
Volumes finis appliqués à des calculs de sûreté

CHRISTOPHE LE POTIER CEA / MTMS

GDR Momas, le 21 Décembre

Plan

- Contexte
- Petite bibliographie
- Principe de la méthode
- Application au SEN
- A propos de stabilité
- Conclusion

Contexte

Écoulement

$$\operatorname{div} \vec{U} = 0$$

$$\vec{U} = -\overline{\overline{K}} \vec{\nabla} h$$

- \vec{U} , écoulement
- $\overline{\overline{K}}$, tenseur de perméabilité
- h , charge hydraulique

Contexte

Transport

$$\omega R \frac{\partial C}{\partial t} + \omega R \lambda C + \vec{\nabla} \cdot C \vec{U} = \vec{\nabla} \cdot \overline{\overline{D}} \vec{\nabla} C + S \quad (1)$$

avec :

- ω , la porosité
- R , le coefficient de retard du RN dans le milieu
- C , la concentration en RN
- λ , la constante de décroissance radioactive du RN
- S , le terme source
- $\overline{\overline{D}}$, le tenseur de dispersion-diffusion

Contexte

- Jusqu'en 2001, ces deux modèles étaient résolus à l'aide d'éléments finis mixtes hybrides (EFMH).
- En 2001, problème de monotonie et de stabilité pour des calculs de sûreté avec CASTEM-EFMH.
- Diagnostic : module convectif à changer ou améliorer, développer une méthode monotone sur des maillages réguliers pour le terme diffusif-dispersif.
- Choix : Méthode VF centrée sur les mailles pour le terme diffusif-dispersif et le terme convectif

Bibliographie (opérateur de diffusion)

- EFMH avec Mass Lumping. Méthode proposée pour les premiers calculs type Couplex. Schéma VF si le tenseur est diagonal et le maillage peu déformé.
- Schéma développé par R. Eymard, T. Gallouët, R. Herbin. Très précis et simple si le maillage est Delaunay Voronoï. Tenseur anisotrope traité récemment.
- Méthode Diamant (F. Dubois, A. Beccantini). Précise, assez robuste mais avec tenseur diagonal.

Bibliographie (opérateur de diffusion)

- VF-Porflow. Peu de littérature sur les méthodes numériques. Prise en compte des termes extradiagonaux depuis peu.
- VF avec une formulation de Petrov Galerkin (cf F. Dubois). On propose un lien simple entre les EFM et les VF. C'est en cours d'étude (Stage de DEA, S. Borel et M. Tekitek).

Bibliographie (opérateur de diffusion)

- MPFA (Multi Point Flux Approximation)
Référence : Aavatsmark I., Barkve T., Boe O., Mannseth (1998). On traite des tenseurs hétérogènes anisotropes sur tout type de maille avec une bonne précision en 2D. Elle a été également développée à l'IFP (Equipe I. Faille).
- Généralisation de la méthode MPFA en 3D sur des hexaèdres, prismes, tétraèdres et pyramides.

Principe de la méthode

Discrétisation du terme diffusif-dispersif

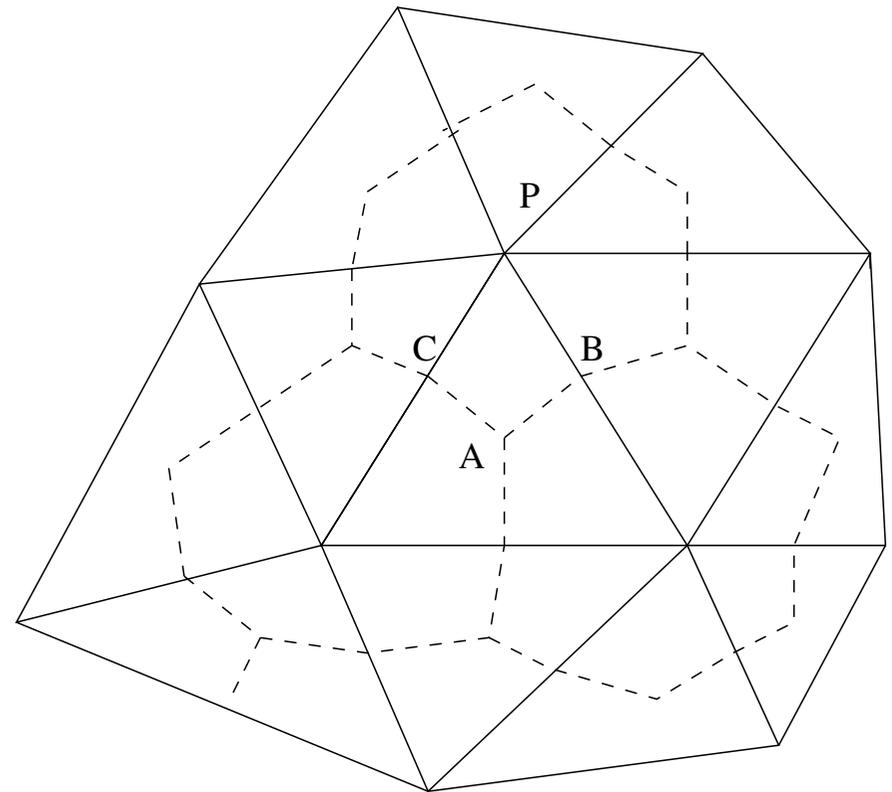
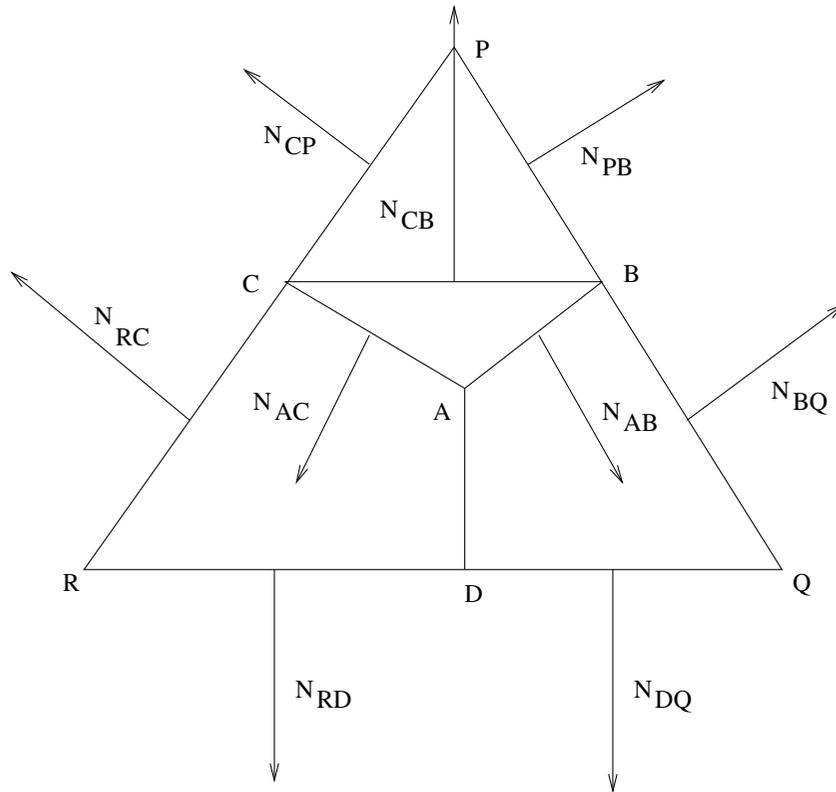
$$\begin{cases} \vec{q} = \overline{\overline{D}} \vec{\nabla} C \\ \omega \frac{\partial C}{\partial t} = \text{div} \vec{q} \end{cases} \quad (2)$$

Condition initiale :

$$C(x, 0) = C(x)$$

Conditions aux limites de type Dirichlet, Neumann ou mixtes.

Principe de la méthode



- S le triangle (P,Q,R).
- T le triangle (A,B,C) et SF_T sa surface.

Principe de la méthode

Hypothèses :

- C est affine sur T .
- \vec{q} est constant sur T .
- D est constant sur S .

C_A , C_B et C_C sont les valeurs de la concentration C aux points A , B et C et \vec{q}_P la valeur de \vec{q} sur T .

Principe de la méthode

Intégration sur T

Le gradient s'écrit :

$$\int_T D^{-1} \vec{q} d\Omega = \int_T \vec{\nabla} C d\Omega = \int_{\partial T} C \vec{n} d\Gamma$$

$$D^{-1} \vec{q}_P = \frac{1}{2SF_T} (C_A - C_C) \vec{n}_{AB} + \frac{1}{2SF_T} (C_A - C_B) \vec{n}_{AC} \quad (3)$$

Les flux f_{PB} et f_{PC} à travers les interfaces PB et PC vérifient :

$$\begin{cases} f_{PB} = \vec{q}_P \cdot \vec{n}_{PB} \\ f_{PC} = \vec{q}_P \cdot \vec{n}_{PC} \end{cases} \quad (4)$$

Principe de la méthode

- Elimination des degrés de liberté supplémentaires (C_B et C_C) à l'aide de conditions de continuité de flux sur chaque arête autour du noeud P . (Petite matrice à inverser localement).
- Reconstruction de tous les flux autour de P , Q et R

Intégration sur S

Le schéma s'écrit :

$$SF_S \omega_S \frac{\partial C_A}{\partial t} = f_{PB} + f_{BQ} + f_{QD} + f_{DR} + f_{RC} + f_{CP}$$

Principe de la méthode

Mise sous forme matricielle

$$\begin{bmatrix} M^{-1} & {}^t DIV & -{}^t B \\ -DIV & \frac{SF\omega}{\Delta t} & 0 \\ B & 0 & I_{front_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q \\ C \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ F \\ 0 \end{bmatrix}$$

Q flux, C la concentration, λ inconnue auxiliaire.

B matrice de continuité des flux, DIV matrice de la divergence, M constituée de petites matrices MAT_P (2,2) du type :

$$MAT_P = \begin{pmatrix} \frac{\vec{n}_{PB} D \vec{n}_{AB}}{2SF_T} & \frac{\vec{n}_{PB} D \vec{n}_{AC}}{2SF_T} \\ \frac{\vec{n}_{CP} D \vec{n}_{AB}}{2SF_T} & \frac{\vec{n}_{CP} D \vec{n}_{AC}}{2SF_T} \end{pmatrix}$$

Formalisme matriciel très proche de celui des E.F.M.H.

Propriétés de l'algorithme

- Le schéma est linéaire exact (triangles, quadrangles, hexaèdres, prismes, tétraèdres et pyramides).
- Il est conservatif.
- Equivalent aux VF5 pour des maillages orthogonaux et des tenseurs diagonaux .
- Matrice globale en général non symétrique sur des maillages non structurés (MAT_P n'est en général pas symétrique)
- Il peut être instable avec des maillages très déformés et des tenseurs très anisotropes (la positivité de MAT_P n'est pas assurée)

Principe de la méthode

Couplage avec le terme convectif

- 3 options disponibles
- Schéma décentré classique. Il est monotone et d'ordre 1.
- Schéma centré. Il est d'ordre 2 et en général non monotone.
- Schéma intermédiaire. On choisit un schéma qui dépend du *Péclet* de maille de manière à ce qu'il reste monotone (pour un phénomène diffusif dominant ou convectif dominant) (cf. R. Eymard (Couplex))

Principe de la méthode

Couplage avec le terme convectif

- Couplage naturel car les degrés de libertés de l'opérateur convectif sont également au centre des mailles.
- Remarque : pas de splitting d'opérateur. On peut sommer les deux matrices issues de la discrétisation de chaque opérateur.

Solution analytique

En 3D, on résout l'équation suivante sur $\Omega =]0, 1[\times]0, 1[\times]0, 1[$

$$\operatorname{div}(D\vec{\nabla}C - \vec{u}C) = 0$$

avec

$$D = \begin{pmatrix} 1+x & z & y \\ z & 1+y & x \\ y & x & 1+z \end{pmatrix}$$

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} 1+x+y+z \\ 1+x+y+z \\ 1+x+y+z \end{pmatrix}$$

Solution analytique

Conditions aux limites

a) $C = e^{x+y+z}$ sur Γ_1

b) $D\vec{\nabla}C \cdot \vec{n} = e^{x+y}(1+x+y+z)(\vec{x} \cdot \vec{n} + \vec{y} \cdot \vec{n} + \vec{z} \cdot \vec{n})$ sur Γ_2

c) $D\vec{\nabla}C \cdot \vec{n} = \lambda C$ avec

$\lambda = (1+x+y+z)(\vec{x} \cdot \vec{n} + \vec{y} \cdot \vec{n} + \vec{z} \cdot \vec{n})$ sur Γ_3

Γ_1 , Γ_2 et Γ_3 désignent des parties de la frontière Γ de Ω telles que $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$

La solution analytique de ce problème est donc :

$$C = e^{x+y+z}$$

Solution analytique

Maillage constitué de prismes, pyramides et tétraèdres.

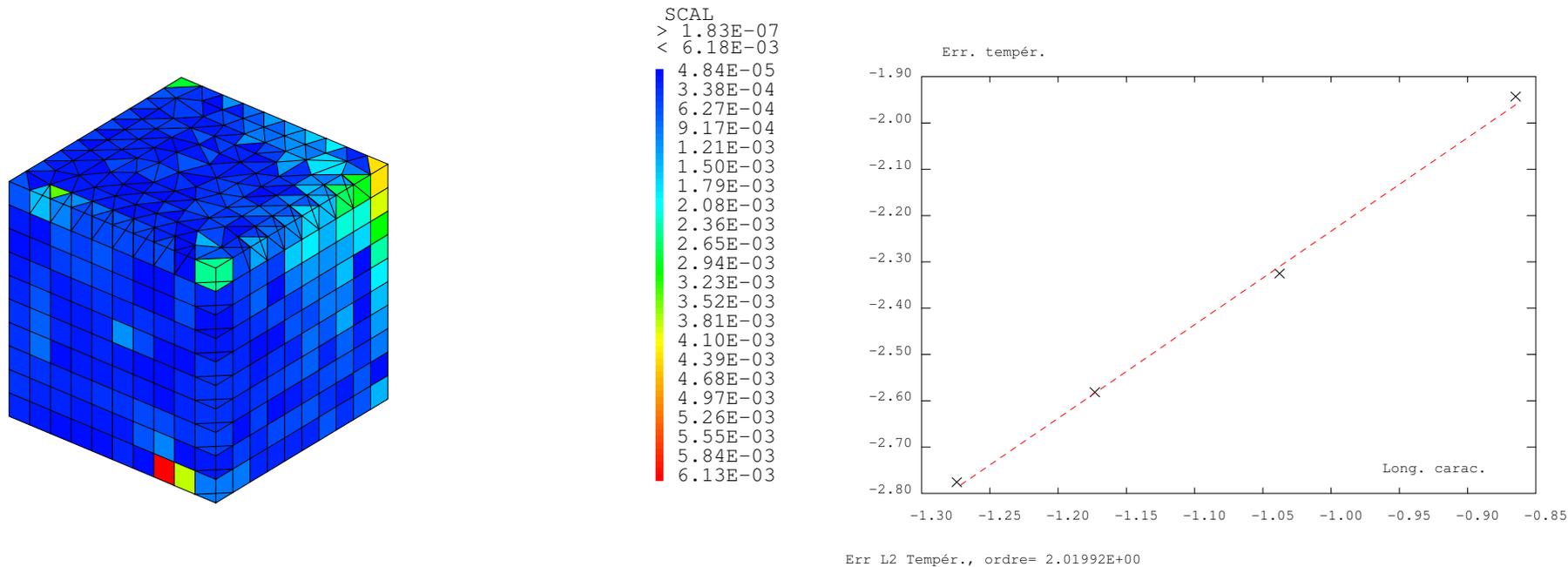


Figure 1: Erreur relative et ordre du schéma

Calcul de sûreté (SEN)

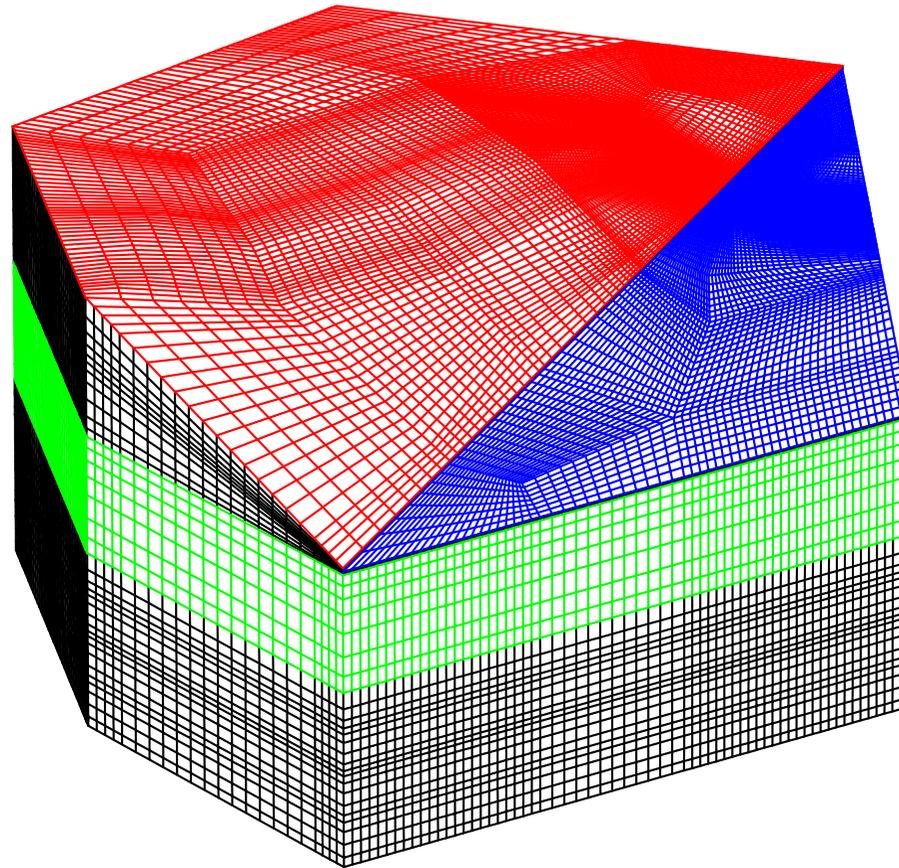


Figure 2: Maillage du site Est constitué de 480000 hexaèdres

Calcul de sûreté (SEN)

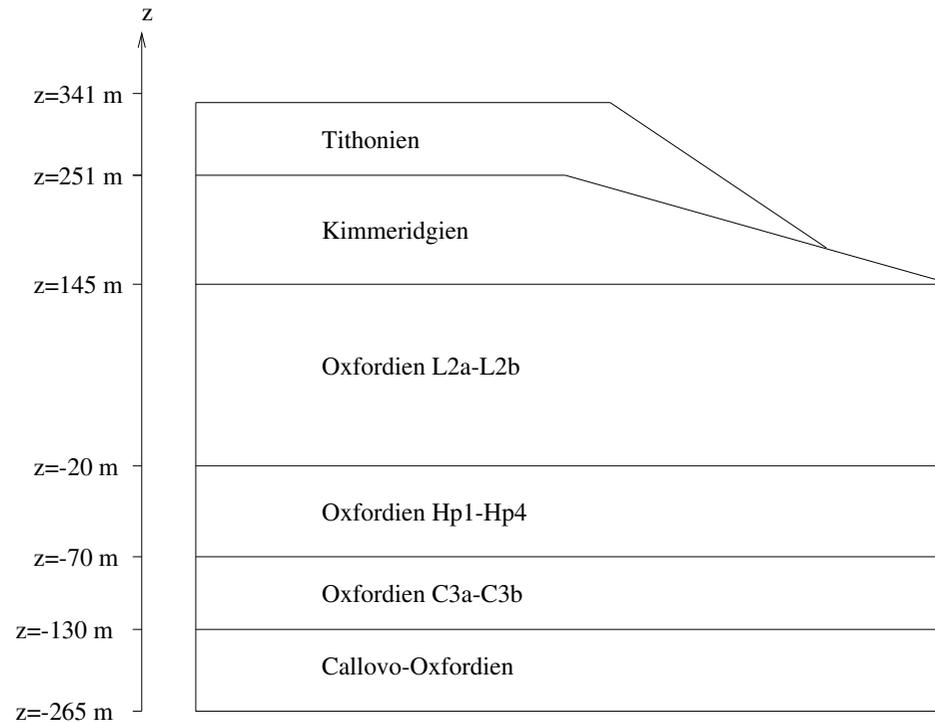


Figure 3: Coupe verticale du modèle géologique

Calcul de sûreté (SEN)

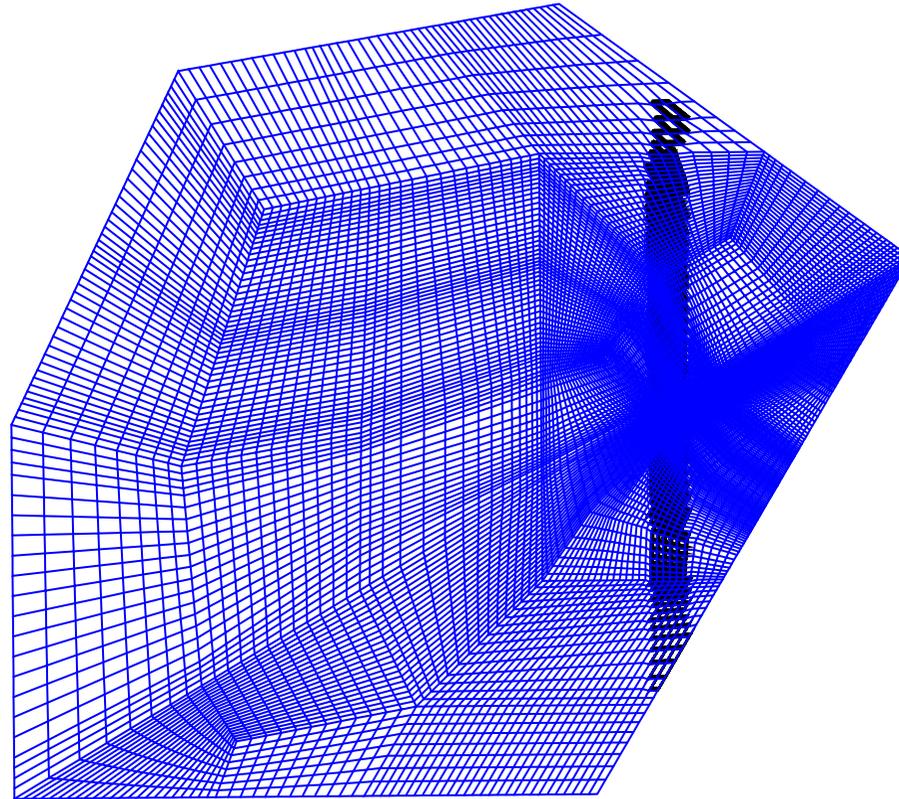


Figure 4: Coupe horizontale dans le plan du stockage

Calcul de sûreté (SEN)

- Objectif : traiter un calcul de sûreté sur un maillage de 480000 mailles fourni par l'ANDRA.
- Les hexaèdres sont très déformés loin de la source et réguliers près du stockage.

Hydraulique

- Pas de problèmes particuliers. Calculs avec VF et EFMH. Résultats tout à fait comparables.
- Pour les VF : solveur BICGSTAB, préconditionneur ILU0, la matrice globale étant non symétrique. Pour les EFMH (BICGSTAB ou gradient conjugué)
- Remarque : la matrice globale obtenue semble mieux conditionnée en VF qu'en EFMH

Calcul de sûreté (SEN)

Transport

- Question 1 : est ce que le schéma VF va être stable avec des hexaèdres très déformés et des tenseurs anisotropes?
- Question 2 : comment se comporte t-il en ce qui concerne la monotonie?
- Calcul effectué sur 1 million d'années avec des pas de temps variant de 100 ans à 5000 ans
- Solveur itératif BICGSTAB, préconditionneur ILU0

Calcul de sûreté (SEN)

- Réponse question 1 : oui
- Réponse question 2 : légères valeurs négatives
- Mêmes chose pour Porflow.
- Solutions : maillages réguliers (ou appliquer approche E. Burman, A. Ern aux V.F.?)
- Validation des résultats : comparaison à des historiques de concentrations obtenues par Porflow
- Temps de calcul : quelques heures sur une machine à 2GO de mémoire vive et à fréquence de 3Ghz.

Calcul de sûreté (SEN)

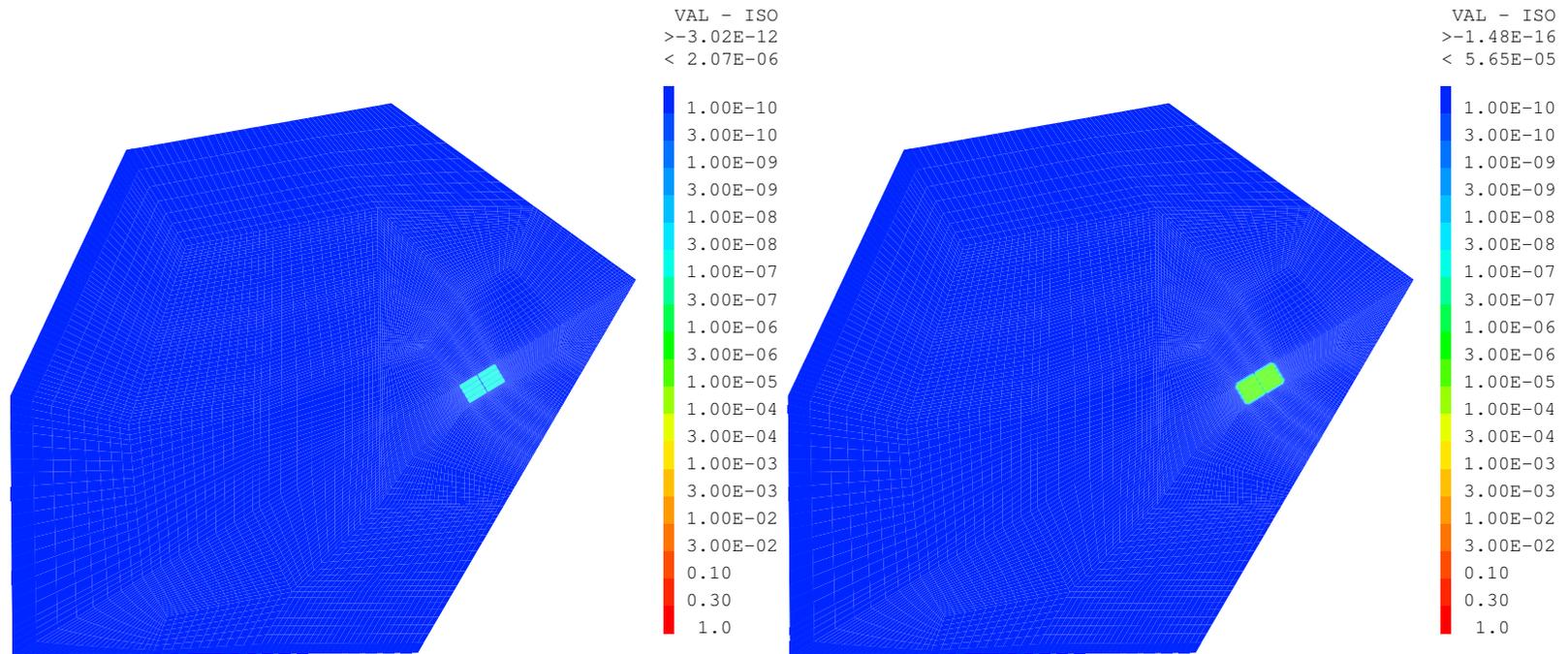


Figure 5: Isovaleurs de concentration dans le plan du stockage à $t=11\,000$ ans et $t=50\,000$ ans

Calcul de sûreté (SEN)

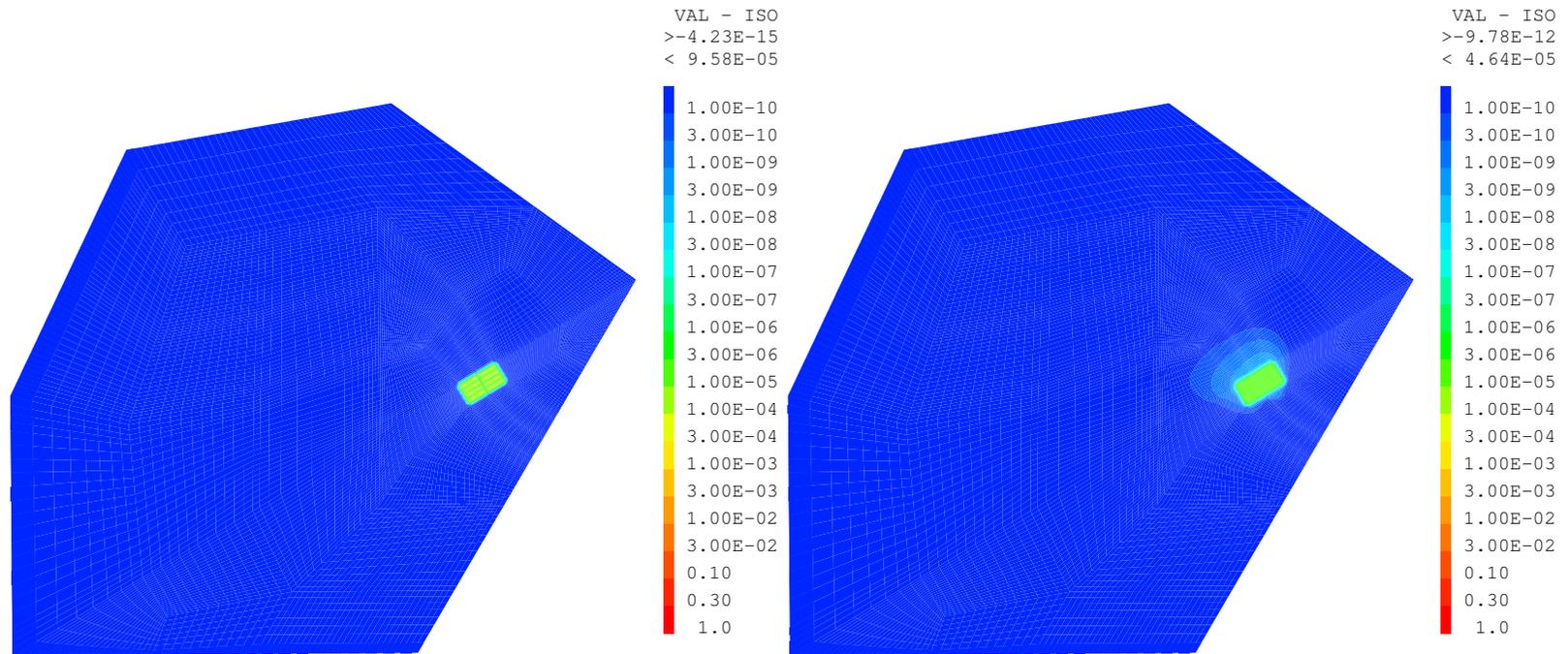


Figure 6: Isovaleurs de concentration dans le plan du stockage à $t=100\,000$ ans et $300\,000$ ans

Calcul de sûreté (SEN)

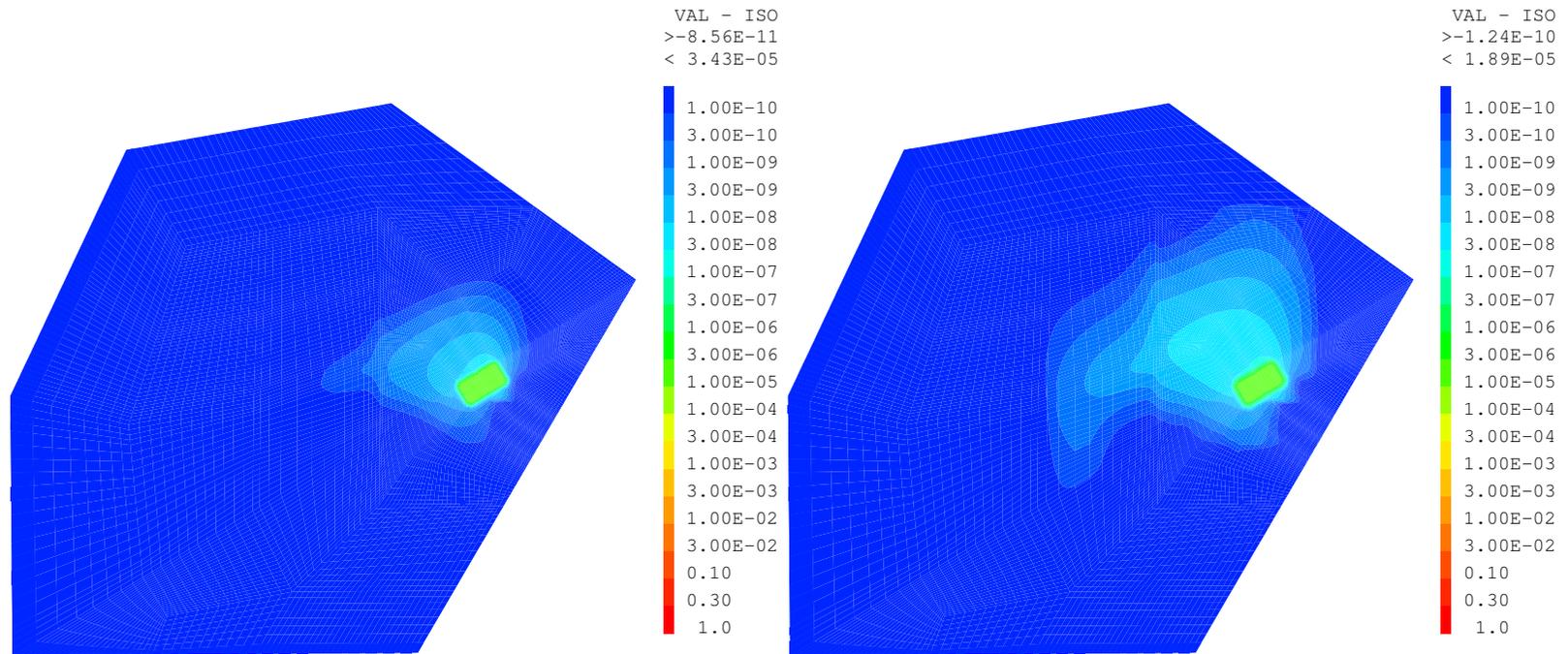


Figure 7: Isovaleurs de concentration dans le plan du stockage à $t=500\,000$ ans et $1\,000\,000$ ans

A propos de stabilité

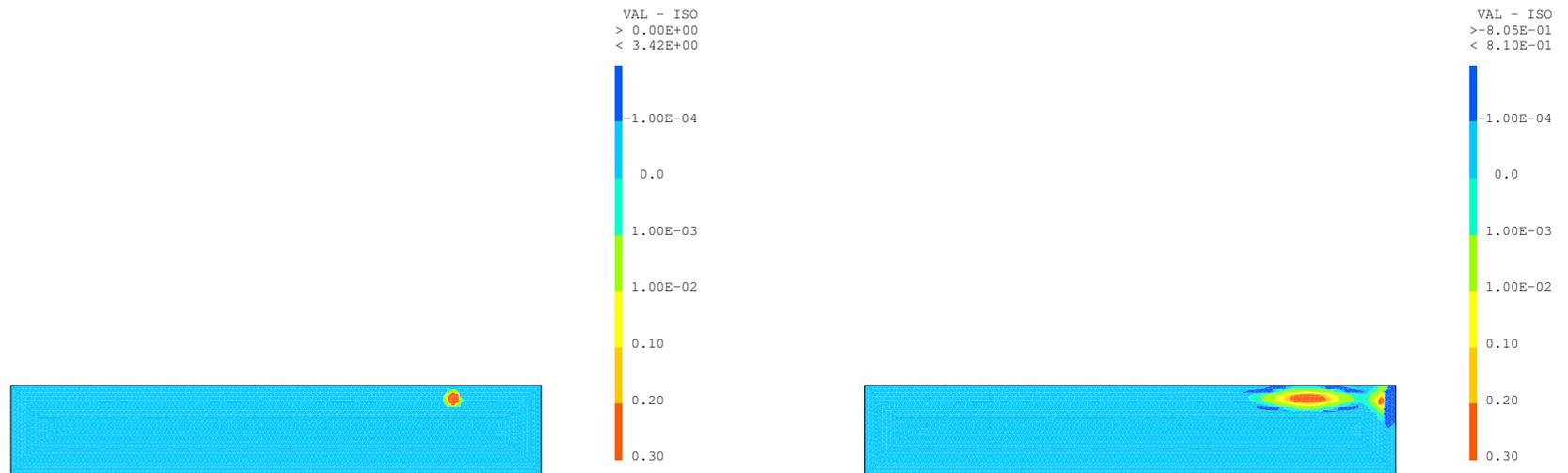
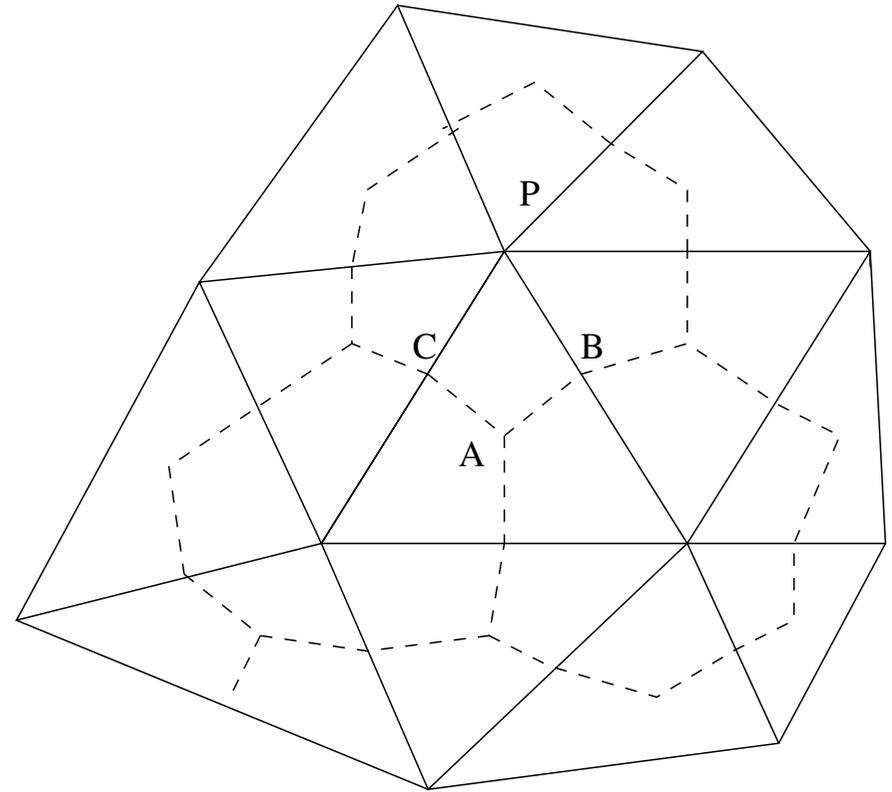
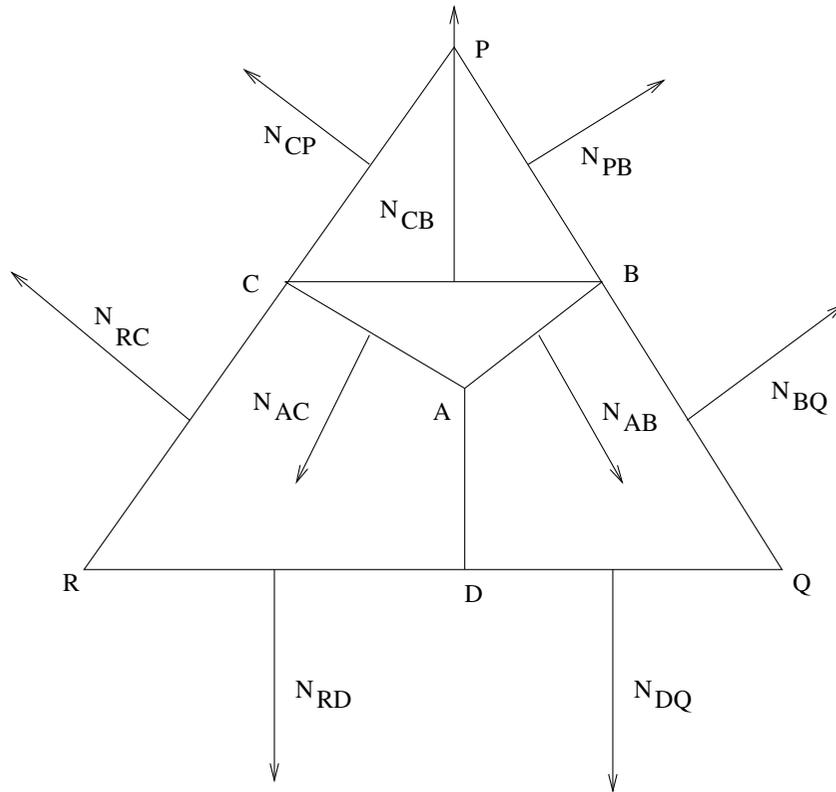


Figure 8: Isovaleurs de la concentration à $t = 0s$ et $t = 3200s$ avec les VF(MPFA)

A propos de stabilité



- Δ_P le quadrangle (A, B, P, C) et SF_P sa surface.

A propos de stabilité

- C est constante sur le triangle S .
- \vec{q} est constant sur Δ_P .
- D est constant sur S .
- C est constante sur PB et CP .

Nous notons C_A (respectivement C_{B_1} et C_{C_1}) les valeurs de la concentration C au point A (respectivement sur les segments PB et CP), \vec{q}_P la valeur de \vec{q} sur Δ_P .

A propos de stabilité

Intégration sur Δ_P

$$\int_{\Delta_P} D^{-1} \vec{q} d\Omega = \int_{\Delta_P} \vec{\nabla} C d\Omega = \int_{\partial\Delta_P} C \vec{n} d\Gamma$$

En utilisant les hypothèses sur C , nous obtenons :

$$D^{-1} \vec{q}_P = \frac{1}{SF_P} (C_{C_1} - C_A) \vec{n}_{PB} + \frac{1}{SF_P} (C_{B_1} - C_A) \vec{n}_{CP} \quad (5)$$

Nous déduisons donc les flux f_{PB} et f_{CP} à travers les interfaces PB et CP qui vérifient :

$$f_{PB} = \vec{q}_P \cdot \vec{n}_{PB} \text{ et } f_{CP} = \vec{q}_P \cdot \vec{n}_{CP} \quad (6)$$

A propos de stabilité

Mise sous forme matricielle

$$\begin{bmatrix} M^{-1} & {}^t DIV & -{}^t B \\ -DIV & \frac{SF\omega}{\Delta t} & 0 \\ B & 0 & I_{front_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q \\ C \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ F \\ 0 \end{bmatrix}$$

Q flux, C la concentration, λ inconnue auxiliaire.

B matrice de continuité des flux, DIV matrice de la divergence, M constituée de petites matrices MAT_p (2,2) symétriques positives du type :

$$MAT_P = \begin{pmatrix} \frac{\vec{n}_{PB} D \vec{n}_{PB}}{SF_P} & \frac{\vec{n}_{PB} D \vec{n}_{CP}}{SF_P} \\ \frac{\vec{n}_{PB} D \vec{n}_{CP}}{SF_P} & \frac{\vec{n}_{CP} D \vec{n}_{CP}}{SF_P} \end{pmatrix}$$

A propos de stabilité

- Il est conservatif.
- Equivalent aux VF5 pour des maillages orthogonaux et des tenseurs diagonaux.
- Matrice globale symétrique définie positive.
- Le schéma est stable quelque soit le maillage et quelque soit le tenseur.
- Il n'est plus linéaire exact.

A propos de stabilité

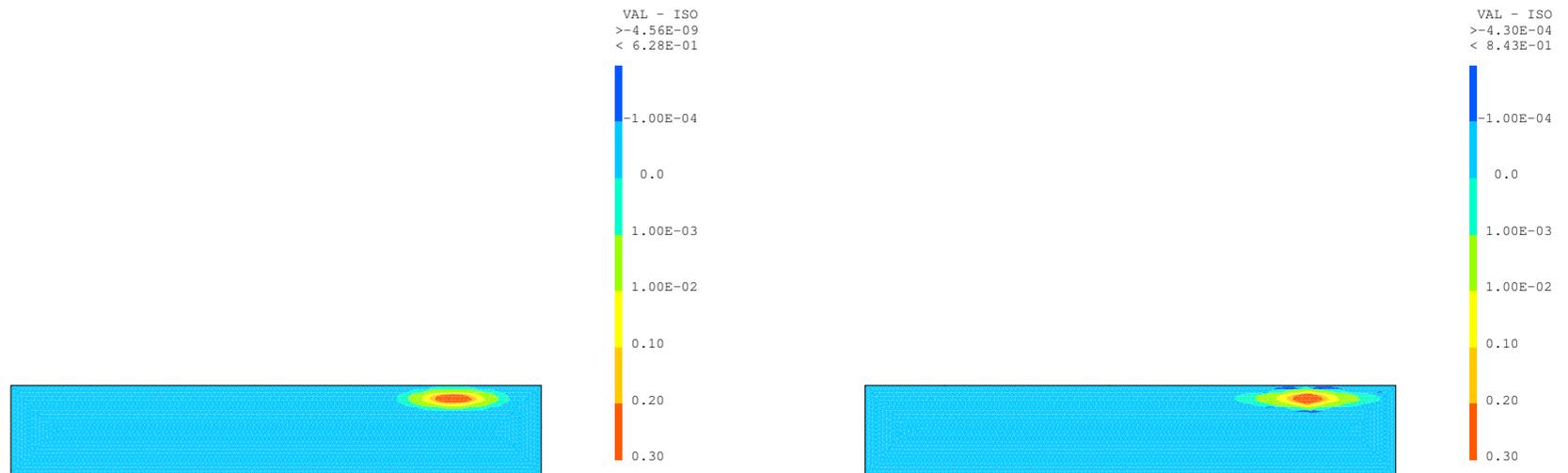


Figure 9: Isovaleurs de la concentration à $t = 3200s$ avec les VFNEW et les E.F.M.H.

A propos de stabilité

On résout l'équation suivante sur $\Omega =]0, 1[\times]0, 1[$

$$\operatorname{div}(\overline{\overline{D}} \vec{\nabla} C) = S$$

avec

$$\overline{\overline{D}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix} \text{ et } S = -(1 + \epsilon)\pi^2 \sin[\pi x) \sin(\pi y) \quad (7)$$

Conditions aux limites

Nous choisissons $C = 0$ sur Γ . La solution analytique de ces 3 problèmes ($\epsilon = 1, 10^{-2},$ ou 10^{-4}) est donc :

$$C = \sin[\pi x) \sin(\pi y)$$

A propos de stabilité

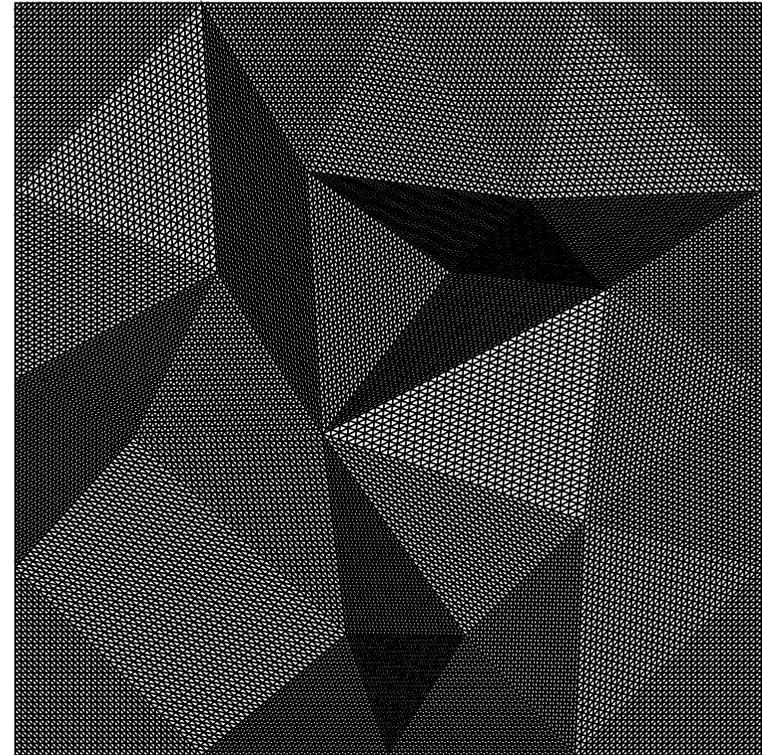
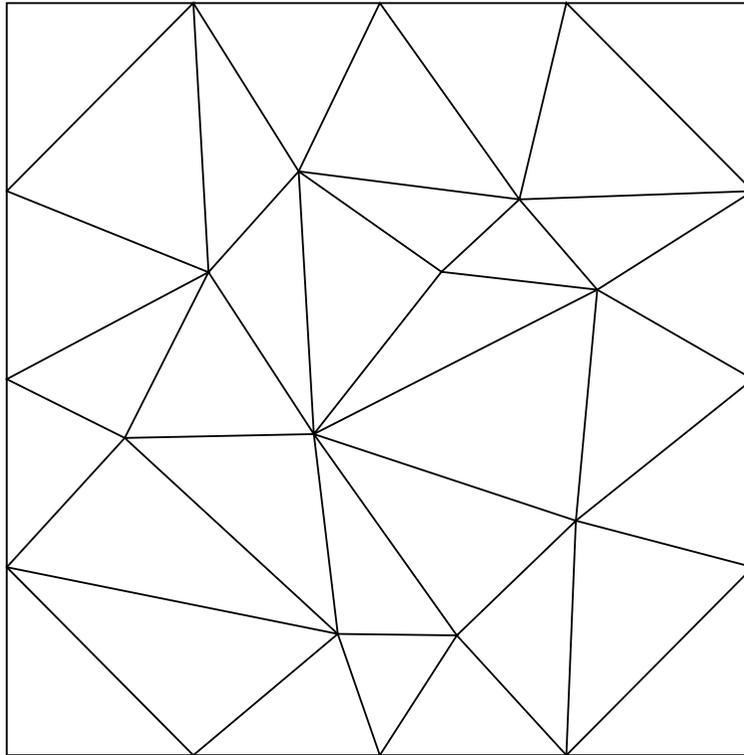


Figure 10: Maillage grossier (34 triangles) et maillage fin (environ 35000 triangles)

A propos de stabilité

	<i>EFMH</i>	<i>VF(MPFA)</i>	<i>VFNEW</i>
<i>Problème 1</i>	$1,61 \cdot 10^{-5}$	$2,72 \cdot 10^{-5}$	$4,26 \cdot 10^{-5}$
<i>Problème 2</i>	$1,59 \cdot 10^{-3}$	<i>non convergence</i>	$8,49 \cdot 10^{-5}$
<i>Problème 3</i>	$1,41 \cdot 10^{-1}$	<i>non convergence</i>	$1,02 \cdot 10^{-3}$

Tableau des erreurs relatives pour les 3 discrétisations sur le maillage fin

A propos de stabilité

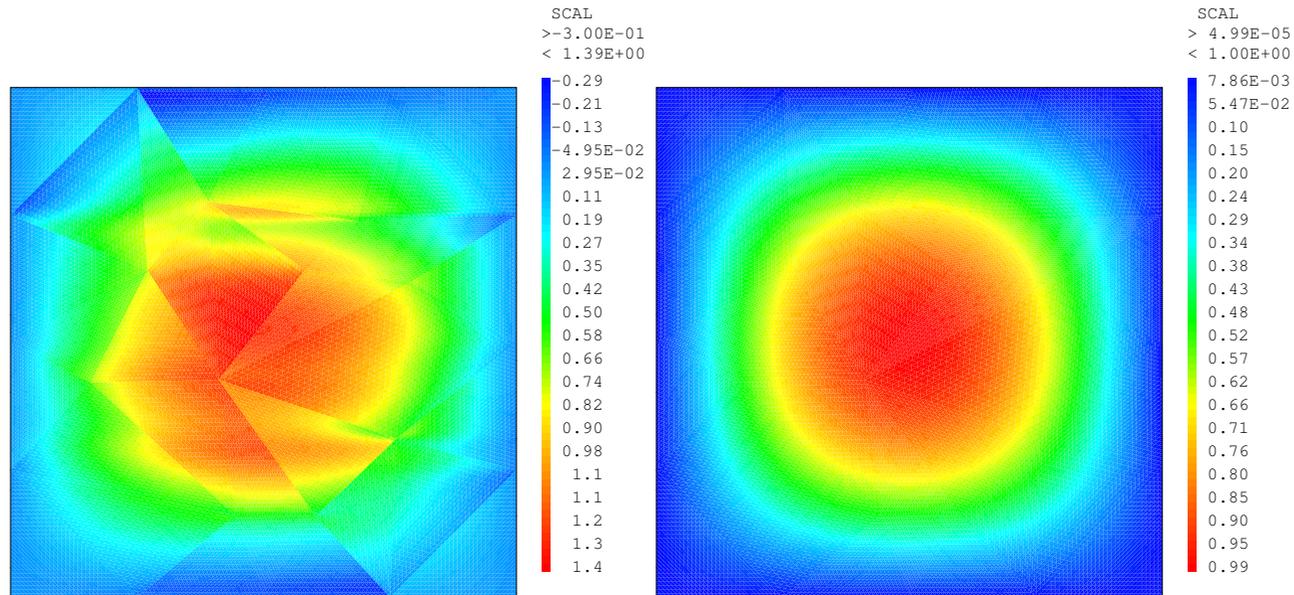


Figure 11: Solution numérique avec les E.F.M.H. et les VFNEW pour le problème 3 (maillage fin)

Conclusion

- Méthode VF(MPFA) précise et robuste pour les calculs de sûreté de l'ANDRA.
- Suppression des instabilités qui apparaissent avec les EFMH.
- Instabilités pour des maillages de triangles et des tenseurs très anisotropes pour les VF(MPFA).
- Développement d'un nouveau schéma VF symétrique et stable bien adapté aux problèmes diffusifs fortement anisotropes.

Conclusion

- Perspectives : généralisation au 3D.
- Convergence théorique.
- Associer les 2 schémas VF(MPFA) et VFNEW de manière à obtenir les qualités des 2 algorithmes (Précision et stabilité).