

RÉSUMÉ

Titre : Ajout de capacités de grille non structurée 2D/3D au code MIN3P-THCm
Rapport n° : NWMO-TR-2022-10
Auteurs : Danyang Su¹, K. Ulrich Mayer¹ et Kerry MacQuarrie²
Société : ¹Département des sciences de la terre, des océans et de l’atmosphère, Université de Colombie-Britannique
²Département de génie civil, Université du Nouveau-Brunswick
Date : Mars 2022

Résumé

La simulation de l’écoulement et du transport réactif dans les bassins sédimentaires et dans la roche cristalline nécessite souvent la discrétisation de domaines complexes. Dans les formations de roche sédimentaire, par exemple, la géométrie complexe est due à la présence de multiples couches géologiques, qui sont généralement inclinées et/ou pincées. Les réactions biogéochimiques ont tendance à se produire aux interfaces entre les couches, ce qui implique que les gradients régissant les échanges de fluides et de solutés sont souvent importants près des interfaces, ce qui nécessite une discrétisation spatiale raffinée pour ces régions. La discrétisation spatiale 2D et 3D de tels domaines est difficile et peut être fastidieuse lorsqu’on utilise une grille structurée limitée à des mailles rectangulaires. Une grille non structurée, qui peut plus facilement reproduire des géométries irrégulières, est avantageuse dans ces situations. La possibilité d’utiliser une grille non structurée offre non seulement une plus grande flexibilité pour la discrétisation de domaines complexes, mais évite également le moyennage des propriétés des matériaux aux interfaces. Ce rapport décrit l’approche utilisée pour doter MIN3P-THCm V1.1 (Su et al. 2017), une version parallèle d’un code de transport réactif générique à base de processus, conçu pour l’étude du transport réactif multicomposant dans des milieux à saturation variable, de la capacité d’utiliser une grille non structurée 2D/3D. La version parallélisée à grille non structurée, MIN3P-THCm V2.0.0, emploie des méthodes de volume de contrôle basées sur les vertex ainsi que différents types de volumes de contrôle et de méthodes de reconstruction du gradient. MIN3P-THCm V2.0 est conçu pour tout domaine de simulation 2D employant des cellules triangulaires et quadrilatérales pour la construction du maillage, et tout domaine de simulation 3D employant des cellules tétraédriques, hexaédriques et prismatiques. MIN3P-THCM V2.0 fournit également de nouveaux modules pour aider l’utilisateur à réaliser des simulations. Ces modules permettent la génération intégrée d’un maillage 2D/3D raffiné localement, la conversion d’un maillage à partir d’un logiciel externe tel que GMS, ainsi que le traitement préalable et postérieur à partir de fichiers vtk.

Le rapport est structuré comme suit. Le premier chapitre présente les méthodes de grille non structurée utilisées dans le contexte d’une simulation du transport réactif. Le deuxième chapitre présente les principales équations qui régissent l’écoulement et le transport réactif. Dans le troisième chapitre, ces équations sont discrétisées. Différentes méthodes de reconstruction du gradient, d’approximation multipoint du flux et de pondération en amont sont présentées. La méthode de parallélisation hybride MPI-

OpenMP est brièvement décrite. Dans le quatrième chapitre, la nouvelle méthode d'approximation multipoint du flux utilisée pour résoudre les problèmes de fronts d'humectation marqués dans des milieux à saturation variable est analysée. Dans le cinquième chapitre, l'applicabilité du code aux problèmes généraux d'écoulement et de transport réactif est démontrée. Dans le sixième chapitre, la performance parallèle de MIN3P-THCm V2.0 est analysée. Dans le septième chapitre, MIN3P-THCm V2.0 est vérifié sur la base des données référence de MIN3P-THCm V1.0. Dans le huitième chapitre, des exemples supplémentaires de vérification sont fournis, en utilisant en particulier des grilles non structurées en comparaison avec d'autres données de référence existantes de MIN3P-THCm V1.0. Enfin, le neuvième chapitre traite des améliorations apportées au code et tire des conclusions.