dit, il s'agit également d'un logiciel massivement parallélisé, ce qui permet de réaliser des calculs lourds dans un temps CPU raisonnable --- à condition de disposer d'une machine dédiée, comme un cluster de PC par

exemple.

CHESS

Le module CHESS simule les réactions chimiques et microbiologiques au sein de chaque maille du modèle. CHESS repose sur un moteur de résolution puissant et hautement optimisé pour les calculs couplés. Les calculs chimiques font appel à une base de données thermodynamiques étendue: elle permet d'effectuer les calculs à l'état d'équilibre. En outre, CHESS dispose d'une approche cinétique généralisée, applicable à tous types de réaction.

CHESS propose un grand nombre d'options chimiques qui permettent de l'appliquer aux problèmes scientifiques posés aujourd'hui, dont principalement :

- la spéciation et l'oxydo-réduction en phase aqueuse,
- les réactions micro-biologiques couplées à la spéciation,
- la dissolution et la précipitation de phases solides,
- la sorption, dont l'échange ionique (différents modèles) et la complexation de surface,
- la prise en compte d'effets électrostatiques (trois modèles),
- l'état chimique à équilibre, cinétique ou mixte,
- la désintégration radioactive et filiation
- la disponibilité de différents modèles de correction d'activité, dont le SIT pour les solutions concentrées.

R2D2

Le module R2D2 décrit l'écoulement de phases liquides et le transport d'éléments en milieu poreux ou fracturé, en 1, 2 ou 3 dimensions. Dans l'optique du couplage, un schéma de discrétisation spatiale en volumes finis a été choisi. Ce schéma est particulièrement bien adapté aux systèmes réactifs. La souplesse d'un maillage du type Voronoï utilisé par défaut par R2D2 permet de mailler des domaines irréguliers, éventuellement très complexes. Bien que R2D2 soit disponible comme modèle indépendant de HYTEC, il n'est pas distribué en tant que tel dans le cadre du PGT ou ailleurs.