

UNIVERSITE PARIS XIII

Ecole d'ingénieurs Sup' Galilée

Formation Mathématiques Appliquées et Calcul Scientifique

Rapport de stage de

Hafiz MOHAMED

Sujet du stage effectué d'Avril à Septembre 2013 :

Estimations d'erreur a posteriori pour la modélisation des écoulements en milieux poreux

Organismes d'accueil :

Laboratoire d'Analyse, Géométrie et Applications
(UMR 7539)

Institut de Radioprotection et Sûreté Nucléaire

Encadrants au LAGA :

Fayssal BENKHALDOUN, Gilles SCARELLA,
Pascal OMNES, Emmanuel AUDUSSE

Encadrant à l'IRSN :

Marc BOURGEOIS

Tuteur universitaire :

Hakim BOUMAZA

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier Fayssal Benkhaldoun pour m'avoir proposé ce stage et pour m'avoir encadré au LAGA.

Je remercie ensuite Olivier Lafitte qui a fait en sorte que ce stage se fasse dans les deux environnements, LAGA et IRSN.

Je remercie les chercheurs du LAGA, Gilles Scarella pour son aide informatique, Pascal Omnès pour ses explications sur les méthodes volumes finis.

Merci également à Emmanuel Audusse et Hakim Boumaza.

Mes remerciements vont ensuite à Marc Bourgeois pour l'encadrement à l'IRSN ainsi que ses conseils.

Je remercie Delphine Pellegrini, chef de l'unité de travail à laquelle j'ai été affectée.

Je remercie les collègues de l'IRSN qui m'ont aidé pour les tâches administratives et les soucis informatiques, Chantal Nicolai, Amélie Dehoyos, Thomas Hebrail, Christelle Courbet.

Je remercie Minh Le Hoang, post-doctorant qui reprendra la suite de mon stage, pour ses conseils et remarques.

Sommaire

1	Introduction	5
2	Les organismes d'accueil	6
2.1	Le LAGA	6
2.2	L'IRSN	7
3	Généralités	9
3.1	Les milieux poreux	9
3.2	Les équations d'écoulement	9
3.3	L' équation de transport	11
3.4	Estimation d'erreur a posteriori	12
3.5	Validation du code Melodie	13
4	Problème du Streamer (LAGA)	14
4.1	Présentation du problème	14
4.2	Discrétisation de l'équation d'écoulement	17
4.3	Discrétisation de l'équation de transport	19
4.4	Estimateur d'erreur a posteriori	20
4.5	Méthode de raffinement et déraffinement	20
4.6	Algorithme de résolution	23
4.7	Résultats	24
5	Ecoulement transitoire et transport (IRSN)	26
5.1	Présentation du problème	26
5.2	Discrétisation de l'équation d'écoulement	27
5.3	Estimateur d'erreur a posteriori pour l'équation d'écoulement	28
5.4	Discrétisation de l'équation de transport	29
5.5	Estimateur d'erreur a posteriori pour l'équation de transport	30
5.6	Raffinement et déraffinement de maillage	31
5.7	Algorithme de résolution	35
5.8	Méthodologie de résolution	36
5.9	Résultats	38
6	Détermination de tolérances d'erreur	40
6.1	Cas analytiques 1D	40
6.2	Cas analytiques 2D	43
6.3	Cas d'écoulement permanent 2D	45
6.4	Méthode proposée	49
7	Conclusion	51
8	Complément : estimateur d'erreur a posteriori pour le laplacien en 1D	52
8.1	Présentation du problème	52
8.2	Approximation éléments finis et volumes finis	52
8.3	Estimateur d'erreur a posteriori	54
8.4	Algorithme de résolution	57

9	Annexes	58
9.1	Annexe 1 : Expression du champ de vitesses pour le streamer	58
9.2	Annexe 2 : Changements apportés au code "Streamer" du LAGA	59
9.3	Annexe 3 : Changements apportés au code "PorousMedia" du LAGA	60
9.4	Annexe 4 : Changements apportés au calcul de transport à l'IRSN	61
9.5	Annexe 5 : Changements apportés à la stratégie de raffinement à l'IRSN . . .	62
9.6	Annexe 6 : Notice d'utilisation de Melodie pour le couplage Transitoire-Transport	64
10	Bibliographie	66

1 Introduction

Dans le cadre d'un contrat entre le LAGA et l'IRSN, j'ai effectué ce stage qui s'est déroulé en deux parties ; la première au sein du LAGA et la deuxième au sein de l'IRSN. Le sujet traité a toutefois été le même, à savoir, la résolution numérique d'un système d'équations d'écoulement et de transport sur maillage adaptatif par la méthode des volumes finis.

Durant les premiers mois de stage, j'ai étudié sur le plan théorique les méthodes de volumes finis centrés sur les noeuds et de volumes finis diamants en 2D, ainsi que les estimateurs d'erreur a posteriori liés à ces méthodes. Ce travail a été nécessaire pour comprendre, corriger et améliorer les codes que cela soit au LAGA ou à l'IRSN.

J'ai ensuite travaillé sur un code existant au LAGA écrit en C++. Il s'agissait d'y apporter certaines modifications.

La deuxième partie de stage à l'IRSN a été plus pratique. Travaillant sur un code Fortran, l'objectif était double : nettoyer le code laissé par mes prédécesseurs d'une part, trouver une méthodologie de résolution d'un système d'équations couplées d'autre part. Il s'agissait de coupler une équation d'écoulement transitoire et une équation de transport, à noter que le code de l'IRSN permettait déjà de coupler une équation d'écoulement permanent et une équation de transport.

L'IRSN doit modéliser des problèmes réels et fait face à la faisabilité des calculs : les calculs doivent bien sûr être justes sous une certaine mesure mais doivent également être faisables question temps de calcul et mémoire machine. En ce sens, j'ai ensuite réfléchi à la détermination des tolérances d'erreur pour l'adaptation de maillage : de manière brève, si la tolérance choisie est trop petite, le programme fera beaucoup de calculs (beaucoup d'adaptations de maillage) sans forcément gagner de l'information ; si la tolérance choisie est trop grande, on perdra de l'information.

Ce rapport présente alors les équations étudiées au LAGA et à l'IRSN, les méthodes numériques et méthodologies utilisées pour résoudre ces équations et les estimateurs d'erreur a posteriori qui ont servi à l'adaptation de maillage. Le travail, pratique, effectué pendant ce stage, est disséminé aux endroits appropriés le long du rapport. Les changements apportés aux codes sont présentés en annexe.

2 Les organismes d'accueil

2.1 Le LAGA

Le Laboratoire d'Analyse, Géométrie et Applications est une Unité Mixte de Recherche (UMR 7539) associée au CNRS et à l'Institut Galilée, composante de l'Université Paris 13 (Villetaneuse), le laboratoire se situant sur le campus de l'Université. Le LAGA comprend environ 80 chercheurs et enseignants-chercheurs.

Le laboratoire est structuré en sept équipes de recherche :

- Arithmétique et géométrie algébrique (responsable Jacques Tilouine)
- Mathématiques pour le traitement de l'information et de l'image (responsables Claude Carlet, Françoise Dibos)
- Modélisation et Calcul scientifique (responsable Frederic Weissler)
- Physique mathématique et Équations aux dérivées partielles (responsable Jean-Marc Delort)
- Probabilités et Statistiques (responsable Yueyun Hu).
- Théorie ergodique et Systèmes dynamiques (responsable Julien Barral)
- Topologie algébrique (responsable Bob Oliver)

Je ne présente ici en détail que les équipes dans lesquelles j'ai travaillé.

Thèmes de recherche de l'équipe de Modélisation et Calcul Scientifique

- **Mécanique des fluides numérique et turbulence**
- Décomposition de domaines
- Mathématiques appliquées aux sciences du vivant
- Méthodes de propagation dans les problèmes hyperboliques haute fréquence
- Propriétés qualitatives des équations aux dérivées partielles non linéaires

Thème de recherche de l'équipe de Mécanique des fluides numérique et turbulence :

- Conception et analyse de schémas volumes finis d'approximation d'équations aux dérivées partielles
 - schéma DDFV (P. Omnes)
 - schéma cinétique (E. Audusse)
 - schéma SRNH (F. Benkhaldoun)
 - schéma de Godunov (P. Omnes)
 - schéma upwind (B. Merlet)
- Analyse d'erreur a posteriori pour opérateurs elliptiques linéaires et non linéaires et paraboliques non linéaires avec prise en compte de l'erreur due à la linéarisation
 - schémas éléments finis (L. El Alaoui)
 - schémas volumes finis (P. Omnes)
- Simulation numérique de problèmes d'écoulements de fluides
 - météorologie et aérodynamique avec applications au contrôle (C. Basdevant)
 - raffinement dynamique de maillage (F. Benkhaldoun)
 - écoulements à surface libre (E. Audusse et F. Benkhaldoun)

- écoulements en milieux poreux avec applications au stockage de déchets radioactifs (L. El Alaoui)
- physique des plasmas (F. Benkhaldoun)

2.2 L'IRSN

L'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire est un établissement public à caractère industriel et commercial sous la tutelle conjointe des ministères chargés de la défense, de l'environnement, de l'industrie, de la recherche et de la santé. Il est l'expert public national des risques nucléaires et radiologiques. L'IRSN rassemble plus de 1 700 spécialistes : ingénieurs, chercheurs, médecins, agronomes, vétérinaires et techniciens, compétents dans les domaines de la sûreté nucléaire, de la radioprotection et du contrôle des matières nucléaires et sensibles. L'IRSN intervient en appui aux autorités publiques compétentes en matière de sûreté nucléaire et de radioprotection pour les activités civiles et de défense, ainsi qu'en matière de sécurité des installations et des matières nucléaires dans le cadre des traités internationaux.

Ses domaines d'activité sont : la sûreté nucléaire (réacteurs, cycle du combustible, déchets, applications médicales), la sûreté des transports de matières radioactives et fissiles, la protection des travailleurs, de la population et de l'environnement contre les risques liés aux rayonnements ionisants, la protection et le contrôle des matières nucléaires, la protection des installations nucléaires et transports de matières radioactives et fissiles contre les actes de malveillance.

L'IRSN est structuré en trois pôles opérationnels :

- Pôle "Défense, sécurité et non-prolifération" dont le domaine de travail est l'expertise nucléaire de défense ;
- Pôle "Radioprotection, environnement, déchets et crise" dont les domaines de travail sont la protection de l'homme, l'environnement, les déchets et géosphère, la crise ;
- Pôle "Sûreté nucléaire" dont les domaines de travail sont l'expertise de sûreté, la recherche en sûreté, les systèmes, nouveaux réacteurs et démarches de sûreté.

La recherche étant au centre de l'IRSN, celle-ci lui permet non seulement d'acquérir de nouvelles connaissances scientifiques, mais aussi de développer les outils techniques nécessaires à la maîtrise des risques. La recherche est répartie en trois unités :

- Radioprotection de l'homme ; cette unité est constituée de 8 laboratoires de recherche et traite les thématiques suivantes :
 - Dosimétries et indicateurs biologiques
 - Pathologies des rayonnements ionisants et thérapies
 - Epidémiologie des rayonnements ionisants
 - Radiotoxicologie expérimentale
- Environnement ; cette unité est constituée de 12 laboratoires et bureaux de recherche et de 2 groupes d'appui à la recherche et traite les thématiques suivantes :
 - Transferts des radioéléments dans l'environnement
 - Effets des rayonnements ionisants sur les écosystèmes
 - Aléa sismique
 - Stockages profonds des déchets nucléaires

- Transferts dans les stockages des déchets nucléaires
- Sûreté nucléaire ; cette unité est constituée de 17 laboratoires et bureaux de recherche et d'un groupe d'appui à la recherche et traite les thématiques suivantes :
 - Mécanique du combustible nucléaire et thermohydraulique
 - Accidents de fusion de coeur d'un réacteur nucléaire
 - Incendie en milieu confiné
 - Métrologie et confinement
 - Neutronique et criticité

Mon stage s'est déroulé au sein du "Bureau d'Expertise et de Recherche sur les Installations de Stockage" (BERIS), dans le "Service d'Expertise des Déchets RADIOactifs et de la radio-activité Naturelle" (SEDRAN). Le BERIS un est des 12 laboratoires de l'unité de recherche "Environnement".

3 Généralités

3.1 Les milieux poreux

La plupart des roches et des sols contiennent naturellement un pourcentage de vides qui peuvent être occupés par des fluides. Ce pourcentage est appelé porosité.

On distingue deux types de porosité : la porosité d'interstice et la porosité de fissure. Ces deux types de porosité peuvent cependant coexister. Lorsque les roches sont constituées de particules minérales solides, plus ou moins cimentées, formant un squelette autour duquel existent des espaces vides, on parle de porosité d'interstice. La plupart des roches sont concernées par ce type de porosité. Par les effets de la tectonique, la quasi-totalité des roches de l'écorce terrestre est fracturée : failles, fissures, diaclases. Ces fissures s'organisent généralement en au moins deux directions principales de fissuration qui découpent la roche en blocs. On est donc en présence d'un réseau de fissures, plus ou moins interconnectées, qui peut créer des vides dans la roche. On parle alors de porosité de fissure.

La porosité ω d'un milieu est donc la fraction de vide :

$$\omega = \frac{\text{volume des pores}}{\text{volume total}}$$

L'interconnexion des pores d'un milieu permet à un fluide de circuler. Cette interconnexion permet de définir la perméabilité du milieu poreux qui indique son aptitude à être traversé par un écoulement. Deux définitions sont données pour la perméabilité. Notons que dans la majorité des problèmes d'écoulement en milieu poreux, le fluide étudié est tout simplement l'eau. La perméabilité intrinsèque se rapporte au milieu poreux indépendamment des caractéristiques du fluide. La perméabilité des hydrogéologues, elle, est fonction du fluide et de sa viscosité. On peut cependant passer facilement de la perméabilité intrinsèque K_r à la perméabilité des hydrogéologues K :

$$K = \frac{\rho g}{\mu} K_r$$

- K : perméabilité des hydrogéologues ($m.an^{-1}$)
- K_r : perméabilité intrinsèque (m^2)
- ρ : masse volumique du fluide ($kg.m^{-3}$)
- g : accélération de la pesanteur ($m.an^{-2}$)
- μ : viscosité dynamique du fluide ($kg.m^{-1}.an^{-1}$)

Les milieux poreux sont donc définis par deux critères : la porosité et la perméabilité.

L'eau contenue dans le milieu poreux peut être de deux types :

- eau liée : elle est attachée à la surface des particules solides par les forces d'attraction moléculaire ;
- eau libre : c'est celle qui est en dehors du champ d'attraction des particules solides ; l'eau libre est susceptible de se déplacer sous l'effet de la gravité ou des gradients de pression.

3.2 Les équations d'écoulement

Loi de Darcy

A l'échelle macroscopique, la perméabilité d'un milieu poreux entraîne une perte de charge lors

de l'écoulement d'un fluide au travers de ce dernier. La loi de Darcy exprime la relation entre la vitesse de Darcy et le gradient de pression hydraulique, cette vitesse n'est pas la vitesse réelle du fluide. La vitesse de Darcy est reliée au débit et à l'aire totale d'une section (perpendiculaire au flux) du matériau, ainsi qu'à la vitesse réelle interstitielle au travers de la porosité du matériau. La vitesse de Darcy est donc une vitesse fictive moyenne (macroscopique) de l'écoulement traversant la totalité de la surface orthogonale à la direction de l'écoulement, comme si l'ensemble vides+pores était offerte à celui-ci.

La loi de Darcy s'applique à un milieu poreux homogène et isotrope parcouru par un écoulement à faible vitesse. L'équation de Darcy s'écrit sous forme vectorielle :

$$\vec{q} = -\frac{K_r}{\mu}(\nabla P - \rho \vec{g})$$

- \vec{q} : vitesse de Darcy, vitesse de filtration ($m.an^{-1}$)
- K_r : tenseur de perméabilité intrinsèque du milieu (m^2)
- μ : viscosité dynamique du fluide ($kg.m^{-1}.an^{-1}$)
- P : pression du fluide ($kg.m^{-1}.an^{-2}$)
- ρ : masse volumique du fluide ($kg.m^{-3}$)
- \vec{g} : vecteur accélération de la pesanteur ($m.an^{-2}$)

Remarque

Pour ne pas alourdir les notations, j'écrirai dans toute la suite ∇ au lieu de $\vec{\nabla}$, ∇ désignera donc un vecteur.

La charge hydraulique s'écrit :

$$h = \frac{P}{\rho g} - z$$

- z représente la cote (m) sur un axe descendant

En notant \vec{e}_3 le vecteur $(0, 0, 1)$, le gradient de h s'écrit :

$$\nabla h = \frac{\nabla P}{\rho g} - \vec{e}_3$$

Ainsi la loi de Darcy s'exprime en fonction de la charge hydraulique ainsi :

$$\vec{q} = -K \nabla h$$

Le gradient de charge hydraulique est donc le principal moteur du mouvement de l'eau dans les sols.

Equation de continuité

L'équation de continuité exprime le fait que dans un volume fermé fixe, la variation de la masse de fluide contenu dans l'unité de temps est égale à la somme algébrique des flux massiques traversant la surface du volume considéré.

Travaillons à l'échelle microscopique. Soit \vec{v} la vitesse réelle du fluide dans chacun des pores

du milieu poreux. A cette échelle, l'équation de continuité s'appliquant à l'intérieur des pores s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{v}) = 0$$

L'étude de l'écoulement se faisant à l'échelle macroscopique, les différentes quantités utilisées sont alors définies à cette échelle. La vitesse macroscopique d'un fluide dans un milieu poreux est la vitesse de Darcy définie précédemment. Pour un milieu poreux, l'équation de continuité s'écrit :

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{q}) + \rho J = 0$$

- J : terme d'apport externe (an^{-1})

Equation de diffusivité

On définit le coefficient d'emménagement S^{em} d'un milieu comme étant son aptitude à stocker de l'eau (en m^{-1}). Le coefficient d'emménagement représente le volume d'eau évacué pour un rabattement unitaire de charge hydraulique dans un volume élémentaire de milieu poreux. Il existe une relation simple entre le coefficient d'emménagement, la porosité d'un milieu et la charge hydraulique :

$$\omega = S^{em}h$$

En combinant l'équation de Darcy et l'équation de continuité, et en utilisant la dernière égalité, l'équation de diffusivité s'écrit :

$$S^{em} \frac{\partial h}{\partial t} - \text{div}(K \nabla h) + J = 0$$

Soit D un domaine d'intégration donné de l'équation de la diffusivité, muni de ses conditions initiales et aux limites, conditions aux limites devant être de Dirichlet sur au moins une partie de la frontière. On démontre, en analyse, que si h vérifie ces conditions aux limites et initiales, et si h vérifie de plus l'équation de diffusivité, alors h est en général la solution unique du problème. Ceci est vrai en régime permanent comme en régime transitoire.

3.3 L' équation de transport

Le transport de matière par un fluide en mouvement repose principalement sur les processus de convection, de diffusion, de dispersion et sur les interactions physico-chimiques avec le milieu. L'équation de transport est une combinaison des équations de diffusion et de convection (ou advection), elle exprime le déplacement d'une substance soluble dans l'eau, et soumise au déplacement de l'eau dans le milieu poreux.

On commence par faire un point sur le vocabulaire lié au transport.

La diffusion de matière désigne la tendance naturelle d'un système à rendre homogène la concentration. La diffusion traduit le mouvement des éléments à une échelle plus petite que l'échelle de la particule.

La convection de matière est un déplacement de matière entraîné par le milieu fluide.

L'advection de matière correspond à son déplacement par un champ vectoriel.

L'équation de la convection s'écrit :

$$\omega \frac{\partial C}{\partial t} + \text{div}(C \vec{q}) = 0$$

- C : concentration de soluté dans le fluide ($kg.m^{-3}$)
- \vec{q} : vitesse de Darcy du fluide ($m.an^{-1}$)
- ω : porosité du milieu ($-$)

On note le flux convectif :

$$\overrightarrow{\phi_{conv}} = C \vec{q}$$

On remarque que l'équation de convection correspond bien à la définition des termes de "convection" et "advection" dans la mesure où le déplacement du soluté se fait en fonction de la vitesse de Darcy du fluide qui le contient.

L'équation de la diffusion appelée première loi de Fick exprime le flux diffusif $\overrightarrow{\phi_{diff}}$:

$$\overrightarrow{\phi_{diff}} = -D \nabla C$$

- D : tenseur de diffusion-dispersion de l'espèce soluble dans le fluide ($m^2.an^{-1}$)

Aussi appelée équation de convection-diffusion ou équation d'advection-diffusion, l'équation de transport s'obtient en ajoutant le flux diffusif au flux convectif dans l'équation de la convection. Sans la prise en compte des interactions physico-chimiques avec le milieu, elle s'écrit donc :

$$\omega \frac{\partial C}{\partial t} - \text{div}(D \nabla C - C \vec{q}) = 0$$

Avec la prise en compte de ces interactions, elle s'écrit :

$$\omega \frac{\partial C}{\partial t} - \text{div}(D \nabla C - C \vec{q}) = f$$

- f : terme traduisant la disparition ou l'arrivée de matière dans le milieu poreux ($kg.m^{-3}.an^{-1}$)

3.4 Estimation d'erreur a posteriori

Lors d'un calcul numérique, le maillage utilisé joue un rôle important : si le maillage est grossier, le temps de calcul sera court mais le résultat sera approximatif. Si le maillage est très fin, le temps de calcul sera excessivement long. L'adaptation de maillage permet donc d'avoir un maillage fin là où cela est nécessaire. Les techniques d'adaptation de maillage reposent sur l'utilisation des estimations d'erreur a posteriori.

L'estimation d'erreur a priori donne une borne à la différence entre la solution exacte u_e et la solution approchée u dans une certaine norme :

$$\|u_e - u\| \leq Ch^\alpha \|u_e\|^*$$

où $\|\cdot\|$ diffère en général de $\|\cdot\|^*$.

Ces estimations montrent sur le plan théorique, la convergence de la méthode numérique. En pratique, cette borne ne peut être utilisée dans la mesure où elle fait intervenir la solution exacte qui n'est pas connue. C'est la raison pour laquelle sont utilisés les estimateurs d'erreur a posteriori. On appelle estimation d'erreur a posteriori une estimation de la norme de l'erreur $\|u_e - u\|$ ne faisant intervenir que la solution numérique, les données du problème et la géométrie du maillage :

$$\|u_e - u\| \leq \eta(\mathcal{T}, D, u)$$

- \mathcal{T} : maillage
- D : ensemble des données du problème

La norme $\|\cdot\|$ dépend du problème considéré (cela peut être la norme L2 ou la norme énergie ou autre). L'estimateur d'erreur a posteriori peut donc être calculé numériquement.

Il est important de noter qu'un estimateur d'erreur a posteriori doit être calculable localement, sur chaque maille en l'occurrence. En général, on a :

$$\eta(\mathcal{T}, D, u) = \left[\sum_{T \in \mathcal{T}} \eta_T^2(T, D, u) \right]^{1/2}$$

- $\eta_T(T, D, u)$: estimateur d'erreur a posteriori défini sur la maille T
- $\eta(\mathcal{T}, D, u)$: estimateur d'erreur a posteriori globale

L'estimateur d'erreur locale indiquera si la maille doit être raffinée ou dérafinée selon un certain critère. Ainsi, le principe est le suivant : on résout numériquement une équation, on calcule ensuite une estimation d'erreur a posteriori globale (sur tout le domaine de calcul). Si cette estimation est supérieure à une tolérance fixée par l'utilisateur, on raffine le maillage (en utilisant les estimations d'erreur a posteriori locale définies sur chaque maille) et on recommence le calcul. Si cette estimation est inférieure à la tolérance, on arrête le calcul. Pour un calcul instationnaire, l'idée est la même à chaque pas de temps.

3.5 Validation du code Melodie

Le code Melodie, écrit en Fortran, est développé par l'IRSN. Le travail a porté sur une version beta du code regroupant les modules d'estimateur d'erreur a posteriori et d'adaptation dynamique de maillage.

Mon prédécesseur a utilisé des cas analytiques pour montrer que le raffinement de maillage permet la convergence de la solution numérique vers la solution exacte. Il a montré l'ordre deux de la méthode en norme L2 et son ordre un en norme énergie (voir rapport [10]). J'ai réutilisé ces cas analytiques en m'axant plus sur les estimateurs d'erreur a posteriori.

4 Problème du Streamer (LAGA)

Le problème du streamer a été étudié durant la première partie de stage au LAGA bien qu'il ne traite pas d'un écoulement en milieu poreux. En effet, il s'agit d'un modèle de décharge électrique en milieu plasma. Cependant, ce modèle repose sur des équations couplées de transport et d'écoulement et par conséquent, l'analogie pourra être faite avec ce qui a été présenté pour les écoulements fluides en milieu poreux. Je n'utilise tout de même pas les notations du chapitre précédent et garde les notations "classiques" utilisées pour ce problème et également utilisées dans l'implémentation.

4.1 Présentation du problème

Les streamers sont des décharges électroniques ayant lieu dans un plasma. Un plasma est un milieu gazeux constitué, au moins partiellement, de particules chargées (électrons et ions) qui lui confère des propriétés particulières en présence de champs électriques et/ou magnétiques. Les streamers apparaissent lorsque qu'un gaz neutre est exposé à un fort champ électrique. Leurs formes dépendent du champ électrique, de la pression et du volume du milieu. Les streamers sont des décharges filamenteuses générées par des ondes ioniques.

Soit respectivement $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ et $[0, T_f]$ les domaine en espace et intervalle en temps de calcul.

La modélisation de ces décharges repose principalement sur une équation d'écoulement, une équation de Darcy et une équation de transport :

$$\Delta V = k(n_e - n_i) \quad (1)$$

$$\vec{v}_e = f_1(\vec{E}) \times \vec{E} \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \text{div}(n_e \vec{v}_e - D_e \nabla n_e) = S_e \quad (3)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = S_i^+ \quad (4)$$

- V : potentiel électrique
- $k = \frac{e}{\varepsilon_0}$, où e désigne la charge élémentaire et ε_0 la permittivité du vide
- n_e et n_i : densités d'électrons et d'ions positifs respectivement
- \vec{v}_e : vitesse de Darcy des électrons
- \vec{E} : champ électrique donné par :

$$\vec{E} = -\nabla V$$

- $f_1(\vec{E})$: fonction de \vec{E} dont les détails sont donnés en annexe
- D_e : coefficient de diffusion, fonction de la vitesse des électrons et du champ électrique :

$$D_e = \left[0.3341 \times 10^9 \times \left(\frac{\|\vec{E}\|}{N} \right)^{0.54069} \right] \times \frac{\|\vec{v}_e\|}{\|\vec{E}\|}$$

$N = 2.5 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$: densité d'un gaz neutre

- $S_e = S_i^+$: termes sources donnés par :

$$S_i^+ = S_e = f_2(\vec{E}) \times \|\vec{v}_e\| \times n_e \times N$$

La fonction $f_2(\vec{E})$ est donnée en annexe.

L'équation 3 est dite de convection-diffusion-réaction, la réaction venant de l'ajout ou de la perte d'électrons dû au terme source.

Interprétation du modèle

Supposons que dans un volume élémentaire dV de l'espace, se trouve un plus grand nombre d'électrons que d'ions positifs. Un champ électrique se crée dû à la non neutralité de charge du volume dV , c'est ce qu'indique l'équation 1, ou plus exactement, l'intégrale de cette équation. Les électrons étant plus légers que les ions et donc plus mobiles, ce sont les électrons qui s'échapperont du volume dV afin de tendre à y rendre neutre la charge, c'est ce qu'indique les équations 3 et 4.

Conditions initiales et limites

Le domaine de calcul Ω est un rectangle $[0, 1] \times [0, 0.5]$.

Les conditions initiales sont les suivantes :

$$\begin{aligned} n_e(x, y, 0) &= 10^{16} \times \exp\left(-\frac{(x-0.2)^2 + (y-0.25)^2}{\sigma^2}\right) + 10^9, \sigma = 0.01 \\ n_i(x, y, 0) &= n_e(x, y, 0) \\ V(x, y, 0) &= 25000 \times (1 - x) \end{aligned}$$

Pour n_e , on impose une condition de Neumann sur tous les bords :

$$\frac{\partial n_e}{\partial n} = 0 \quad \text{sur} \quad \partial\Omega$$

Pour V , on impose une condition de Neumann sur les bords haut et bas, et une condition de Dirichlet sur les bords gauche et droit :

$$V = 25000 \times (1 - x) \quad \text{sur} \quad \{(x, y) \in \partial\Omega \mid x = 0 \text{ ou } x = 1\}$$

$$\frac{\partial V}{\partial n} = 0 \quad \text{sur} \quad \{(x, y) \in \partial\Omega \mid y = 0 \text{ ou } y = 0.5\}$$

Méthode volumes finis et discrétisation

Une méthode de volumes finis "hybride" a été mise en place pour discrétiser le système 1-3. En effet, une méthode de volumes finis centrés sur les sommets discrétise l'équation 1 alors qu'une méthode de volumes finis centrés sur les cellules discrétise l'équation 3, une interpolation permet tout de même de coupler les équations. L'équation 1 était initialement résolue par la même méthode volumes finis que l'équation 3.

On introduit une discrétisation de l'intervalle $[0, T_f]$ en sous-intervalles $[t_{n-1}, t_n]$, $1 \leq n \leq N$ avec $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T_f$. On note $\tau_n = t_{n+1} - t_n$ et $\tau = \max_n \tau_n$.

Pour chaque n , on se donne sur Ω une triangulation régulière \mathcal{T}^n dont les triangles sont notés T_k , $1 \leq k \leq N_T$. Cette triangulation constituera le maillage primal. On note de manière générale \mathcal{V}^n les maillages duaux associés à \mathcal{T}^n . On note S_j , $1 \leq j \leq N_S$ les sommets du maillage primal. $\mathcal{V}(j)$ désigne l'ensemble des triangles ayant S_j comme sommet.

D_j désigne la cellule duale barycentrique associée au sommet S_j ; D_j est obtenue en joignant successivement les milieux des arêtes et les barycentres des triangles dans $\mathcal{V}(j)$.

d_{ik} désigne la cellule duale diamant associée aux triangles T_i et T_k partageant une même arête Σ ; d_{ik} est obtenue en joignant successivement les extrémités de Σ et les barycentres de T_i et T_k .

Pour un triangle T de sommets S_1, S_2, S_3 du maillage primal, on nomme B son barycentre, on nomme respectivement

Σ_1^{opp} , Σ_2^{opp} et Σ_3^{opp} les arêtes $[S_2S_3]$, $[S_1S_3]$ et $[S_1S_2]$;

\vec{n}_1^{opp} , \vec{n}_2^{opp} et \vec{n}_3^{opp} leurs normales unitaires sortantes;

M_{23} , M_{13} , M_{12} les milieux de ces arêtes;

σ_{12} , σ_{13} et σ_{23} les arêtes $[BM_{12}]$, $[BM_{13}]$ et $[BM_{23}]$;

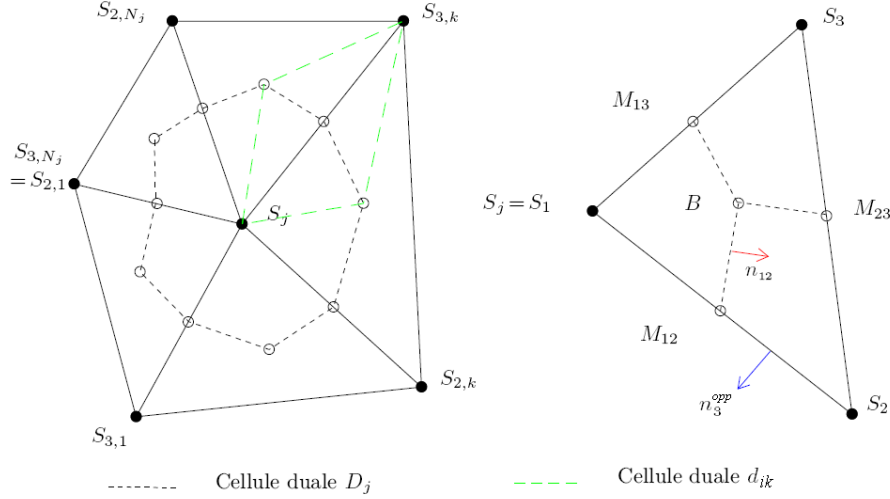
\vec{n}_{12} , \vec{n}_{13} et \vec{n}_{23} leurs normales unitaires sortantes;

\vec{n}_{pq} est tel que $\vec{n}_{pq} \perp \vec{M}_{pq}B$ et $\vec{n}_{pq} \cdot \vec{S_p S_q} > 0$

Q_{12} et Q_{13} respectivement les triangles de sommets S_1, B, M_{12} et S_1, B, M_{13} .

Pour ne pas alourdir l'écriture, ces notations renverront intuitivement au triangle T .

Enfin, pour une variable quelconque u , u_k^n désignera l'approximation de u au noeud S_k et au temps t_n , ou suivant le contexte, désignera l'approximation de u au barycentre du triangle T_k et au temps t_n .



Dans la suite, on prendra $S_j = S_1$.

4.2 Discrétisation de l'équation d'écoulement

V est représentée par une fonction éléments finis P1 sur le maillage primal. On omet dans cette partie l'indice lié à l'itération en temps.

Pour obtenir le schéma volumes finis centrés sur les noeuds, on intègre l'équation 1 sur les cellules duales barycentriques D_j :

$$\begin{aligned}
 \int_{D_j} \Delta V dx &= \int_{D_j} k(n_e - n_i) dx \\
 \int_{\partial D_j} \nabla V \cdot \vec{n} d\sigma &= \int_{D_j} k(n_e - n_i) dx \\
 \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \int_{\partial D_j \cap T} \nabla V \cdot \vec{n} d\sigma &= \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \int_{D_j \cap T} k(n_e - n_i) dx
 \end{aligned}$$

Le second membre est obtenu par une formule de quadrature :

$$\begin{aligned}
 \int_{D_j} f dx &= \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \int_{Q_{12} \cup Q_{13}} f dx \\
 \int_{D_j} f dx &= \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \frac{f(S_1) + f(M_{12}) + f(B)}{3} |Q_{12}| + \frac{f(S_1) + f(M_{13}) + f(B)}{3} |Q_{13}|
 \end{aligned}$$

Lemme 1. Soit V une surface de frontière ∂V . Le théorème de Gauss donne alors :

$$\int_{\partial V} \vec{n} d\sigma = 0$$

En utilisant le Lemme 1 sur la surface définie par $S_1M_{12}BM_{13}$ puis sur la surface définie par $S_1S_2S_3$, on obtient :

$$\begin{aligned}
\sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \int_{\partial D_j \cap T} \nabla V \cdot \vec{n} d\sigma &= \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \nabla V \cdot \left(\int_{\partial D_j \cap T} \vec{n} d\sigma \right) \\
&= \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \nabla V \cdot (|\sigma_{12}| \vec{n}_{12} + |\sigma_{13}| \vec{n}_{13}) \\
&= \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} -\frac{1}{2} \nabla V \cdot (|\Sigma_3^{opp}| \vec{n}_3^{opp} + |\Sigma_2^{opp}| \vec{n}_2^{opp}) \\
&= \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \frac{1}{2} \nabla V \cdot (|\Sigma_1^{opp}| \vec{n}_1^{opp}) \tag{5}
\end{aligned}$$

On calcule maintenant le gradient de V . Comme ∇V est constant par triangle, on peut écrire :

$$\nabla V = \frac{1}{|T|} \int_T \nabla V dx = \frac{1}{|T|} \int_{\partial T} V \vec{n} d\sigma$$

Puis utilisant le fait que V soit P1, on a :

$$\begin{aligned}
\nabla V &= \frac{1}{|T|} \left\{ \left(\frac{V_1 + V_2}{2} \right) |\Sigma_3^{opp}| \vec{n}_3^{opp} + \left(\frac{V_2 + V_3}{2} \right) |\Sigma_1^{opp}| \vec{n}_1^{opp} + \left(\frac{V_1 + V_3}{2} \right) |\Sigma_2^{opp}| \vec{n}_2^{opp} \right\} \\
&= \frac{1}{2|T|} \left\{ (|\Sigma_3^{opp}| \vec{n}_3^{opp} + |\Sigma_2^{opp}| \vec{n}_2^{opp}) V_1 + (|\Sigma_3^{opp}| \vec{n}_3^{opp} + |\Sigma_1^{opp}| \vec{n}_1^{opp}) V_2 + (|\Sigma_2^{opp}| \vec{n}_2^{opp} + |\Sigma_1^{opp}| \vec{n}_1^{opp}) V_3 \right\}
\end{aligned}$$

Le Lemme 1 nous donne :

$$\begin{aligned}
\nabla V &= -\frac{1}{2|T|} \left\{ |\Sigma_1^{opp}| \vec{n}_1^{opp} V_1 + |\Sigma_2^{opp}| \vec{n}_2^{opp} V_2 + |\Sigma_3^{opp}| \vec{n}_3^{opp} V_3 \right\} \\
&= -\frac{1}{2|T|} \sum_{k=1,3} |\Sigma_k^{opp}| \vec{n}_k^{opp} V_k
\end{aligned}$$

En injectant l'expression de ∇V dans l'équation 5, on obtient finalement :

$$\sum_{T \in \mathcal{V}(j)} -\frac{1}{4|T|} \left[\sum_{k=1,3} |\Sigma_k^{opp}| \vec{n}_k^{opp} V_k \right] \cdot [|\Sigma_1^{opp}| \vec{n}_1^{opp}] = \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \int_{Q_{12} \cup Q_{13}} k(n_e - n_i) dx$$

Cette dernière égalité nous permet donc de construire la matrice du système : chaque ligne de la matrice sera associée à un sommet S_j du maillage. A la j -ième ligne de la matrice, il y aura donc une contribution de tous les sommets des triangles dans $\mathcal{V}(j)$.

Une fois V calculé numériquement, on interpole linéairement ses valeurs aux barycentres des triangles. On calcule alors le champ électrique \vec{E} constant par cellule diamant, ce qui permet ensuite de calculer le champ de vitesse de Darcy \vec{v}_e , lui aussi constant par cellule diamant.

4.3 Discrétisation de l'équation de transport

Pour obtenir le schéma volumes finis, on intègre l'équation 3 sur une cellule du maillage primal. En utilisant le théorème de la divergence et en approchant l'intégrale sur la face par une formule du point milieu exacte pour les polynômes d'ordre deux, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{T_i} \left[\frac{\partial n_e}{\partial t} + \text{div}(n_e \vec{v}_e - D_e \nabla n_e) \right] dx &= \int_{T_i} S_e dx \\ \int_{T_i} \frac{\partial n_e}{\partial t} dx + \int_{\partial T_i} n_e \vec{v}_e \cdot \vec{n} d\sigma - \int_{\partial T_i} D_e \nabla n_e \cdot \vec{n} d\sigma &= |T_i| (S_e)_i \\ \int_{T_i} \frac{\partial n_e}{\partial t} dx + \sum_{k=1}^3 (n_e)_{ik} |\Sigma_k| \vec{v}_e|_{\Sigma_k} \cdot \vec{n}_{\Sigma_k} - \sum_{k=1}^3 D_e|_{\Sigma_k} |\Sigma_k| \nabla(n_e)|_{\Sigma_k} \cdot \vec{n}_{\Sigma_k} &= |T_i| (S_e)_i \end{aligned}$$

Approximation du terme temporel

On approche la dérivée temporelle par une différence finie :

$$\int_{T_i} \frac{\partial n_e}{\partial t} = |T_i| \frac{(n_e)_i^{n+1} - (n_e)_i^n}{\tau_n}$$

Approximation du terme convectif

Le flux convectif est obtenu par un schéma upwind :

$$(n_e)_{ik} = \begin{cases} (n_e)_i^n & \text{si } \vec{v}_e|_{\Sigma_k} \cdot \vec{n}_{\Sigma_k} \geq 0 \\ (n_e)_k^n & \text{sinon} \end{cases}$$

Approximation du terme diffusif

Il reste à approcher ∇n_e sur les bords. Pour cela, on utilise la méthode des volumes finis diamants. On introduit les cellules duales diamants : soit T_k et T_i deux triangles ayant l'arête Σ en commun. La cellule duale notée d_{ik} associée à ces deux triangles est obtenue en joignant successivement les sommets de Σ et les barycentres de deux triangles. On renomme N_{ik} et S_{ik} les extrémités de Σ_i . Soit $\vec{\alpha}_{ik}$ le vecteur unitaire allant de B_i à B_k et $\vec{\beta}_{ik}$ le vecteur unitaire allant de S_{ik} à N_{ik} . On pose $l_{ik} = |N_{ik}S_{ik}|$ et $L_{ik} = |B_iB_k|$. On a :

$$\nabla(n_e)_{ik} \cdot \vec{\alpha}_{ik} = \frac{(n_e)_k - (n_e)_i}{L_{ik}} \quad (6)$$

$$\nabla(n_e)_{ik} \cdot \vec{\beta}_{ik} = \frac{n_e(N_{ik}) - n_e(S_{ik})}{l_{ik}} \quad (7)$$

On note \vec{n}'_{ik} le vecteur unitaire orthogonal à $\vec{\alpha}_{ik}$ tel que $\vec{n}'_{ik} \cdot \vec{\beta}_{ik} \geq 0$ et \vec{n}_{ik} le vecteur unitaire normal à Σ extérieur à T_i (\vec{n}_{ik} est donc orthogonal à $\vec{\beta}_{ik}$). On a alors :

$$\nabla(n_e)_{ik} = \frac{\nabla(n_e)_{ik} \cdot \vec{\alpha}_{ik}}{\vec{\alpha}_{ik} \cdot \vec{n}_{ik}} \vec{n}_{ik} + \frac{\nabla(n_e)_{ik} \cdot \vec{\beta}_{ik}}{\vec{\beta}_{ik} \cdot \vec{n}'_{ik}} \vec{n}'_{ik} \quad (8)$$

On remarque que :

$$\begin{aligned} |d_{ik}| &= \frac{l_{ik}L_{ik}}{2} \vec{\alpha}_{ik} \cdot \vec{n}_{ik} \\ |d_{ik}| &= \frac{l_{ik}L_{ik}}{2} \vec{\beta}_{ik} \cdot \vec{n}'_{ik} \end{aligned}$$

En injectant les égalités 6 et 7 dans 8, on obtient finalement :

$$\nabla(n_e)_{ik} = \frac{1}{2|d_{ik}|} [(n_e)_k - (n_e)_i] l_{ik} \vec{n}_{ik} + (n_e(N_{ik}) - n_e(S_{ik})) L_{ik} \vec{n}'_{ik}]$$

Cependant, $n_e(N_{ik})$ et $n_e(S_{ik})$ ne sont pas des inconnues du problème. On les exprime alors en fonction des inconnues du problème à l'aide d'une méthode des moindres carrés :

$$n_e(N) = \sum_{l \in \mathcal{V}(N)} (n_e)_l \alpha_l$$

Equation sur les ions

L'équation sur la densité des ions positifs est résolue en utilisant un schéma d'Euler explicite :

$$\frac{(n_i)_k^{n+1} - (n_i)_k^n}{\Delta t} = (S_i^+)_k^n$$

4.4 Estimateur d'erreur a posteriori

Le couplage des équations permet de résoudre l'équation d'écoulement, puis celle de transport, calculer les estimateurs d'erreur et enfin, raffiner le maillage. En effet, au vue des équations, le maillage doit être fin aux mêmes endroits que cela soit vis-à-vis de l'équation d'écoulement ou vis-à-vis de celle de transport.

Cependant, on utilise ici un indicateur d'erreur et non un estimateur d'erreur à proprement parler (à titre comparatif, des estimateurs d'erreur seront décrits dans le chapitre suivant).

L'indicateur d'erreur utilisé et bien adapté au problème, est le gradient de n_e : on attribue à chaque triangle du maillage primal la somme des sauts du gradient de n_e à travers chacune de ses arêtes.

4.5 Méthode de raffinement et déraffinement

L'adaptation de maillage utilisée au LAGA repose sur l'utilisation d'un maillage de référence \mathcal{M}_{ref} et de plusieurs niveaux de raffinement. Ainsi, après avoir résolu l'équation d'écoulement puis l'équation de transport pour un certain pas de temps et avec un certain maillage primal \mathcal{M}_n , on interpole sur le maillage \mathcal{M}_{ref} les résultats obtenus sur le maillage \mathcal{M}_n . C'est donc à chaque triangle du maillage de référence qu'est attribué un estimateur d'erreur a posteriori.

Notons η_{T_k} l'estimateur d'erreur spatiale locale associé au triangle T_k et $IADIV(T_k)$ son niveau de raffinement.

Dans un premier temps, on définit le niveau de raffinement de chaque cellule :

$$si \ \eta_{T_k} > \frac{j}{m+1} \ \text{alors} \ IADIV(T_k) = j$$

m étant le niveau de raffinement maximal.

Dans le but d'avoir un maillage conforme, on ajuste ensuite les niveaux de raffinement afin que la différence de niveaux de raffinement entre deux cellules voisines soit au plus 1.

Si le niveau de raffinement d'un triangle est égal à un, le triangle est découpé en 4 sous-triangles en utilisant les milieux des arêtes. Si le niveau de raffinement d'un triangle est égal à deux ; chacun des 4 sous-triangles sera à son tour découpé en 4. Il est important de remarquer que le déraffinement n'est pas utilisé.

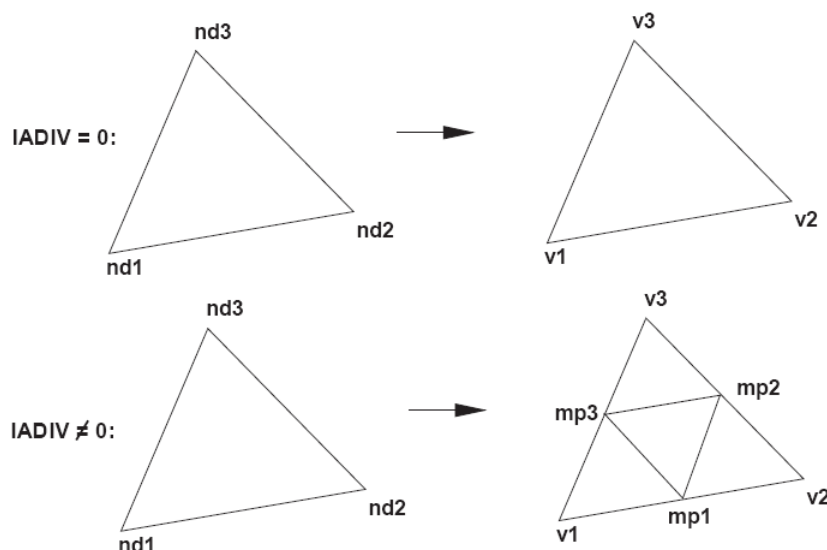


FIGURE 1 – Raffinement de cellule

Sur la figure 1, $mp1$, $mp2$ et $mp3$ sont les milieux des arêtes.

Une fois le maillage raffiné, il est nécessaire d'en vérifier la conformité : chaque face du maillage doit être commune à deux triangles. Pour un triangle quelconque T_k du maillage, quatre cas de figures peuvent se présenter en fonction du niveau de raffinement de ses trois voisins :

- Si aucun de ses voisins est raffiné, T_k reste tel quel
- Si un de ses voisins est raffiné, T_k est découpé en 2
- Si 2 de ses voisins sont raffinés, T_k est découpé en 3
- Si ses 3 voisins sont raffinés, il est découpé en 4

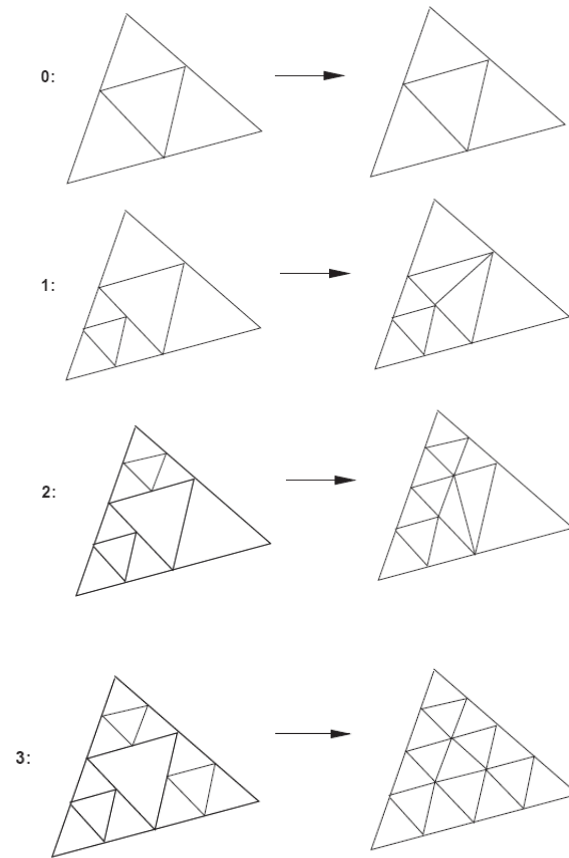


FIGURE 2 – Conformité de maillage

4.6 Algorithme de résolution

Algorithme

m : indice incrémental du nombre d'itération en temps

m_{max} : nombre maximal d'itération en temps fixé par l'utilisateur

i : indice incrémental du nombre d'itération en temps sur un même maillage

i_{max} : nombre maximal d'itération en temps sur un même maillage

- Initialisation de n_e et n_i , $m = i = 0$
 - Tant que $m < m_{max}$
 - Calcul du critère de raffinement sur le maillage de référence ;
Attribution du niveau de raffinement à chaque cellule ; Raffinement
 - Interpolation de n_e et n_i aux sommets
 - Résolution de l'équation d'écoulement avec inconnues aux sommets ;
Interpolation du résultat aux barycentres des triangles
 - Tant que $i < i_{max}$
 - $m = m + 1$
 - Calcul du champ électrique constant par cellule diamant ;
Calcul du champ de vitesse des électrons constant par cellule diamant
 - Résolution des équations de transport sur n_e et n_i (avec au préalable, calcul de D_e , S_e et S_i^+) ;
Interpolation de n_e et n_i aux sommets
 - Résolution de l'équation d'écoulement avec inconnues aux sommets ;
Interpolation du résultat aux barycentres des triangles
 - Fin tant que $i < i_{max}$
 - Interpolation sur le maillage de référence des résultats obtenus sur le maillage raffiné
 - Fin tant que $m < m_{max}$
-

4.7 Résultats

Les figures suivantes représentent le phénomène de décharge. A partir d'un code écrit en C++, ces résultats ont été obtenus sur le cluster Gaia du LAGA.

On distingue sur les maillages les différents niveaux de raffinement. Plus on s'éloigne d'une densité d'électrons élevée, plus le niveau de raffinement est petit. L'adaptation de maillage suit bien le phénomène.

Sur la figure 6, on peut voir la décharge à proprement parler.

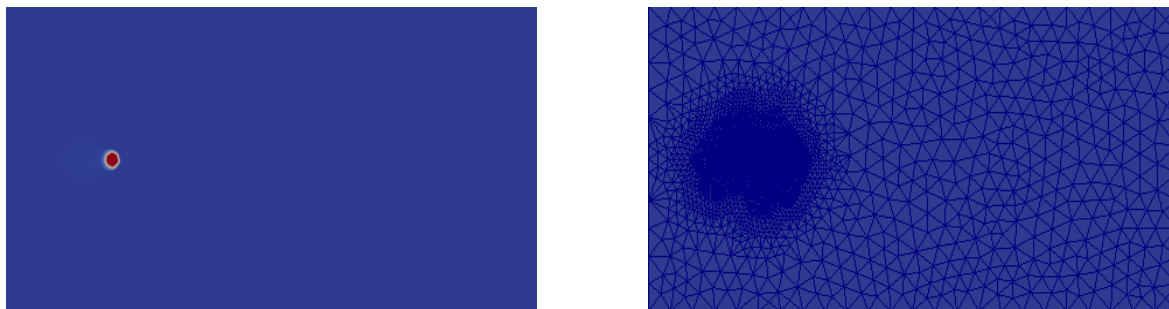


FIGURE 3 – Densité d'électrons n_e et adaptation de maillage

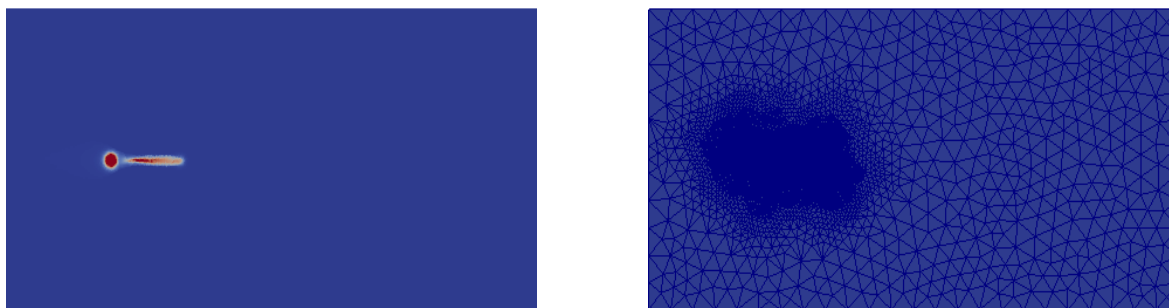


FIGURE 4 – Densité d'électrons n_e et adaptation de maillage

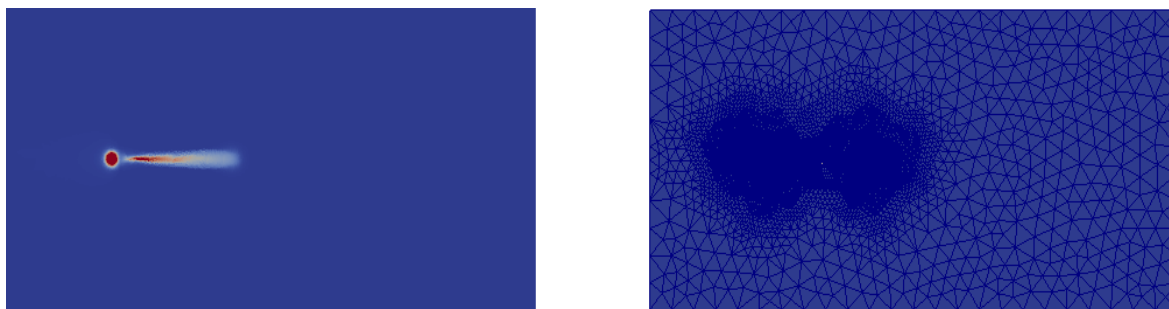


FIGURE 5 – Densité d'électrons n_e et adaptation de maillage

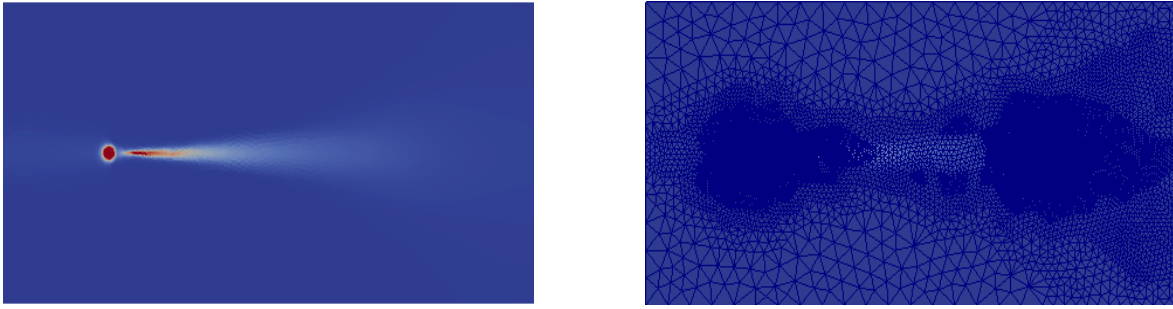


FIGURE 6 – Densité d'électrons n_e et adaptation de maillage

5 Ecoulement transitoire et transport (IRSN)

5.1 Présentation du problème

Le logiciel MELODIE développé à l'IRSN s'applique au stockage de déchets radioactifs en couche géologique profonde. L'objectif est d'évaluer les performances de confinement des sites de stockages proposés par les industriels. Les déchets sont placés dans des colis de stockage, eux-mêmes placés en couche géologique profonde. L'eau des couches géologiques est alors la principale cause du mouvement des éléments radioactifs s'étant éventuellement échappés du colis de stockage.

Le problème traité à l'IRSN est donc l'étude du transport d'un soluté dans un fluide qui lui-même s'écoule à travers un milieu poreux.

De manière assez intuitive, le transport de ce soluté est principalement dû à sa diffusion et à sa convection causé par l'écoulement fluide.

Le problème est donc régi par les équations de diffusivité, de Darcy et de transport suivantes :

$$S^{em} \frac{\partial h}{\partial t} - \text{div}(K(x) \nabla h) + J = 0 \quad \text{dans } \Omega \times]0, T_f[\quad (9)$$

$$-K \nabla h = \vec{q} \quad \text{dans } \Omega \times]0, T_f[\quad (10)$$

$$\omega(x) \frac{\partial C}{\partial t} - \text{div}(D(x, q) \nabla C - C \vec{q}) = f \quad \text{dans } \Omega \times]0, T_f[\quad (11)$$

- S^{em} : coefficient d'emmagasinement du milieu (m^{-1})
- ω : porosité du milieu (-)
- K : perméabilité du milieu ($m.an^{-1}$)
- \vec{q} : vitesse de Darcy du fluide ($m.an^{-1}$)
- μ : viscosité du fluide ($kg.m^{-1}.an^{-1}$)
- C : concentration de soluté ($kg.m^{-3}$)
- f et J : termes sources (resp. $kg.m^{-3}.an^{-1}$ et an^{-1})
- D : tenseur de diffusion-dispersion ($m^2.an^{-1}$), donné par :

$$D(x, \vec{q}) = d_e I + |\vec{q}| [\alpha_l E(\vec{q}) + \alpha_t (I - E(\vec{q}))]$$

- $E_{ij}(\vec{q}) = \frac{q_i q_j}{|\vec{q}|^2}$ pour $1 \leq i, j \leq 3$
- $|\vec{q}|$: norme euclidienne de \vec{q}
- d_e : coefficient de diffusion du soluté dans le milieu poreux ($m.an^{-1}$)
- α_l et α_t : magnitudes de dispersion longitudinale et transverse respectivement (m)

Une méthode de volumes finis centrés sur les sommets est utilisée pour discrétiser le système 9-10-11. Les interfaces matérielles sont alignées avec les arêtes du maillage primal.

Toutes les données du modèle : perméabilité, porosité, terme source, sont constants sur chaque cellule du maillage primal. La charge hydraulique et la concentration, inconnues du problème, sont représentées comme des fonctions éléments finis P1 sur le maillage primal.

L'équation d'écoulement est découplée de celle de transport : seul le champ de vitesse calculé à partir de l'équation d'écoulement est injecté dans l'équation de transport. On décide alors de résoudre les deux équations indépendamment. Le couplage des équations sera expliqué dans la suite.

5.2 Discrétisation de l'équation d'écoulement

On intègre l'équation 9 sur une cellule duale puis on utilise le théorème de la divergence :

$$\int_{D_j} S^{em} \frac{\partial h}{\partial t} dx - \int_{\partial D_j} K \nabla h \cdot \vec{n} d\sigma + \int_{D_j} J dx = 0$$

Approximation du terme temporel

On utilise un développement de Galerkin de h : pour un triangle T du maillage, soit N_k la fonction de base du triangle qui vaut 1 au noeud S_k . h s'écrit alors :

$$h(x, y) = h_1 N_1(x, y) + h_2 N_2(x, y) + h_3 N_3(x, y)$$

En utilisant un schéma d'Euler implicite et le développement de Galerkin de h , on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{D_j} S^{em} \frac{\partial h}{\partial t} dx &= \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \int_{D_j \cap T} S^{em} \frac{h^{n+1} - h^n}{\tau_n} dx \\ &= \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \sum_{k=1,3} \frac{h_k^{n+1} - h_k^n}{\tau_n} \int_{D_j \cap T} S^{em} N_k dx \end{aligned}$$

Puis en utilisant une condensation de masse :

$$\int_{D_j} S^{em} \frac{\partial h}{\partial t} dx = \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \sum_{k=1,3} \frac{h_k^{n+1} - h_k^n}{\tau_n} S_T^{em} |D_j|$$

- S_T^{em} est une approximation de S^{em} sur le triangle T

Approximation du flux diffusif

L'approximation du flux diffusif repose sur un schéma implicite :

$$- \int_{\partial D_j} K \nabla h \cdot \vec{n} d\sigma = - \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \int_{\partial D_j \cap T} K \nabla h^{n+1} \cdot \vec{n} d\sigma$$

D'après ce qui a été fait dans le chapitre précédent, le gradient de h sur le triangle T est donné par :

$$(\nabla h)_T = - \frac{1}{2|T|} \sum_{k=1,3} |\Sigma_k^{opp}| \vec{n}_k^{opp} h_k$$

Ainsi, on a :

$$\begin{aligned} - \int_{\partial D_j} K \nabla h \cdot \vec{n} d\sigma &= - \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \frac{1}{2} K (\nabla h^{n+1})_T \cdot \left(|\Sigma_1^{opp}| \vec{n}_1^{opp} \right) \\ &= \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \frac{1}{4|T|} \sum_{k=1,3} K (|\Sigma_k^{opp}| \vec{n}_k^{opp} h_k^{n+1}) \cdot \left(|\Sigma_1^{opp}| \vec{n}_1^{opp} \right) \end{aligned}$$

Approximation du champ de vitesse de Darcy

Une fois h calculé numériquement, on calcule le champ de vitesse de Darcy \vec{q} constant par triangle en utilisant l'équation 10 (on note \vec{q}_T^n l'approximation de \vec{q} sur le triangle T) :

$$\begin{aligned}\vec{q}_T^n &= -K\nabla h^n \\ &= \frac{1}{2|T|}K \sum_{k=1,3} |\Sigma_k^{opp}| \vec{n}_k^{opp} h_k^n\end{aligned}$$

5.3 Estimateur d'erreur a posteriori pour l'équation d'écoulement**Estimateur d'erreur spatiale**

Dans un premier temps, on définit le résidu pour chaque triangle ainsi que le saut diffusif à chaque arête du maillage primal :

$$\begin{aligned}R^n|_T &= S_T^n \frac{h^n - h^{n-1}}{\tau_n} - \text{div}(K\nabla h^n) + J_T^n \\ r^n|_E &= [K\nabla h^n] \cdot \vec{n}_E\end{aligned}$$

On définit alors des indicateurs d'erreur spatiale :

$$\begin{aligned}(\eta_R^n)^2 &= h_T^2 \|R^n\|_{L^2(T)}^2 \\ (\eta_r^n)^2 &= \frac{1}{2} \sum_{E \in T} h_E \|r^n\|_{L^2(E)}^2\end{aligned}$$

- h_T : diamètre du cercle circonscrit du triangle T
- h_E : longueur de l'arête E

Remarque : le coefficient $\frac{1}{2}$ dans la formule de l'indicateur d'erreur lié au saut diffusif permet d'avoir une seule contribution de l'arête lors du calcul de l'indicateur global.

La somme de ces indicateurs permet de définir l'estimateur d'erreur spatiale locale (sur chacun des triangles) :

$$(\eta_{sp}^n|_T)^2 = (\eta_R^n)^2 + (\eta_r^n)^2$$

Enfin, on définit l'estimateur d'erreur spatiale globale qui n'est autre que la norme euclidienne des estimateurs locaux :

$$(\eta_{sp}^n)^2 = \sum_T (\eta_{sp}^n|_T)^2 = \|(\eta_{sp}^n|_T)\|_{0,\Omega}^2$$

Estimateur d'erreur temporelle

L'estimateur d'erreur temporelle mesure l'erreur de discrétisation temporelle. Il est donc pris comme étant la différence du gradient de la solution approchée entre deux pas de temps :

$$\eta_{tm}^n = (\tau_n)^{1/2} \|K^{1/2} \nabla (h^{n+1} - h^n)\|_{0,\Omega}$$

5.4 Discrétisation de l'équation de transport

On intègre l'équation 11 sur une cellule duale puis on utilise le théorème de la divergence :

$$\int_{D_j} \omega(x) \frac{\partial C}{\partial t} dx - \int_{\partial D_j} D \nabla C \cdot \vec{n} d\sigma + \int_{\partial D_j} C \vec{q} \cdot \vec{n} d\sigma = |D_j| f_j^n$$

Approximation du terme temporel

Une discrétisation en temps semi-implicite donne :

$$\omega_j |D_j| \frac{C_j^n - C_j^{n-1}}{\tau_n} - \int_{\partial D_j} D \nabla C^n \cdot \vec{n} d\sigma + \int_{\partial D_j} C^{n-1} \vec{q} \cdot \vec{n} d\sigma = |D_j| f_j^n$$

- $\omega_j = \frac{1}{|D_j|} \int_{D_j} \omega(x) dx$
- $f_j^n = \frac{1}{|D_j|} \int_{D_j} f(x, t_n) dx$.

Approximation du terme de diffusion

Pour approcher le terme de diffusion, on utilise ce qui a été fait précédemment :

$$- \int_{\partial D_j} D \nabla C^n \cdot \vec{n} d\sigma = \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \frac{1}{4|T|} \sum_{k=1,3} D(\Sigma_k^{opp} \vec{n}_k^{opp} C_k^n) \cdot (|\Sigma_1^{opp}| \vec{n}_1^{opp})$$

Approximation du terme de convection

Pour approcher le terme de convection, on utilise le schéma de Godunov :

$$\int_{\partial D_j} C^{n-1} \vec{q} \cdot \vec{n} d\sigma \approx \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \left(|\sigma_{12}| C_{12}^{n-1} \vec{q}_T \cdot \vec{n}_{12} + |\sigma_{13}| C_{13}^{n-1} \vec{q}_T \cdot \vec{n}_{13} \right)$$

Puis on approche $C_{12}^{n-1} \vec{q}_T \cdot \vec{n}_{12}$ par :

$$C_{12}^{n-1} \vec{q}_T \cdot \vec{n}_{12} \approx C_1^{n-1} (\vec{q}_T \cdot \vec{n}_{12})^+ + C_2^n (\vec{q}_T \cdot \vec{n}_{12})^-$$

où pour $r \in \mathbb{R}$, $r^+ = \max\{0; r\}$ et $r^- = \min\{0; r\}$.

On obtient alors :

$$\begin{aligned} \int_{\partial D_j} C^{n-1} \vec{q} \cdot \vec{n} d\sigma &\approx \sum_{T \in \mathcal{V}(j)} \{ |\sigma_{12}| (\vec{q}_T \cdot \vec{n}_{\sigma_{12}})^+ + |\sigma_{13}| (\vec{q}_T \cdot \vec{n}_{\sigma_{13}})^+ \} C_1^{n-1} \\ &\quad + \{ |\sigma_{12}| (\vec{q}_T \cdot \vec{n}_{\sigma_{12}})^- \} C_2^{n-1} + \{ |\sigma_{13}| (\vec{q}_T \cdot \vec{n}_{\sigma_{13}})^- \} C_3^{n-1} \end{aligned}$$

5.5 Estimateur d'erreur a posteriori pour l'équation de transport

On définit le résidu :

$$R^n|_T = \left(f^n - \omega_T \frac{C^n - C^{n-1}}{\tau_n} + \text{div}(D \nabla C^n) - \text{div}(\vec{q}^{n-1} C^{n-1}) \right)$$

ainsi que le flux diffusif à travers les arêtes du maillage primal :

$$r^n|_E = [D \nabla C^n] \cdot \vec{n}_E$$

et le flux convectif à travers les arêtes du maillage dual :

$$z^n|_\gamma = \vec{q}^{n-1} \cdot \vec{n}_\gamma [C^{n-1}(x_i) - C^{n-1}(x_j)]$$

On définit à partir de ces trois termes des indicateurs d'erreur :

$$(\eta_R^n)^2 = h_T^2 \|R^n\|_{0,T}^2$$

$$(\eta_r^n)^2 = \frac{1}{2} \sum_{E \in T} h_E \|r^n\|_{0,E}^2$$

$$(\eta_z^n)^2 = \sum_{\gamma \in T} h_\gamma \|z^n\|_{0,\gamma}^2$$

L'estimateur d'erreur spatiale locale est alors donné par :

$$(\eta_{sp}^n|_T)^2 = (\eta_R^n)^2 + (\eta_r^n)^2 + (\eta_z^n)^2$$

et l'estimateur d'erreur spatiale globale par :

$$(\eta_{sp}^n)^2 = \|(\eta_{sp}^n|_T)\|_{0,\Omega}^2$$

On utilisera également un estimateur d'erreur temporelle (erreur entre deux itérations en temps) :

$$\eta_{tm}^n = \left\{ \frac{\tau_n}{3} \left[\|(D)^{1/2} \nabla (C^n - C^{n-1})\|_{0,\Omega}^2 + \|\text{div}(\vec{q}^{n-1} (C^{n-1} - C^n))\|_{0,\Omega}^2 \right] \right\}^{1/2}$$

5.6 Raffinement et déraffinement de maillage

Méthode de raffinement et déraffinement

On raffine les triangles T_k tels que :

$$\eta_{sp}|_{T_k} > 0.5 \times \max\{\eta_{sp}|_T; T \in \mathcal{T}\}$$

Lorsqu'un triangle a été choisi pour être raffiné, il est découpé en trois triangles en utilisant son centre de gravité.

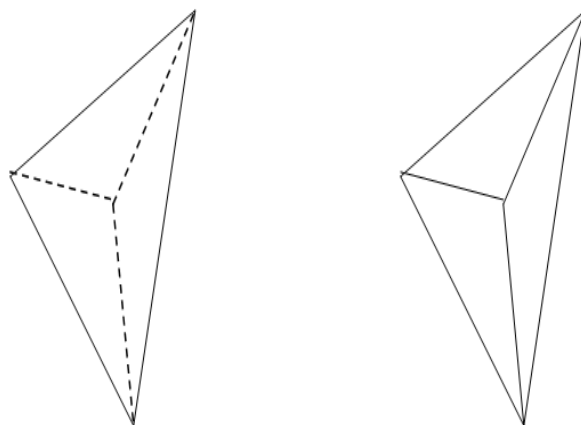


FIGURE 7 – Raffinement d'un triangle interne

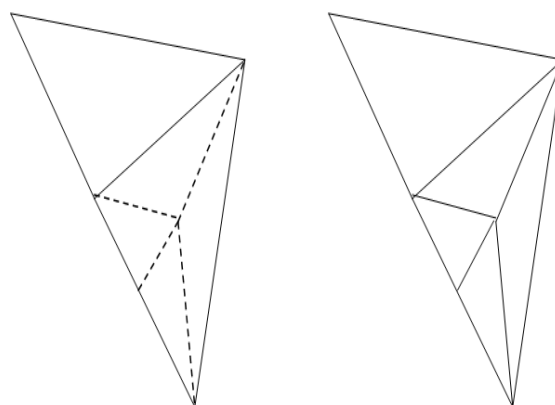


FIGURE 8 – Raffinement d'un triangle sur le bord

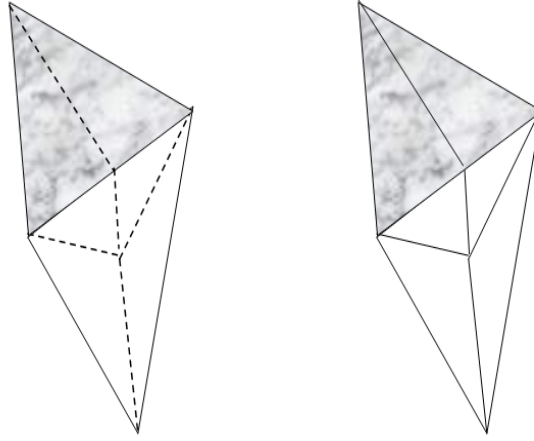


FIGURE 9 – Raffinement d'un triangle à l'interface de deux domaines

On déraffine les triangles T_k tels que :

$$\eta_{sp}|_{T_k} < 0.25 \times \frac{1}{N_T} \sum_{T \in \mathcal{T}} \eta_{sp}|_T$$

Lorsqu'un triangle a été choisi pour être déraffiné, on supprime toutes les arêtes aboutissant à un des sommets du triangle, puis on crée de nouvelles arêtes en liant le barycentre du triangle aux sommets formant le polygone qui l'entoure.

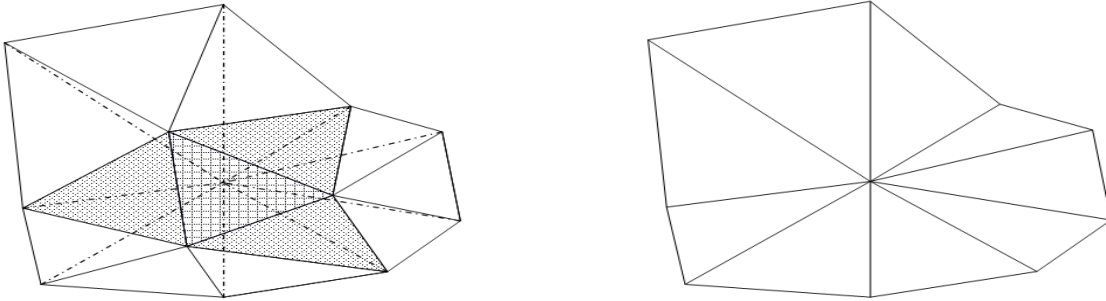


FIGURE 10 – Déraffinement d'un triangle interne

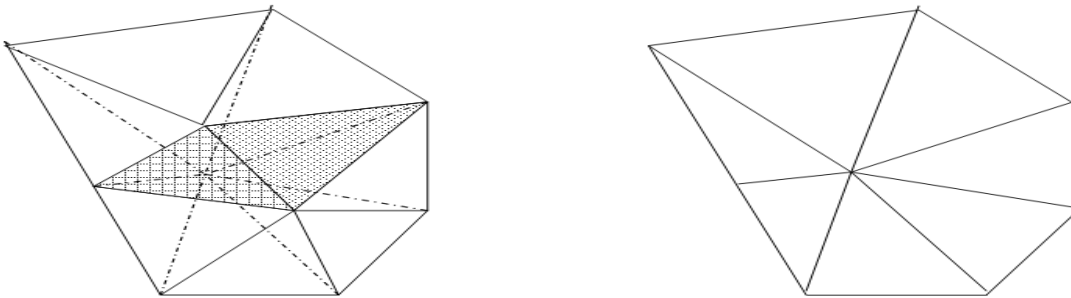


FIGURE 11 – Déraffinement d'un triangle sur le bord

Remarque

" D'après la définition de Delaunay, le cercle circonscrit d'un triangle constitué de trois points de l'ensemble de départ est vide s'il ne contient pas d'autres sommets que les siens. La condition de Delaunay affirme qu'un réseau de triangles est une triangulation de Delaunay si tous les cercles circonscrits des triangles du réseau sont vides. Ceci constitue la définition originale en deux dimensions. " (http://fr.wikipedia.org/wiki/Triangulation_de_Delaunay)

Après l'étape de raffinement-déraffinement, on fait en sorte que la triangulation soit bien une triangulation de Delaunay. En effet, le raffinement-déraffinement des triangles peut créer des triangles dont les angles sont trop petits ou trop grands, ces triangles ne respectent pas le critère des cercles circonscrits vides de la triangulation de Delaunay. Pour corriger cela, on utilise le basculement d'arête : Soient T_1 et T_2 deux triangles ne respectant pas le critère ; notons E leur arête commune, notons respectivement s_1 et s_2 les sommets des triangles T_1 et T_2 opposés à l'arête E . Le basculement d'arête consiste alors à supprimer l'arête E et à en créer une nouvelle liant s_1 et s_2 ; les deux nouveaux triangles créés par basculement d'arête respectent le critère des cercles circonscrits vides.

Amélioration du déraffinement

Après avoir calculé les estimateurs d'erreur a posteriori locale, on fait appel à la fonction `strategieRaff.f` qui, pour chaque triangle, lui attribue un indice lié au raffinement/déraffinement en fonction de la valeur de son estimateur local d'erreur.

Suite à cela, afin de permettre le bon déroulement du déraffinement, on adapte celui-ci en fonction des triangles voisins :

1. on ne déraffine pas un triangle si un des sommets de ce triangle appartient à un triangle qui doit être raffiné.
2. de même, on ne déraffine pas les voisins d'un triangle devant être déraffiné

Concernant la correction 2, lorsque deux triangles voisins devaient être déraffinés, le choix était aléatoire de savoir lequel des deux triangles devait être déraffiné et pas l'autre. En effet, voici l'algorithme qui était utilisé :

Pour $i = 1$ à `nombre_de_triangle`

- Si `indice_raff(i) < 0` alors pour $j = 1$ à 3 (boucle sur les triangles voisins)
 - $k =$ voisin numéro j du triangle numéro i
 - Si `indice_raff(k) < 0` et si k est différent de i alors `indice_raff(k) = 0`
- Fin si

Fin pour

Le triangle ayant le plus petit indice était déraffiné en priorité. Désormais, par un tri des estimateurs en amont, lorsque deux triangles voisins doivent être déraffinés, on donne priorité de déraffinement au triangle ayant le plus petit estimateur d'erreur a posteriori.

Cette modification de la stratégie de déraffinement a été testée sur un exemple de couplage transport-écoulement permanent. Le domaine de calcul est un rectangle hétérogène $[0, 50] \times [0, 20]$: la porosité, le coefficient de diffusion, le coefficient d'emménagement sont différents dans $[0, 20] \times [0, 20]$ et $[20, 50] \times [0, 20]$. Pour l'équation d'écoulement permanent,

les conditions aux limites sont les suivantes : potentiel égal à 30 sur le bord gauche, potentiel égal à 10 sur le bord droit. La solution pour l'équation d'écoulement est donc un plan. Pour l'équation de transport, un flux d'activité nul est imposé sur tous les bords. Au temps initial, une certaine concentration de soluté est déposée au point (10,10).

Des calculs ont été effectués avant puis après cette modification sur la priorité de déraffinement. Les figures obtenues suite à ces tests sont mises en annexe.

Les tableaux suivants donnent, pour chaque temps physique simulé, le nombre de noeuds du maillage, la valeur de l'estimateur d'erreur a posteriori spatiale et le temps CPU mis pour effectuer le calcul.

Résultats obtenus SANS amélioration du déraffinement

temps physique	nombre de noeuds	erreur spatiale	temps CPU
0.05	1115	27.6	1.14E+01
0.1	1194	15	2.56E+01
0.5	1319	2.64	1.43E+02
1	1251	1.31	3.12E+02
3	1952	0.224	1.12E+03

Résultats obtenus AVEC amélioration du déraffinement

temps physique	nombre de noeuds	erreur spatiale	temps CPU
0.05	561	29.7	6.29
0.1	611	16.4	1.31E+01
0.5	881	2.78	8.74E+01
1	861	1.29	2.02E+02
3	1299	0.257	8.80E+02

Remarques

1. Les triangles ayant les plus petites estimations d'erreur locale sont déraffinés en priorité, on donne ainsi une "base mathématique" à la stratégie de déraffinement et une meilleure qualité au maillage. Le nombre de nœuds du maillage est bien inférieur après modification. Notons que pour le temps physique simulé égal à 1, le nombre de nœuds diminue avant ou après modification, ceci étant dû au fait que le pulse de soluté est en train de changer de domaine.
2. Le temps CPU diminue lui aussi après modification. Ceci n'est pas surprenant sachant que le temps CPU est grandement lié au nombre de nœuds du maillage et à la qualité du maillage.
3. Bien que les nombres de noeuds aient diminué quasiment de moitié après modification, les estimations d'erreur a posteriori spatiale restent du même ordre de grandeur. L'objectif est d'avoir un maillage qui s'adapte correctement à la solution, et en ce sens, et au vue des figures en annexe, il apparait que la modification apportée aide à l'optimisation de la stratégie de raffinement/déraffinement.

5.7 Algorithme de résolution

L'algorithme présenté est implémenté aussi bien pour le problème d'écoulement que le problème de transport. Il est repris du rapport de mon prédécesseur.

Algorithme

N_{sp}/N_{tm} : nombres maximaux de raffinements en espace/temps

$t_n = t_{n-1} + \tau$

Tol_{sp}^n : tolérance spatiale fixée par l'utilisateur

Tol_{tm}^n : tolérance temporelle fixée par l'utilisateur

n_{sp} : nombre de raffinements en espace effectués

n_{tm} : nombre de raffinements en temps effectués

- Tant que $t_n < T_f$
 - Tant que $n_{sp} < N_{sp}$ et que $(\eta_{sp}^n)^2 > Tol_{sp}^n$
 - Résolution du système linéaire
 - Calcul des tolérances spatiale et temporelle
 - Calcul de l'estimateur d'erreur spatiale η_{sp}^n
 - Si $\eta_{sp}^n > Tol_{sp}^n$
 - Raffinement/déraffinement en espace ; $n_{sp} = n_{sp} + 1$
 - Fin si
 - Fin tant que $n_{sp} < N_{sp}$ et que $(\eta_{sp}^n)^2 > Tol_{sp}^n$
 - Calcul de l'estimateur d'erreur temporelle
 - Si $n_{tm} < N_{tm}$ et $\eta_{tm}^n > Tol_{tm}^n$
 - Raffinement en temps ; $\tau = \tau/2$; $n_{tm} = n_{tm} + 1$
 - Sinon si $\eta_{tm}^n < Tol_{tm}^n$
 - Pas de temps suivant avec accélération : $\tau = 2\tau$; $t_{n-1} = t_n$; $n_{tm} = n_{tm} - 1$
 - Sinon
 - Pas de temps suivant par défaut : $t_{n-1} = t_n$
 - Fin si
 - $t_n = t_{n-1} + \tau$
 - Fin tant que $t_n < T_f$
-

5.8 Méthodologie de résolution

Je rappelle que l'on dispose d'une équation d'écoulement transitoire couplée à une équation de transport. Résoudre le système revient à, à chaque pas de temps, résoudre l'équation d'écoulement transitoire pour obtenir la charge hydraulique, calculer la vitesse de Darcy du fluide à partir de la charge obtenue, injecter la vitesse de Darcy dans l'équation de transport et résoudre cette dernière. Il est important de remarquer que le résultat d'un calcul de transport à un temps t donné n'influe pas sur le résultat d'un calcul d'écoulement au temps $t+1$: l'équation d'écoulement est découplée de celle de transport.

Le code Melodie permet déjà de faire la chose suivante : en exécutant une première fois Melodie, on effectue un calcul d'écoulement permanent avec adaptation de maillage sans déraffinement, ce pour garder le plus d'informations possible. On obtient en fin de simulation un maillage M et un fichier contenant le potentiel en chacun des noeuds. En exécutant Melodie une seconde fois, on effectue un calcul de transport en lisant le potentiel sur le fichier provenant du calcul d'écoulement permanent. Le calcul de transport se fait sur maillage adaptatif en partant du maillage M , sans déraffiner les noeuds de ce maillage.

Pour le couplage d'équations d'écoulement transitoire et de transport, chacune des équations nécessite pour sa résolution sa propre adaptation dynamique de maillage. L'objectif était de trouver un moyen simple permettant de coupler les deux équations et donc, leurs affinages.

Compte tenu du fait que l'équation d'écoulement transitoire est découplée de celle de transport et que l'exécution de Melodie permet une procédure d'adaptation de maillage pour un type de calcul à la fois, nous avons décidé d'effectuer indépendamment les deux calculs : on effectue d'abord le calcul d'écoulement transitoire en écrivant sur un fichier texte le potentiel en chacun des noeuds du maillage pour des temps choisis ; on effectue ensuite le calcul de transport en lisant à chacun de ces temps le potentiel sur le fichier texte.

Sachant que Melodie nous permet de choisir le maillage initial, pour effectuer le calcul de transport, il faut le maillage donnant le maximum d'informations provenant du calcul d'écoulement. C'est en ce sens que le déraffinement n'est jamais utilisé lors du calcul d'écoulement transitoire et que le maillage obtenu en fin de ce dernier constitue le maillage initial du calcul de transport.

La méthodologie détaillée est donc la suivante :

1. Calcul d'écoulement permanent sur un maillage M_0 avec comme conditions aux limites les conditions aux limites du calcul d'écoulement transitoire à $t = 0$;
2. Calcul d'écoulement transitoire avec comme conditions initiales le résultat du calcul d'écoulement permanent ; le calcul est fait sur maillage adaptatif à partir du maillage M_0 , seul le raffinement est utilisé, on ne déraffine jamais ; on obtient un maillage M_1 en fin de simulation ;
3. Calcul d'écoulement permanent sur le maillage M_1 avec comme conditions aux limites les conditions aux limites du calcul d'écoulement transitoire à $t = 0$;
4. On effectue à nouveau le même calcul d'écoulement transitoire qu'à l'étape 2 mais sur maillage fixe M_1 ; on obtient un fichier texte contenant à des temps choisis, le potentiel en chacun des noeuds du maillage ;
5. Calcul de transport avec en entrée le fichier texte du calcul d'écoulement transitoire (à chaque pas de temps, le programme vient lire les valeurs de potentiel en chacun des

noeuds); le raffinement/déraffinement est utilisé à partir du maillage M_1 , cependant on précise au programme que l'on ne veut pas détruire les nœuds du maillage M_1

Remarques

1. Le premier calcul d'écoulement est nécessaire pour obtenir une condition initiale pour le calcul d'écoulement transitoire, par défaut, le programme utilise un potentiel nul; ce calcul est cohérent avec le reste dans la mesure où la condition initiale utilisée pour le calcul d'écoulement transitoire reste dans l'espace de solution (de même pour la troisième étape de calcul où l'on refait un calcul d'écoulement permanent).
2. Pour le premier calcul d'écoulement transitoire, on ne déraffine jamais, ceci pour avoir le maillage le plus précis possible pour le calcul de transport, et ainsi, garder le plus d'informations possible.
3. Le deuxième calcul d'écoulement transitoire (qui est donc le même que le premier mais sans adaptation de maillage et sur maillage initial différent) semblerait inutile sur le plan théorique; cependant il est nécessaire question pratique pour le calcul de transport qui suivra : le calcul se faisant sur maillage fixe, le fichier texte contient, pour chaque temps, le même nombre de valeurs de potentiel (donc égal au nombre de noeuds), ceci permettra la lecture du potentiel lors du calcul de transport.
4. Compte tenu de la remarque 3., il est important de ne pas supprimer les nœuds du maillage M_1 ; ainsi si le maillage M_1 dispose de 1000 nœuds, lorsque j'effectue mon calcul de transport, je précise que la procédure de raffinement/déraffinement ne doit pas supprimer les nœuds ayant un indice inférieur à 1001; pour un pas de temps donné, les valeurs de potentiel des nœuds ayant un indice inférieur à 1001 seront lues sur le fichier texte, les valeurs de potentiel des autres nœuds seront obtenues par interpolation.

5.9 Résultats

La simulation est faite sur un domaine rectangulaire $[0, 60] \times [0, 30]$ et sur une période simulée de 20 ans.

Pour le calcul d'écoulement transitoire :

sur la section $\{x \in [27.5, 32.5]; y = 30\}$, j'impose un potentiel constant égal à 100 ; sur les sections $\{x = 0; y \in [14.5, 15.5]\}$ et $\{x = 60; y \in [14.5, 15.5]\}$, j'impose un débit sortant de la manière suivante : sur le bord gauche, le débit est égal à $4000m^3$ au temps initial et décroît linéairement jusqu'à atteindre 0 à $t = 10ans$ et est nul de $t = 10ans$ à $t = 20ans$; sur le bord droit, le débit est nul depuis le temps initial jusqu'à $t = 10ans$ où il est égal à $4000m^3$ puis décroît linéairement jusqu'à atteindre 0 à $t = 20ans$.

Pour le calcul de transport, un dépôt est mis en (5, 15) à l'instant initial. Un flux d'activité nul est imposé sur tous les bords.

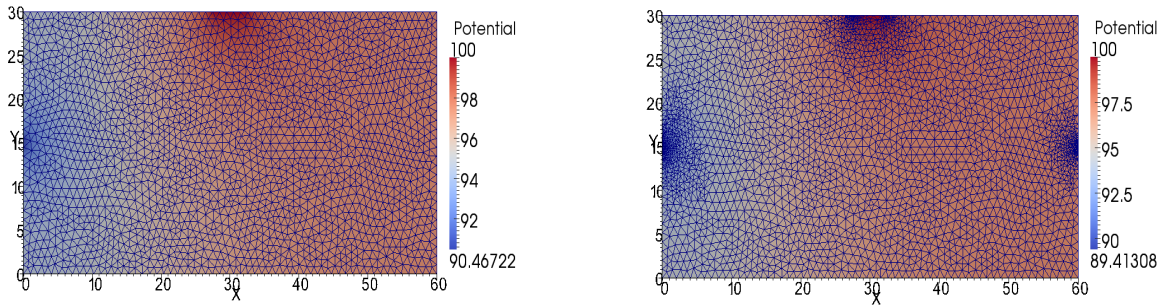


FIGURE 12 – Ecoulement permanent sur maillage M_0 et M_1

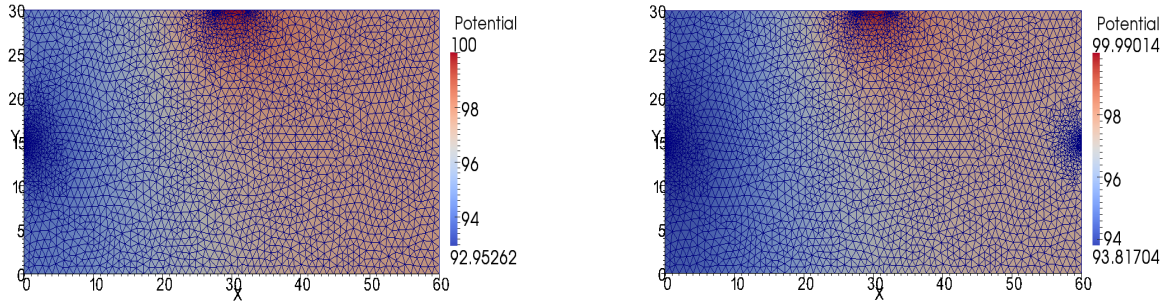


FIGURE 13 – Ecoulement transitoire sur maillage adaptatif - à 10 et 20 ans

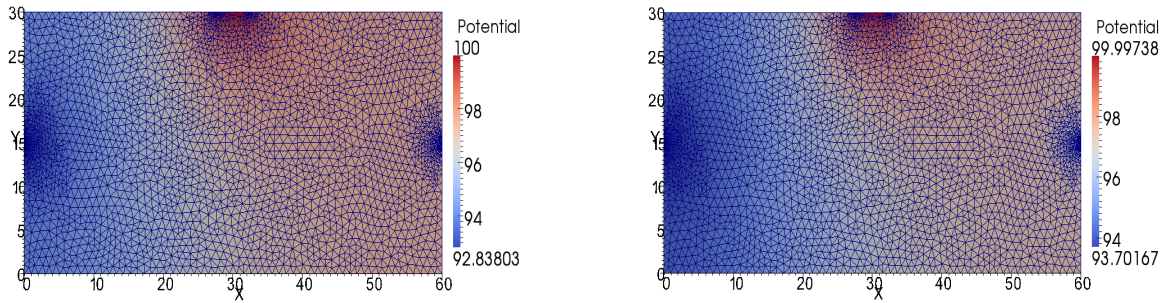


FIGURE 14 – Ecoulement transitoire sur maillage fixe M_1 - à 10 et 20 ans

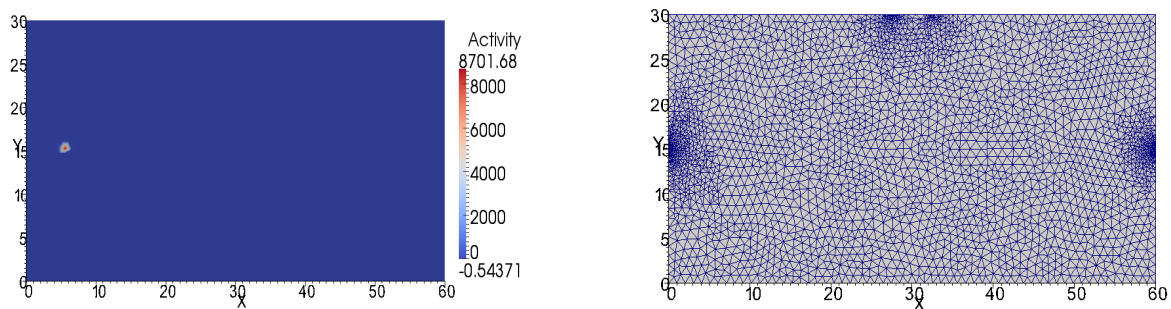


FIGURE 15 – Transport - à l'instant initial

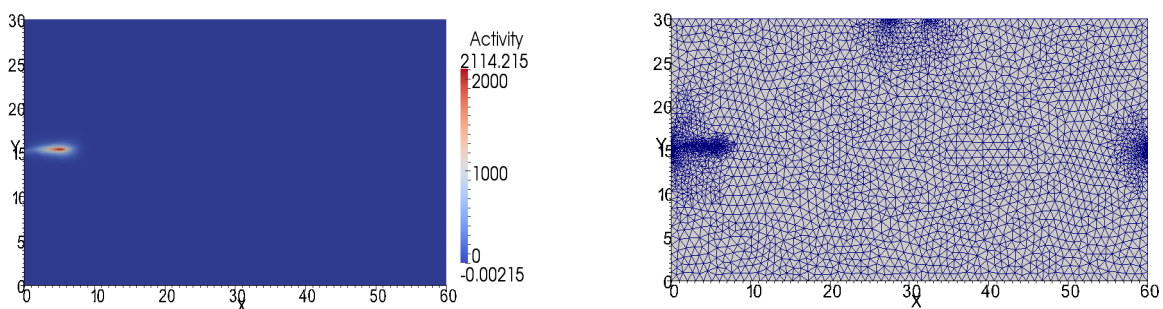


FIGURE 16 – Transport - à 1 an

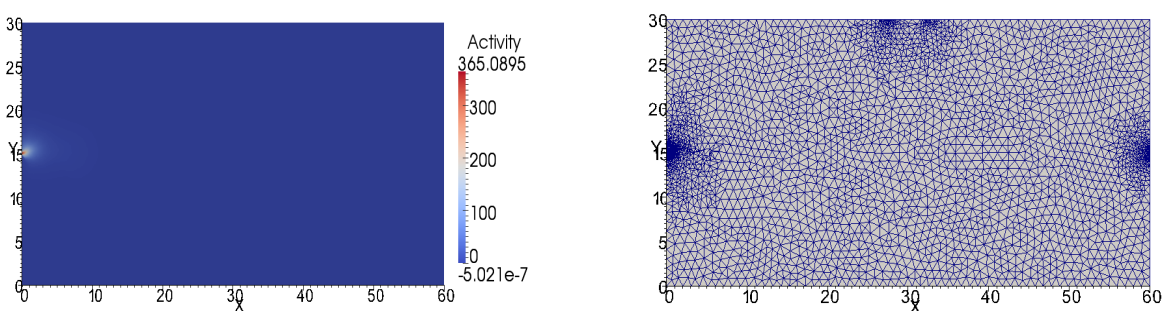


FIGURE 17 – Transport - à 10 ans

6 Détermination de tolérances d'erreur

Je rappelle l'utilité de la tolérance : on dispose d'une équation d'écoulement ou de transport. Pour un pas de temps donné, on résout l'équation, on calcule ensuite une estimation d'erreur a posteriori globale (sur tout le domaine de calcul). Si cette estimation est supérieure à la tolérance, on raffine le maillage (en utilisant des estimateurs d'erreur a posteriori locale définis sur chaque maille) et on recommence le calcul avec le même pas de temps. Si cette estimation est inférieure à la tolérance, on passe au pas de temps suivant.

Le choix de la tolérance est une difficulté en soi : si celle-ci est choisie trop petite, beaucoup d'adaptations de maillage vont être faites sans pour autant diminuer de manière notable l'erreur globale. Au contraire, si la tolérance choisie est trop grande, le raffinement du maillage sera insuffisant et il y aura manque d'information. La difficulté repose sur le fait que, sans calcul préalable, on ne peut connaître l'ordre de grandeur de l'erreur globale liée à une équation donnée.

De plus, le code Melodie donne à l'utilisateur le choix quant aux paramètres utilisés pour l'adaptation de maillage : surface minimale et maximale des mailles, nombre maximal d'adaptations pour un pas de temps avant de passer au pas de temps suivant, tolérance pour l'estimateur d'erreur, fréquence d'appel aux procédures de raffinement et déraffinement. On se retrouve alors avec un grand nombre de paramètres sur lesquels on peut jouer sans vraiment savoir quelles valeurs leur attribuer pour obtenir un résultat "précis" en un temps de calcul qui ne soit pas démesuré.

Travaillant sur des problèmes dont la solution exacte n'est pas connue, il est plus difficile de choisir ces paramètres. L'objectif est donc de trouver de petites astuces permettant un résultat précis en un temps de calcul convenable et d'éviter, par exemple, de laisser un programme tenter longuement d'atteindre une précision qu'il n'atteindra jamais.

J'illustre la difficulté du choix de la tolérance avec des cas en 1D puis en 2D.

6.1 Cas analytiques 1D

Soit $\Omega = [0, 1]$ et soit le problème du laplacien :

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f \text{ dans } \Omega \\ u(0) &= u(1) = 0 \end{aligned}$$

L'intervalle $[0, 1]$ est initialement découpé en 10 sous-intervalles. Le raffinement consiste ici à découper en deux les sous-intervalles. Le déraffinement n'est pas utilisé. Les estimateurs d'erreur a posteriori et le détail sur la stratégie de raffinement utilisés sont présentés dans le chapitre Complément. L'implémentation a été effectuée sous Matlab.

Premier test

f est choisie de sorte que la solution exacte du problème soit :

$$u = (x - x^2) \times \exp(3x)$$

Les figures suivantes montrent le raffinement de maillage et la convergence de la solution numérique vers la solution exacte :

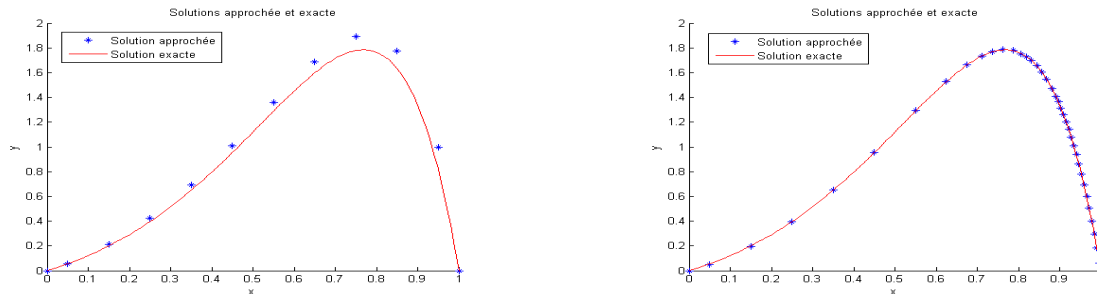


FIGURE 18 – Solution numérique et approchée - itérations 1 et 5

Plusieurs calculs sont effectués en changeant la valeur de la tolérance. Le tableau suivant donne l'erreur en norme L2 entre la solution exacte et la solution approchée, le nombre de noeuds, le nombre d'itérations et le temps CPU lorsque la tolérance de l'estimateur d'erreur a posteriori est atteint :

tolérance	erreur L2 finale	nombre final de noeuds	nombre d'itérations	temps CPU
1	1.E-03	954	10	17.01
0.8	8.E-04	1852	11	119.0
0.5	3.E-04	3634	12	847.3

Les figures suivantes représentent respectivement l'erreur en norme L2 en fonction du nombre d'itération et l'estimateur d'erreur a posteriori en fonction du nombre de noeuds :

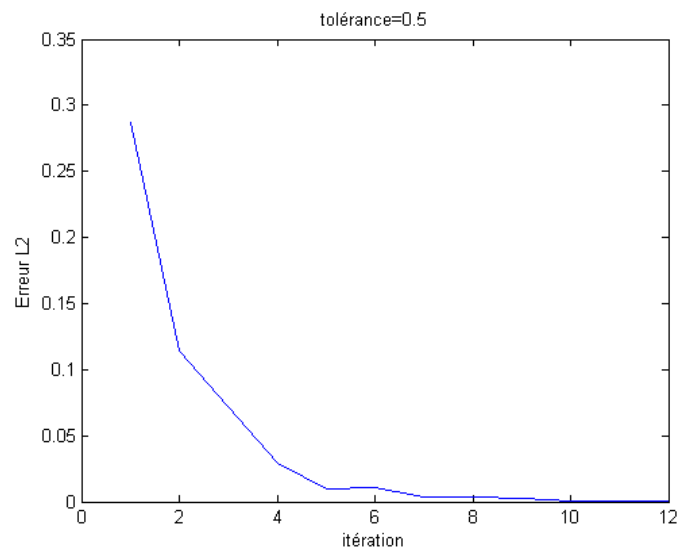


FIGURE 19 – Erreur en norme L2

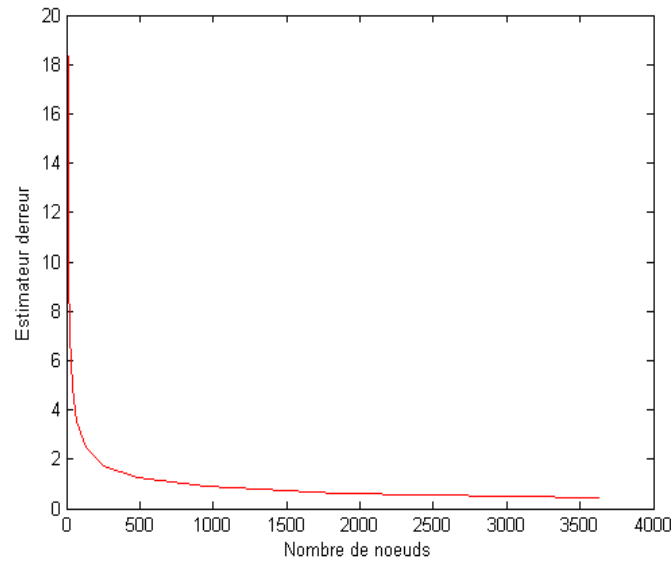


FIGURE 20 – Estimateur d'erreur a posteriori

Remarques

1. On constate qu'au bout d'un certain nombre d'itérations, le gain de précision est négligeable.
2. En choisissant une tolérance plus petite, on diminue certes l'erreur en norme L2 entre la solution exacte et la solution approchée mais on augmente le temps CPU mis pour effectuer le calcul : en effet, en passant d'une tolérance de 0.8 à une tolérance de 0.5, l'erreur L2 reste du même ordre de grandeur, le temps CPU est lui multiplié environ par 7.

Deuxième test

f est choisie de sorte que la solution exacte du problème soit :

$$u = (x - x^2) \times \cos(4\pi x)$$

Les figures suivantes montrent le raffinement de maillage et la convergence de la solution numérique vers la solution exacte :

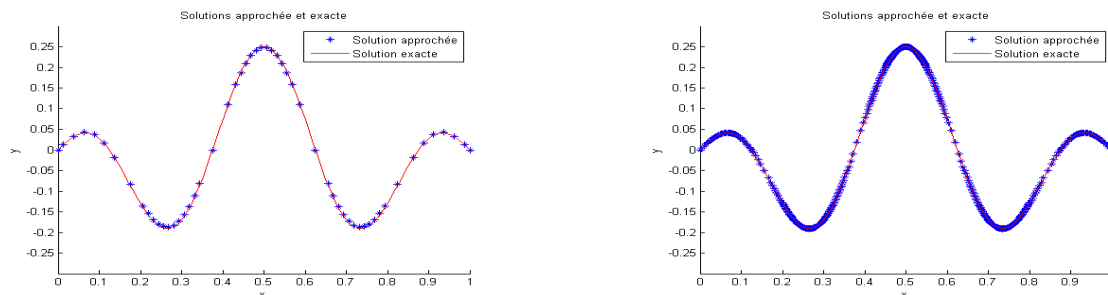


FIGURE 21 – Solution numérique et approchée - itérations 4 et 8

Plusieurs calculs sont effectués en changeant la valeur de la tolérance :

tolérance	erreur L2 finale	nombre final de noeuds	nombre d'itération	temps CPU
1	1.5E-03	526	8	11.87
0.9	1.6E-03	1968	9	27.16
0.5	6.E-04	1842	10	123.2

Remarque

Dans le premier test, il faut choisir une tolérance égale à 1 pour que l'erreur L2 entre la solution exacte et la solution approchée soit en dessous de $1.E-03$. Dans ce deuxième test, il faut que la tolérance soit égale à 0.5 : ceci met en avant le fait que pour atteindre une précision donnée, ici en norme L2, il faut changer la tolérance de l'estimateur d'erreur en passant d'un exemple à un autre.

6.2 Cas analytiques 2D

Soit $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$. Je traite ici le problème du laplacien en 2D.

Premier test

La solution exacte est :

$$u(x, y) = \sin((1-x)(1-y)) + (1-x)^3(1-y)^2$$

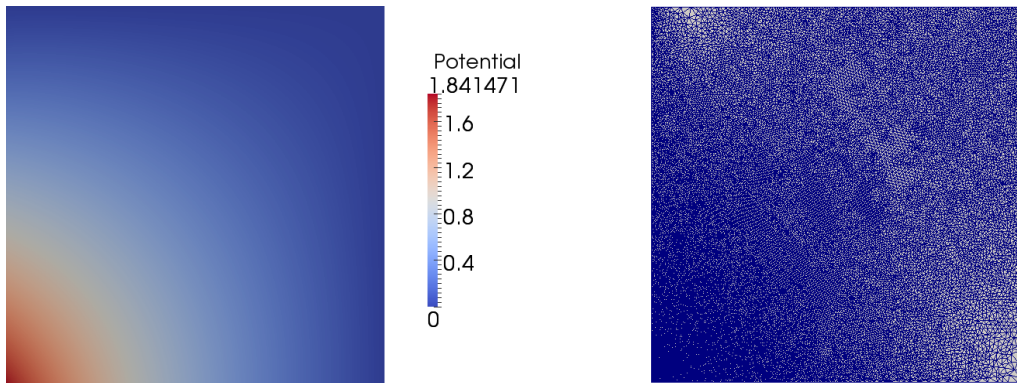


FIGURE 22 – Solution numérique et maillage adapté - itération 30

La courbe suivante représente l'estimateur d'erreur a posteriori en fonction du nombre de noeuds du maillage :

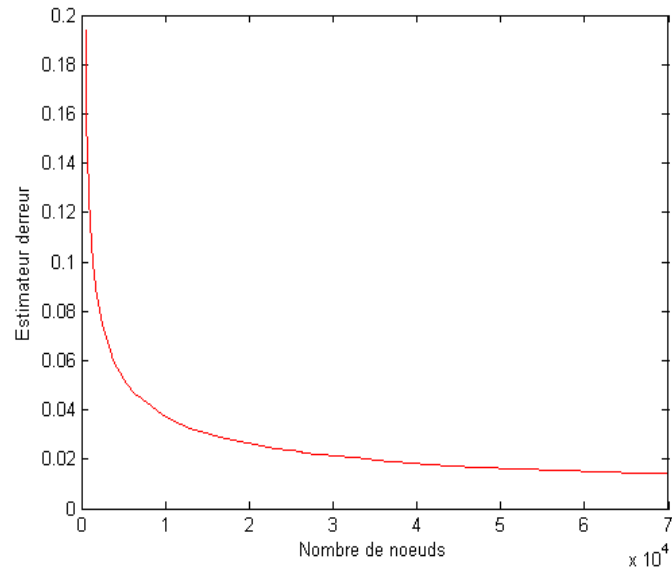


FIGURE 23 – Estimateur d'erreur a posteriori

Deuxième test

La solution exacte est :

$$u(x, y) = \exp(-200(x - 0.5)^2 - 200(y - 0.5)^2)$$

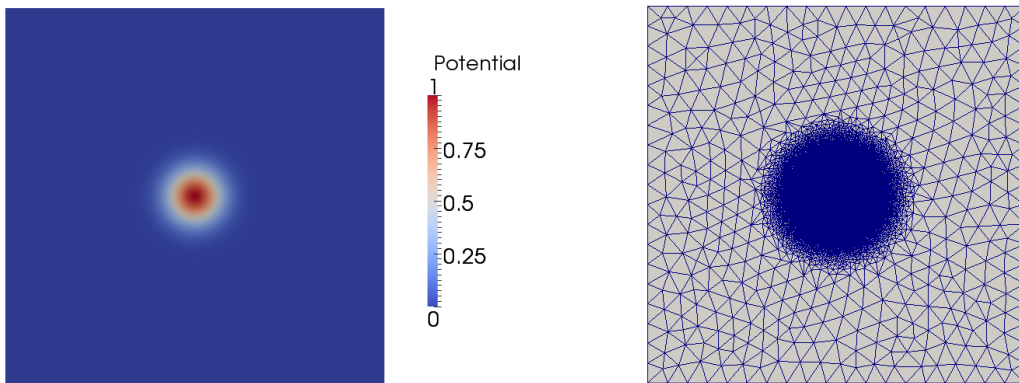


FIGURE 24 – Solution numérique et maillage - itération 30

De même, est tracé l'estimateur d'erreur a posteriori en fonction du nombre de noeuds du maillage :

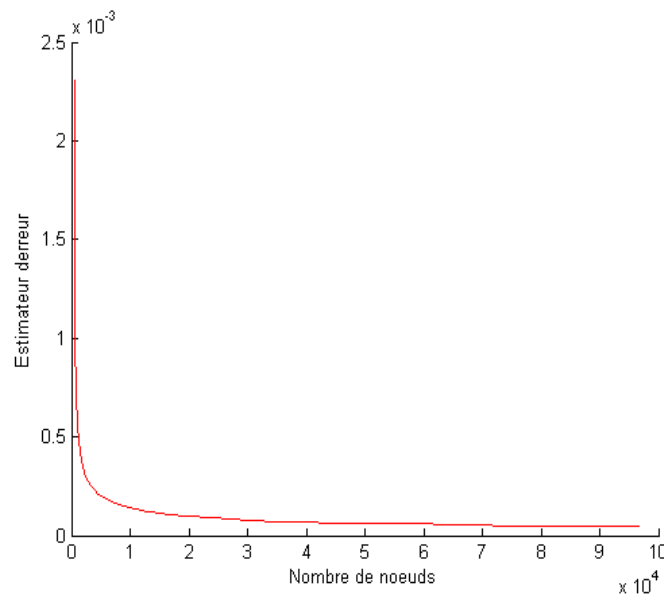


FIGURE 25 – Estimateur d'erreur a posteriori

Remarque

Ces différents tests nous montrent que la courbe de l'estimateur d'erreur a posteriori en fonction du nombre de points a la même allure. La courbe décroît rapidement avant de se rapprocher de son asymptote horizontale et d'y tendre lentement. On parlera de "rapprochement de l'asymptote" bien que l'estimateur d'erreur doit en théorie tendre vers 0. En effet, certaines barrières numériques empêchent cette convergence vers 0 comme, entre autres, la surface minimale des triangles fixée par l'utilisateur, le nombre maximal d'itérations par pas de temps. Selon les cas, l'asymptote horizontale de l'estimateur d'erreur est différente. Afin de vérifier ce comportement, j'effectue d'autres tests.

6.3 Cas d'écoulement permanent 2D

Je travaille maintenant sur l'équation d'écoulement en régime permanent. Pour ces différents tests, seules les conditions aux limites changent.

Le domaine de calcul est un rectangle $[0, 60] \times [0, 30]$. Voici les différents cas :

- Cas 1 : potentiel égal à 30 sur $\{x = 0; y \in [14.5, 15.5]\}$ et égal à 10 sur $\{x = 60; y \in [14.5, 15.5]\}$
- Cas 2 : potentiel égal à 30 sur $\{x = 0; y \in [10, 20]\}$ et égal à 10 sur $\{x = 60; y \in [10, 20]\}$
- Cas 3 : potentiel égal à 50 sur $\{x = 0; y \in [14.5, 15.5]\}$ et égal à 5 sur $\{x = 60; y \in [14.5, 15.5]\}$
- Cas 4 : potentiel égal à 30 sur $\{x = 0; y \in [14.5, 15.5]\}$ et débit égal à 2000 sur $\{x = 60; y \in [14.5, 15.5]\}$
- Cas 5 : potentiel égal à 30 sur $\{x = 0; y \in [10, 20]\}$ et débit égal à 2000 sur $\{x = 60; y \in [10, 20]\}$
- Cas 6 : potentiel égal à 30 sur $\{x = 0; y \in [14.5, 15.5]\}$ et débit égal à 8000 sur $\{x = 60; y \in [14.5, 15.5]\}$
- Cas 7 : potentiel égal à 30 sur $\{x = 0; y \in [14.5, 15.5]\}$, égal à 10 sur $\{x = [29.5, 31.5]; y = 0\}$ et débit égal à 2000 sur $\{x = 60; y \in [14.5, 15.5]\}$
- Cas 8 : potentiel égal à 50 sur $\{x = 0; y \in [14.5, 15.5]\}$ et sur $\{x = 60; y \in [14.5, 15.5]\}$, égal à 10 sur $\{x = [29.5, 31.5]; y = 0\}$

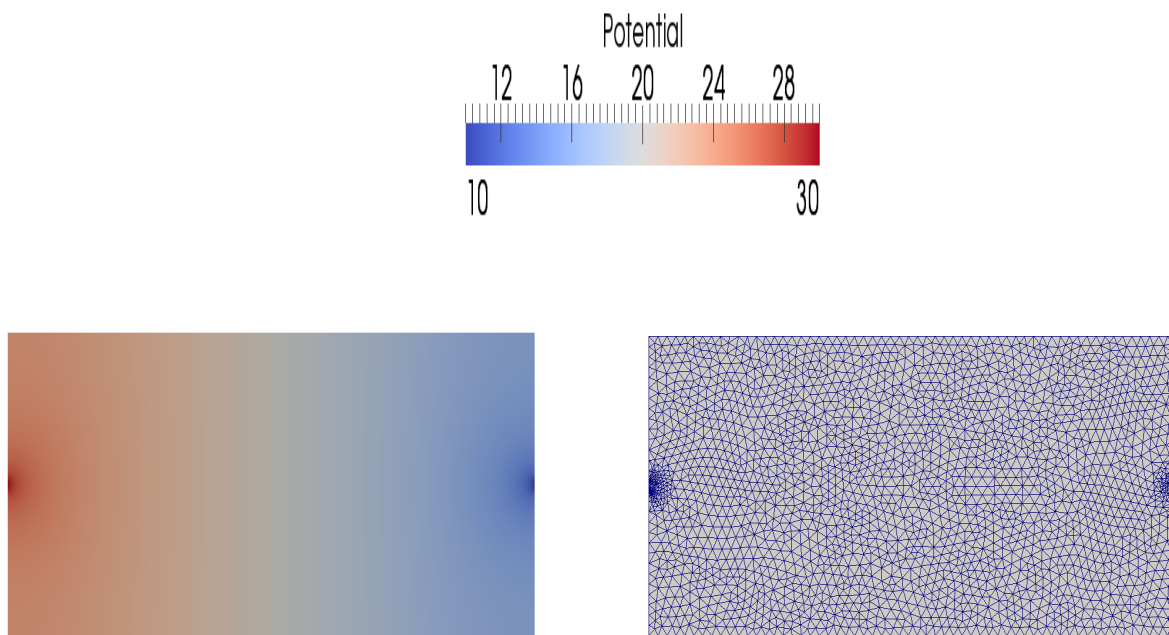


FIGURE 26 – Cas 1 - Solution numérique et maillage adapté - itération 20

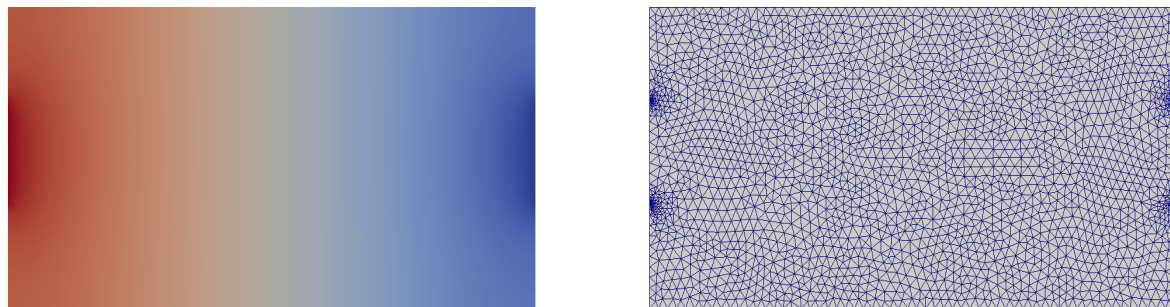


FIGURE 27 – Cas 2 - Solution numérique et maillage adapté - itération 20

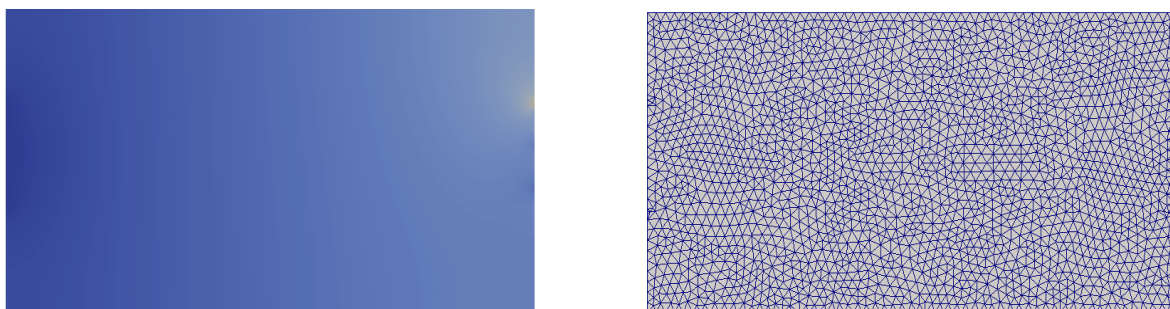


FIGURE 28 – Cas 5 - Solution numérique et maillage adapté - itération 20

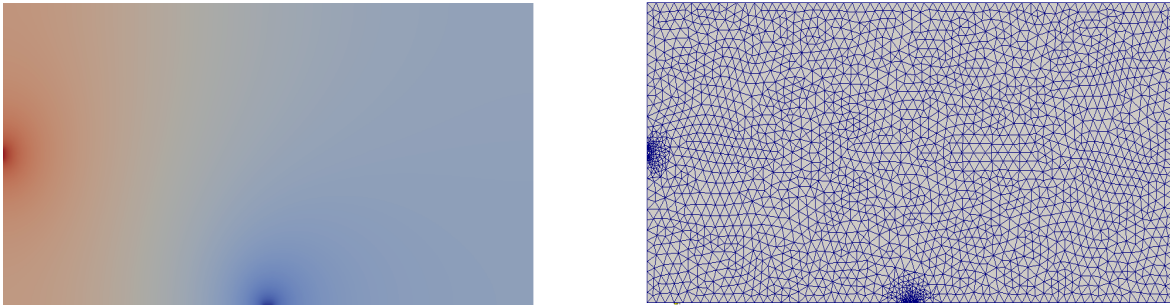


FIGURE 29 – Cas 7 - Solution numérique et maillage adapté - itération 20

Pour ces différents tests, aucune tolérance pour l'estimateur n'est prise en compte et 100 itérations d'adaptation de maillage sont effectuées. Les courbes suivantes représentent l'estimateur d'erreur a posteriori en fonction du nombre d'itération pour les différents cas :

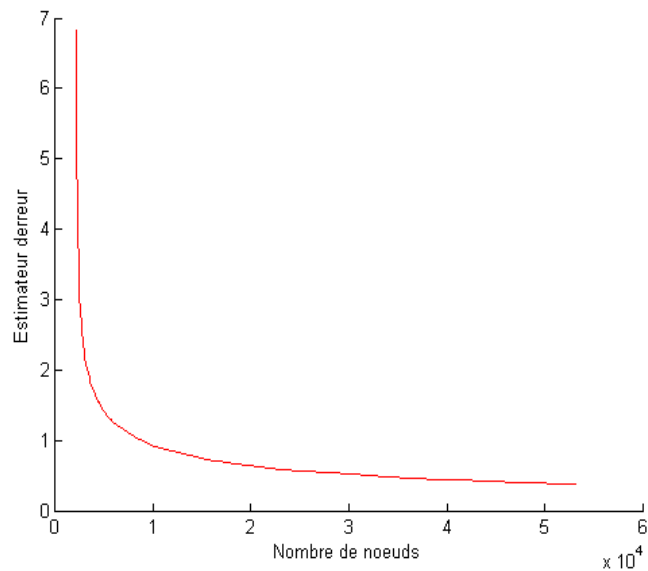


FIGURE 30 – Cas 1 - Estimateur d'erreur a posteriori

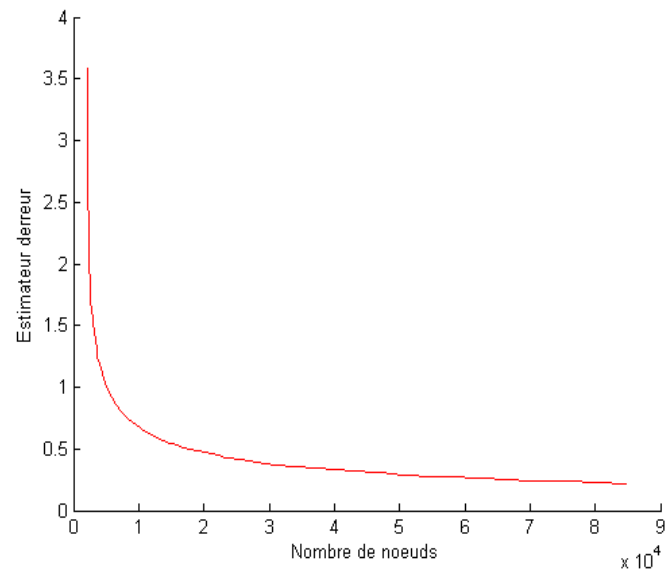


FIGURE 31 – Cas 2 - Estimateur d'erreur a posteriori

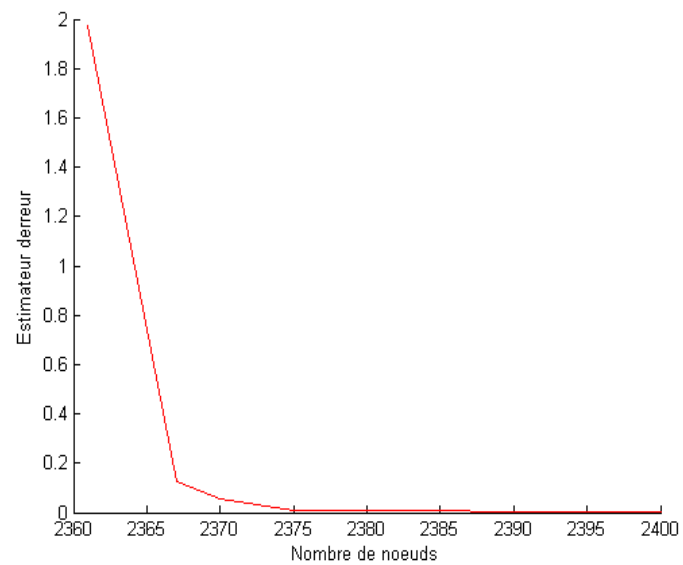


FIGURE 32 – Cas 5 - Estimateur d'erreur a posteriori

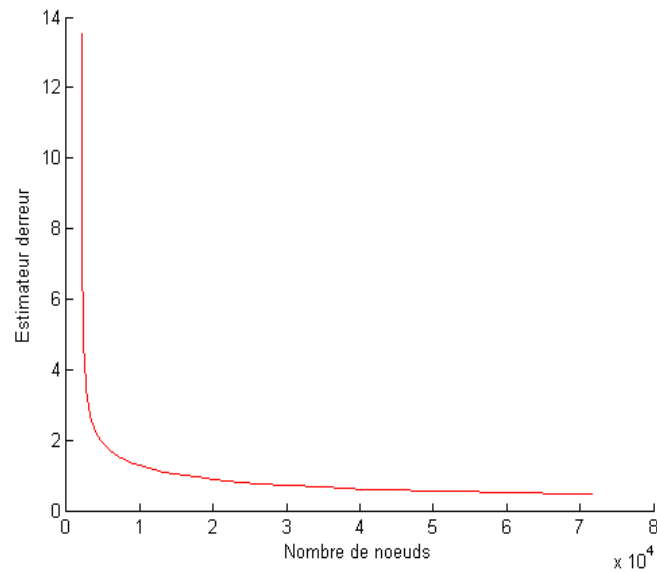


FIGURE 33 – Cas 7 - Estimateur d'erreur a posteriori

Remarques

Une nouvelle fois, ces tests où sont imposés des potentiels et des flux montrent que le tracé de l'estimateur d'erreur en fonction du nombre de noeuds a toujours la même allure.

Le fait que l'asymptote de l'estimateur d'erreur varie selon les cas est ce qui rend le choix de la tolérance difficile. Ces tests mettent en avant deux phases principales :

- l'estimateur d'erreur décroît rapidement, le nombre de noeuds est peu important (et par conséquent le temps CPU mis pour faire le calcul l'est aussi)
- l'estimateur d'erreur tend asymptotiquement vers 0 (ou plus exactement vers une certaine valeur proche de 0), le nombre de noeuds augmente fortement

6.4 Méthode proposée

Pour remédier au problème du choix de la tolérance, plutôt que de comparer l'estimateur d'erreur a posteriori à une tolérance fixée en amont du calcul, je propose de regarder la pente de la tangente à la courbe représentant l'estimateur d'erreur en fonction du nombre de noeuds. En effet, l'estimateur d'erreur suivant toujours la même courbe, il est possible d'arrêter le calcul lorsque l'estimateur s'est rapproché de son asymptote, donc lorsque les variations deviennent faibles. Comme vu précédemment, selon les cas, l'asymptote de l'estimateur d'erreur peut être $y = 10^{-3}$, $y = 10^{-4}$, $y = 10^{-5}$ ect. La méthode proposée semblerait convenir à tous les cas.

On conserve tout de même des barrières pour limiter les itérations d'adaptation de maillage et ainsi, éviter de très longs calculs. On arrête alors le calcul si :

- le nombre maximal d'itération par pas de temps fixé par l'utilisateur est atteint
- l'estimateur d'erreur a posteriori se met à osciller

Cette méthode a été testée sur les cas analytiques 2D présentés précédemment. Pour ces tests, le calcul s'arrête lorsque la pente de la tangente à la courbe représentant l'estimateur d'erreur en fonction du nombre de noeuds est inférieure à 0.5.

Pour le premier test analytique en 2D, la méthode permet au calcul de s'arrêter lorsque l'estimateur a atteint la zone en bleu sur la figure :

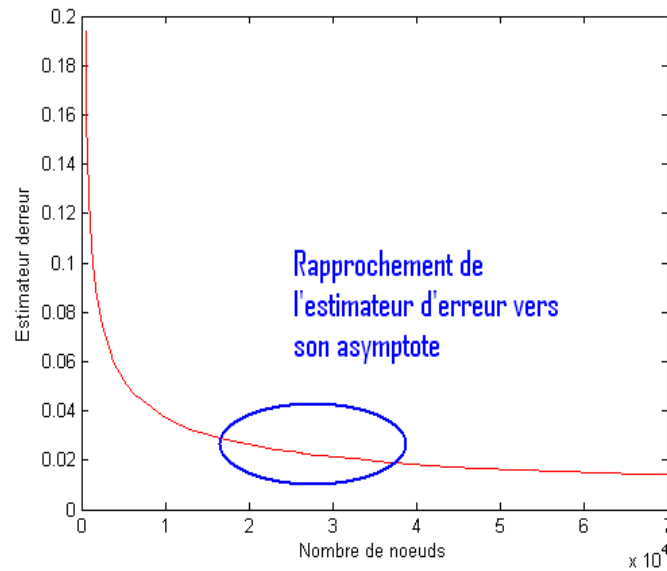


FIGURE 34 – Cas analytique 2D - Estimateur d'erreur a posteriori

A titre comparatif, pour chacun des deux cas analytiques 2D, un premier calcul est lancé en imposant 40 itérations. Un deuxième calcul est ensuite lancé où est utilisé un critère d'arrêt sur la pente de la tangente à la courbe de l'estimateur d'erreur. Le tableau suivant présente les temps CPU mis pour effectuer les calculs et la précision atteinte :

	Cas 1	Cas 2
CPU avec 40 itérations(sec)	340	572
CPU avec critère sur la pente (sec)	112 (36 it)	207 (36 it)
Précision atteinte avec 40 itérations	1.40E-02	4.42E-05
Précision atteinte avec critère sur la pente	1.69E-02	5.86E-05

Cette méthode permet donc d'optimiser le rapport temps CPU/précision.

7 Conclusion

En premier lieu, j'ai pu étudié en détail différentes méthodes de volumes finis et plus précisément les estimateurs d'erreur a posteriori. La chose que j'estime la plus importante que j'ai apprise durant ce stage est le fait de savoir entrer dans un code industriel et le déboguer. J'ai compris, ou plutôt, on m'a fait comprendre que rarement un code industriel fonctionnerait parfaitement. Donc en tant que futur numéricien, j'ai acquis de nouveaux réflexes en informatique en cas de bug. Ces derniers peuvent être des choses simples comme les commandes grep, vim, le débogueur kdbg ou encore le grand classique print 'hello'. En effet, durant mes années en école d'ingénieurs, j'ai travaillé sur des codes de l'ordre de la centaine de lignes. En cas de bug, la solution était trouvée assez rapidement. Sur un code industriel contenant des dizaines de milliers de lignes, cela est différent.

La faisabilité des calculs a été au centre de mon stage à l'IRSN. Certes les résultats recherchés à l'IRSN doivent être justes sous une certaine mesure mais ne doivent pas prendre un temps démesuré. Ainsi, avec des problèmes réels traités, on s'éloigne un peu de la "belle théorie mathématique et des beaux cas analytiques" pour se poser des questions purement pratiques comme la tolérance à choisir, le nombre d'itération maximal par pas de temps etc. C'est dans cet état d'esprit que j'ai cherché de petites astuces permettant la faisabilité des calculs. Mon travail se résumerait en trois points : couplage d'une équation d'écoulement transitoire avec une équation de transport, amélioration de la procédure de déraffinement, nouveau critère d'arrêt lié à la tolérance.

Mon stage assez atypique, car s'étant déroulé en deux parties, a présenté ses avantages et ses inconvénients. Parmi les inconvénients, je note le fait que la courte durée de stage au LAGA puis à l'IRSN ne m'a pas aidé à développer énormément de codes. Cependant, parmi les avantages se trouve le fait que j'ai eu deux fois l'opportunité d'apprendre à entrer dans un code industriel, ce qui pour moi, me manquait, étant donné que la formation MACS m'a donné les bases mathématiques nécessaires pour traiter les problèmes vus pendant le stage. Un autre avantage a été de pouvoir travailler sur deux domaines d'application différents des équations d'écoulement et de transport : l'électronique et les écoulements fluides. Je trouve toujours intéressant de voir une même équation régir deux phénomènes qui, à première vue, n'ont rien en commun. Par la comparaison des méthodes numériques utilisées au sein des deux organismes, j'ai pu voir leurs avantages et désavantages, ce qui je l'espère, par le biais du post-doctorant qui prendra la suite, me permettra de contribuer au développement de Melodie en 3D avec adaptation de maillage.

8 Complément : estimateur d'erreur a posteriori pour le laplacien en 1D

Ce chapitre reprend en détail un exercice sur lequel j'ai travaillé en deuxième année de MACS. Il permet de voir la construction d'un estimateur d'erreur.

8.1 Présentation du problème

Soit $\Omega =]0; 1[$ et soit l'équation elliptique suivante :

$$-u'' = f \text{ dans } \Omega \quad (12)$$

$$u(0) = u(1) = 0 \quad (13)$$

Pour la discrétisation de cette équation, on découpe Ω en cellules $T_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$, $i \in [1; N]$ avec $x_{1/2} = 0$ et $x_{N+1/2} = 1$. A chaque cellule T_i , on associe un point x_i dans T_i . On note alors les cellules duales $D_{i+1/2} = [x_i, x_{i+1}]$, $i \in [0; N]$. Par convention, $x_0 = 0$ et $x_{N+1} = 1$. On note $|T_i|$ la longueur de T_i et de même, $|D_{i+1/2}|$ celle de $D_{i+1/2}$. On suppose que f est une fonction de $L^2(\Omega)$. On définit

$$f_i = \frac{1}{|T_i|} \int_{T_i} f(x) dx$$

Le produit scalaire de deux fonctions a et b dans $L^2(\Omega)$ est noté $(a, b)_{L^2(\Omega)}$ et est défini par

$$(a, b)_{L^2(\Omega)} = \int_{\Omega} a(x)b(x) dx$$

8.2 Approximation éléments finis et volumes finis

Formulation variationnelle et formulation par éléments finis

En utilisant une intégration par parties et le fait que $w(0) = w(1) = 0$, la formulation variationnelle associée à 12-13 dans $H_0^1(\Omega)$ s'écrit :

$$\text{Trouver } u \in H_0^1(\Omega) \text{ tel que } \forall w \in H_0^1(\Omega) \quad (u', w')_{L^2(\Omega)} = (f, w)_{L^2(\Omega)}$$

Le principe des éléments finis est de trouver une fonction u_h dans un espace de dimension fini $V_h \subset H_0^1(\Omega)$ tel que

$$\forall w_h \in V_h \quad (u_h', w_h')_{L^2(\Omega)} = (f, w_h)_{L^2(\Omega)}$$

Formulation par volumes finis

La méthode des volumes finis consiste à intégrer de manière exacte l'équation 12 sur chaque cellule T_i :

$$\begin{aligned} - \int_{T_i} u''(x) dx &= \int_{T_i} f(x) dx \\ u'(x_{i-1/2}) - u'(x_{i+1/2}) &= |T_i| f_i \end{aligned}$$

Puis par une approximation par différences finies :

$$\frac{u(x_i) - u(x_{i-1}))}{x_i - x_{i-1}} - \frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{x_{i+1} - x_i} = |T_i| f_i$$

On obtient alors un schéma volumes finis :

$$\frac{u_i - u_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} - \frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} = |T_i| f_i \quad (14)$$

En multipliant l'équation 14 par w_i , en sommant sur i , et en supposant $w_0 = w_{N+1} = 0$, on obtient :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N w_i \frac{u_i - u_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} - \sum_{i=1}^N w_i \frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} &= \sum_{i=1}^N w_i |T_i| f_i \\ \sum_{i=0}^{N-1} w_{i+1} \frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} - \sum_{i=1}^N w_i \frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} &= \sum_{i=1}^N w_i |T_i| f_i \\ \sum_{i=0}^N (x_{i+1} - x_i) \left(\frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{w_{i+1} - w_i}{x_{i+1} - x_i} \right) &= \sum_{i=0}^N w_i |T_i| f_i \end{aligned}$$

L'approximation par volumes finis de 12-13 s'écrit donc :

Trouver $(u_i)_{i \in [0; N+1]}$ avec $u_0 = u_{N+1} = 0$ tel que pour tout $(w_i)_{i \in [0; N+1]}$ avec $w_0 = w_{N+1} = 0$

$$\sum_{i=0}^N (x_{i+1} - x_i) \left(\frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{w_{i+1} - w_i}{x_{i+1} - x_i} \right) = \sum_{i=0}^N w_i |T_i| f_i$$

Formulation par éléments finis équivalente

On pose :

$$V_h = \{v_h \in \mathcal{C}_0(\Omega); v_h|_{[x_i, x_{i+1}]} \in P1 \text{ et } v_h(0) = v_h(1) = 0\}$$

La formulation par éléments finis équivalente à la formulation par volumes finis s'écrit alors :

$$\text{Trouver } u_h \in V_h \text{ tel que } \forall w_h \in V_h \quad (u'_h, w'_h)_{L^2(\Omega)} = (f, w_h^*)_{L^2(\Omega)}$$

où $u_h(x_i) = u_i$, $w_h(x_i) = w_i$ pour $i \in [0, N+1]$ et où $w_h^*(x) = w_h(x_i) = w_i$ pour $x \in T_i$.

Démonstration.

$$\begin{aligned} (u'_h, w'_h)_{L^2(\Omega)} &= \sum_{i=0}^N \int_{x_i}^{x_{i+1}} u'_h(x) w'_h(x) dx \\ &\simeq \sum_{i=0}^N \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(\frac{u_h(x_{i+1}) - u_h(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{w_h(x_{i+1}) - w_h(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \right) dx \\ &\simeq \sum_{i=0}^N \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(\frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{w_{i+1} - w_i}{x_{i+1} - x_i} \right) dx \\ &\simeq \sum_{i=0}^N (x_{i+1} - x_i) \left(\frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} \right) \left(\frac{w_{i+1} - w_i}{x_{i+1} - x_i} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (f, w_h^*)_{L^2(\Omega)} &= \sum_{i=1}^N \int_{T_i} f(x) w_h^*(x) dx \\
 &= \sum_{i=1}^N w_i \int_{T_i} f(x) dx
 \end{aligned}$$

□

8.3 Estimateur d'erreur a posteriori

On pose $v = u - u_h$. Pour $v_h \in V_h$, on note v_h^* la fonction constante par morceaux égale à $v_h(x_i)$ sur la cellule T_i . Pour toute fonction $v_h \in V_h$, on a :

$$\begin{aligned}
 \|(u - u_h)'\|_{L^2(\Omega)}^2 &= (u', v')_{L^2(\Omega)} - (u_h', v')_{L^2(\Omega)} \\
 &= (-u'', v)_{L^2(\Omega)} - (u_h', v')_{L^2(\Omega)} \\
 &= (f, v)_{L^2(\Omega)} - (u_h', v')_{L^2(\Omega)} \\
 &= (f, v)_{L^2(\Omega)} - (u_h', v')_{L^2(\Omega)} - (f, v_h^*)_{L^2(\Omega)} + (u_h', v_h')_{L^2(\Omega)} \\
 \|(u - u_h)'\|_{L^2(\Omega)}^2 &= (f, v - v_h^*)_{L^2(\Omega)} + (u_h', (v_h - v)')_{L^2(\Omega)}
 \end{aligned} \tag{15}$$

Nous allons maintenant borner le premier terme dans le membre de droite de l'égalité 15. La fonction v_h apparaissant dans 15 étant arbitraire dans V_h , on peut la choisir telle que

$$\forall i \in [1; N] \quad v_h(x_i) = \frac{1}{|T_i|} \int_{T_i} v(x) dx \tag{16}$$

Pour ce choix de v_h , on admet qu'il existe une constante C_1 indépendante du maillage et de v telle que

$$\forall i \in [1; N] \quad \|v - v_h^*\|_{L^2(T_i)} \leq C_1 |T_i| \|v'\|_{L^2(T_i)} \tag{17}$$

Par définition de v_h^* , on a :

$$\int_{T_i} v_h^*(x) dx = \int_{T_i} v_h(x_i) dx = |T_i| v_h(x_i) = \int_{T_i} v(x) dx$$

d'où

$$\int_{T_i} (v - v_h^*)(x) dx = 0$$

Ainsi

$$\begin{aligned}
 (f, v - v_h^*)_{L^2(\Omega)} &= \sum_{i=1}^N \int_{T_i} (f)(v - v_h^*)(x) dx \\
 &= \sum_{i=1}^N \int_{T_i} (f - f_i)(v - v_h^*)(x) dx
 \end{aligned}$$

En utilisant une inégalité de Cauchy-Schwarz continue puis discrète, on obtient :

$$\begin{aligned}
 \left| (f, v - v_h^*)_{L^2(\Omega)} \right| &\leq \sum_{i=1}^N \int_{T_i} |f - f_i| |v - v_h^*| dx \\
 &\leq \sum_{i=1}^N \sqrt{\int_{T_i} |f - f_i|^2 dx} \sqrt{\int_{T_i} |v - v_h^*|^2 dx} \\
 &\leq \sum_{i=1}^N \|f - f_i\|_{L^2(T_i)} |T_i| C_1 \|v'\|_{L^2(T_i)} \\
 &\leq C_1 \sqrt{\sum_{i=1}^N \|f - f_i\|_{L^2(T_i)}^2 |T_i|^2} \sqrt{\sum_{i=1}^N \|v'\|_{L^2(T_i)}^2} \\
 &\leq C_1 \sqrt{\sum_{i=1}^N \|f - f_i\|_{L^2(T_i)}^2 |T_i|^2} \|v'\|_{L^2(\Omega)} \tag{18}
 \end{aligned}$$

On s'intéresse maintenant au second terme dans le membre de droite de l'égalité 15.

En utilisant le fait que u'_h est constant sur $[x_i, x_{i+1}]$ et en posant $u'_h(x) = (u'_h)|_{D_{i+1/2}}$ pour $x \in]x_i, x_{i+1}[$, on obtient :

$$\begin{aligned}
 (u'_h, (v_h - v)')_{L^2(\Omega)} &= \int_{\Omega} u'_h(x) (v_h - v)'(x) dx \\
 &= \sum_{i=0}^N \int_{x_i}^{x_{i+1}} u'_h(x) (v_h - v)'(x) dx \\
 &= \sum_{i=0}^N (u'_h)|_{D_{i+1/2}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (v_h - v)'(x) dx \\
 &= \sum_{i=0}^N (u'_h)|_{D_{i+1/2}} [(v_h - v)(x_{i+1}) - (v_h - v)(x_i)]
 \end{aligned}$$

Puis par un changement d'indice et en notant $[u'_h]_{x_i} = (u'_h)|_{D_{i-1/2}} - (u'_h)|_{D_{i+1/2}}$

$$(u'_h, (v_h - v)')_{L^2(\Omega)} = \sum_{i=1}^N [u'_h]_{x_i} (v_h - v)(x_i)$$

On admet que pour le choix de v_h respectant 16, il existe une constante C_2 indépendante du maillage et de v telle que

$$\forall i \in [1; N] |(v_h - v)(x_i)| \leq C_2 |T_i|^{1/2} \|v'\|_{L^2(T_i)}$$

Par une inégalité triangulaire, en utilisant cette dernière remarque et par une inégalité de

Cauchy-Schwarz, on a :

$$\begin{aligned}
 |(u'_h, (v_h - v)')_{L^2(\Omega)}| &\leq \sum_{i=1}^N |[u'_h]_{x_i}| |(v_h - v)(x_i)| \\
 &\leq C_2 \sum_{i=1}^N |[u'_h]_{x_i}| |T_i|^{1/2} \|v'\|_{L^2(T_i)} \\
 &\leq C_2 \sqrt{\sum_{i=1}^N [u'_h]_{x_i}^2 |T_i|} \sqrt{\sum_{i=1}^N \|v'\|_{L^2(T_i)}^2} \\
 &\leq C_2 \sqrt{\sum_{i=1}^N [u'_h]_{x_i}^2 |T_i|} \|v'\|_{L^2(\Omega)}
 \end{aligned} \tag{19}$$

Par les équations 15, 18 et 19, on obtient alors en notant que $v = u - u_h$:

$$\begin{aligned}
 \|(u - u_h)'\|_{L^2(\Omega)}^2 &= (f, v - v_h^*)_{L^2(\Omega)} + (u'_h, (v_h - v)')_{L^2(\Omega)} \\
 \|(u - u_h)'\|_{L^2(\Omega)}^2 &\leq C_1 \sqrt{\sum_{i=1}^N \|f - f_i\|_{L^2(T_i)}^2 |T_i|^2} \|v'\|_{L^2(\Omega)} + C_2 \sqrt{\sum_{i=1}^N [u'_h]_{x_i}^2 |T_i|} \|v'\|_{L^2(\Omega)} \\
 \|(u - u_h)'\|_{L^2(\Omega)} &\leq C \left(\sqrt{\sum_{i=1}^N \|f - f_i\|_{L^2(T_i)}^2 |T_i|^2} + \sqrt{\sum_{i=1}^N [u'_h]_{x_i}^2 |T_i|} \right)
 \end{aligned} \tag{20}$$

où $C = \max(C_1, C_2)$.

On suppose maintenant que f est dans $H^1(\Omega)$. On a alors une inégalité du type 17 : il existe une constante C_3 telle que :

$$\forall i \in [1; N] \quad \|f - f_i\|_{L^2(T_i)} \leq C_3 |T_i| \|f'\|_{L^2(T_i)}$$

L'équation 20 devient :

$$\begin{aligned}
 \|(u - u_h)'\|_{L^2(\Omega)} &\leq C \left(\sqrt{\sum_{i=1}^N (C_3)^2 \|f'\|_{L^2(T_i)}^2 |T_i|^4} + \sqrt{\sum_{i=1}^N [u'_h]_{x_i}^2 |T_i|} \right) \\
 &\leq \tilde{C} \left(\sqrt{\sum_{i=1}^N \|f'\|_{L^2(T_i)}^2 |T_i|^4} + \sqrt{\sum_{i=1}^N [u'_h]_{x_i}^2 |T_i|} \right)
 \end{aligned}$$

où $\tilde{C} = C \max(1, C_3)$.

8.4 Algorithme de résolution

L'adaptation de maillage basée sur une estimation d'erreur a posteriori consiste à calculer les quantités locales suivantes apparaissant dans 20 :

$$\eta_{i,1} = |T_i| \|f - f_i\|_{L^2(T_i)} \quad \text{et} \quad \eta_{i,2} = |T_i|^{1/2} |[u'_h]_{x_i}|$$

Algorithme

- Résolution du schéma volumes finis sur un maillage donné
 - Calcul cellule par cellule des quantités $\eta_{i,1}$, $\eta_{i,2}$, $\eta_i = \eta_{i,1} + \eta_{i,2}$
Calcul de l'estimateur d'erreur globale $\eta = (\sum_i (\eta_{i,1}))^{1/2} + (\sum_i (\eta_{i,2}))^{1/2}$
Si η est inférieur à un certain seuil choisi par l'utilisateur, alors on s'arrête.
Sinon on passe à l'étape suivante.
 - Si η_i est supérieur à la valeur moyenne des (η_j) , alors T_i est marqué comme devant être raffiné.
 - On génère un nouveau maillage en découpant les cellules marquées dans l'étape précédente en deux sous-cellules de même longueur.
Retour à la première étape.
-

9 Annexes

9.1 Annexe 1 : Expression du champ de vitesses pour le streamer

Le champ de vitesse des électrons est une fonction de l'intensité du champ électrique :

$$\begin{aligned} \text{pour } \frac{\|\vec{E}\|}{N} > 2 \times 10^{-15}, v_e &= - \left[7.4 \times 10^{21} \frac{\|\vec{E}\|}{N} + 7.1 \times 10^6 \right] \cdot \frac{\vec{E}}{\|\vec{E}\|} \\ \text{pour } 10^{-16} < \frac{\|\vec{E}\|}{N} \leq 2 \times 10^{-15}, v_e &= - \left[1.03 \times 10^{22} \frac{\|\vec{E}\|}{N} + 1.3 \times 10^6 \right] \cdot \frac{\vec{E}}{\|\vec{E}\|} \\ \text{pour } 2.6 \times 10^{-17} < \frac{\|\vec{E}\|}{N} \leq 10^{-16}, v_e &= - \left[7.2973 \times 10^{21} \frac{\|\vec{E}\|}{N} + 1.63 \times 10^6 \right] \cdot \frac{\vec{E}}{\|\vec{E}\|} \\ \text{pour } \frac{\|\vec{E}\|}{N} \leq 2.6 \times 10^{-17}, v_e &= - \left[6.87 \times 10^{22} \frac{\|\vec{E}\|}{N} + 3.38 \times 10^4 \right] \cdot \frac{\vec{E}}{\|\vec{E}\|} \end{aligned}$$

$N = 2.5 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ est la densité d'un gaz neutre

Le terme source S_e dépend du champ de vitesse et de la densité d'électrons :

$$S_e = \frac{\alpha}{N} \|\vec{v}_e\| n_e N$$

où $\frac{\alpha}{N}$ est donné par :

$$\begin{aligned} \text{si } \frac{\|\vec{E}\|}{N} > 1.5 \times 10^{-15}, \frac{\alpha}{N} &= 2 \times 10^{-16} \exp \left(\frac{-7.248 \times 10^{-15}}{\|\vec{E}\|/N} \right) \\ \text{sinon } \frac{\alpha}{N} &= 6.619 \times 10^{-17} \exp \left(\frac{-5.593 \times 10^{-15}}{\|\vec{E}\|/N} \right) \end{aligned}$$

9.2 Annexe 2 : Changements apportés au code "Streamer" du LAGA

L'équation de Poisson est résolue par une méthode de volumes finis centrés sur les noeuds. Les inconnues sont donc aux sommets [initialement, cette équation était résolue par une méthode de volumes finis centrés sur les cellules; l'objectif final était de pouvoir également changer la méthode de volume finis pour l'équation de transport, mais ceci n'a pu être réalisé, faute de temps]. Dans un premier temps, les valeurs de n_e définies aux centres des cellules sont interpolées aux noeuds. On se sert alors de ces valeurs aux noeuds pour construire le second membre du système linéaire associé à l'équation de Poisson. Après la résolution du système, une interpolation ramène la solution aux centres des cellules. Les conditions aux limites sont des conditions de Dirichlet sur les bords gauche et droit du domaine, et des conditions de Neumann sur les bords haut et bas [des conditions aux limites périodiques étaient utilisées à la place de celles de Neumann dans la version initiale du code]. De nouvelles fonctions ont été créées ("compute-b-new", "stiffness-triplet" et "set-center-field") permettant de construire la matrice de rigidité, le second membre et d'interpoler aux centres des cellules des valeurs définies aux noeuds.

Une modification a été apportée à la fonction "compute-el-field" calculant le champ électrique : des conditions aux limites ne sont plus imposées sur les bords "wall" pour le champ E , les bords "wall" étant les bords haut et bas du domaine. On rappelle que $E = -\nabla V$.

Une autre modification a été apportée à la fonction "set-node-name" qui redéfinit le flag associé à chaque sommet. Une boucle supplémentaire permet de définir les points aux coins comme étant des points Dirichlet. [dans la version initiale, le rectangle était construit comme suit : 1) construction du bord haut ayant le flag 3, ainsi les points (0,0.5) et (1,0.5) portent le flag 3; 2) construction du bord droit ayant le flag 2, ainsi les points (1,0.5) et (1,0) portent désormais le flag 2 etc].

Dans le script "main2.cpp", une ramification du phénomène de streamer a été tentée. Ceci consiste en l'ajout de deux gaussiennes sur n_e à un certain temps.

9.3 Annexe 3 : Changements apportés au code "PorousMedia" du LAGA

Les modifications apportées au code "Streamer" concernant la résolution de l'équation de Poisson, les fonctions "compute-el-field" et "set-node-name" ont également été apportées au code "PorousMedia".

Un domaine hétérogène a été simulé : le domaine a été découpé en deux sous-domaines à l'aide d'une interface fictive. Des porosités ainsi que des coefficients liés à la diffusion différents ont été définis dans chacun des sous-domaines.

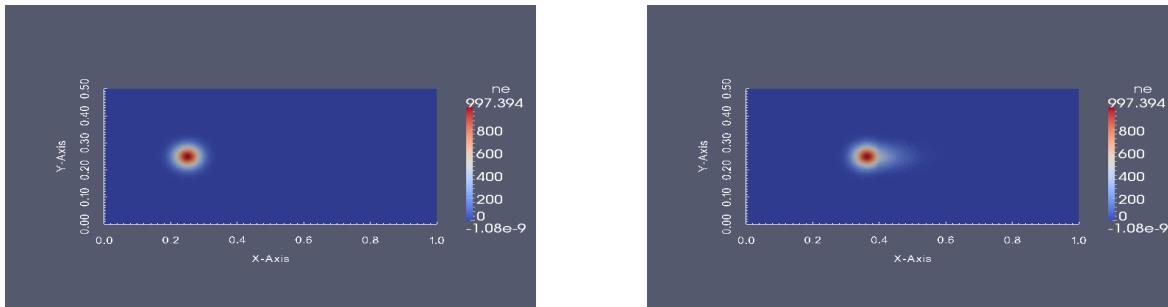


FIGURE 35 – Densité d'électrons n_e - itération 1 et 150

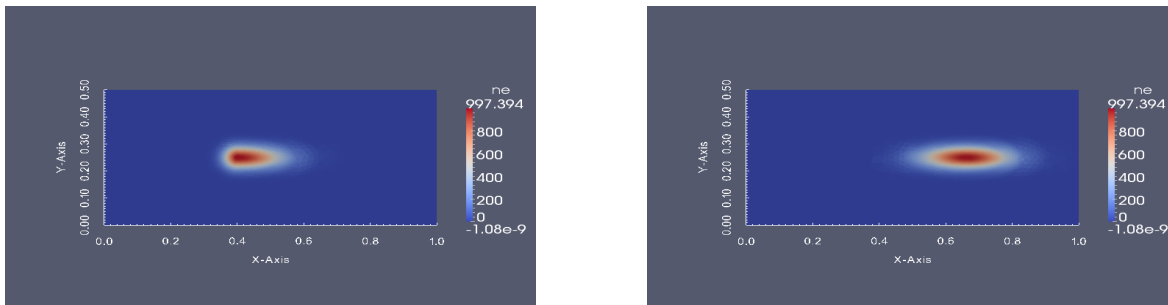


FIGURE 36 – Densité d'électrons n_e - itération 200 et 300

9.4 Annexe 4 : Changements apportés au calcul de transport à l'IRSN

Des erreurs ont été trouvées dans l'implémentation des estimateurs d'erreur a posteriori.

Concernant l'estimateur d'erreur lié au saut diffusif, le fait que le coefficient de diffusion et que le gradient de la concentration soit constant par triangle donne :

$$\begin{aligned}(\eta_r^n)^2 &= D_{min}^{-1/2} \alpha_E ||[D_h^n \nabla C_h^n] \cdot \vec{n}_E||_{L^2(E)}^2 \\ &= D_{min}^{-1/2} \alpha_E ([D_h^n \nabla C_h^n] \cdot \vec{n}_E)^2 h_E\end{aligned}$$

Dans l'implémentation, la longueur de l'arête provenant de la norme L2 a été oubliée.

De même pour l'estimateur d'erreur lié au saut convectif :

$$\begin{aligned}(\eta_z^n)^2 &= D_{min}^{-1/2} \alpha_\gamma ||\vec{q}^n \cdot \vec{n}_\gamma (C_h^{n-1}(x_i) - C_h^{n-1}(x_j))||_{L^2(\gamma)}^2 \\ &= D_{min}^{-1/2} \alpha_\gamma (\vec{q}^n \cdot \vec{n}_\gamma (C_h^{n-1}(x_i) - C_h^{n-1}(x_j)))^2 h_\gamma\end{aligned}$$

9.5 Annexe 5 : Changements apportés à la stratégie de raffinement à l'IRSN

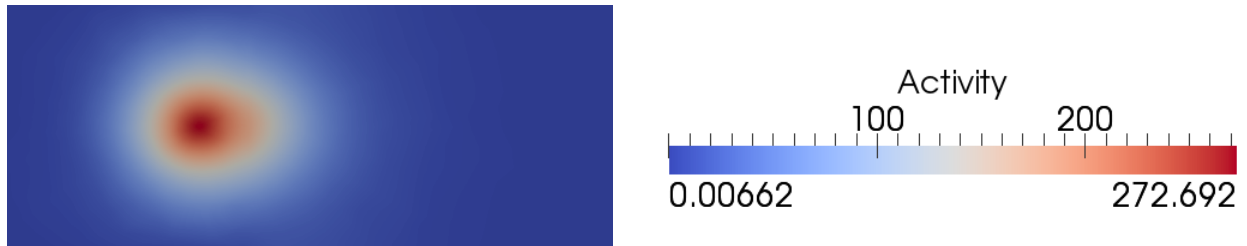


FIGURE 37 – Concentration à 1 an

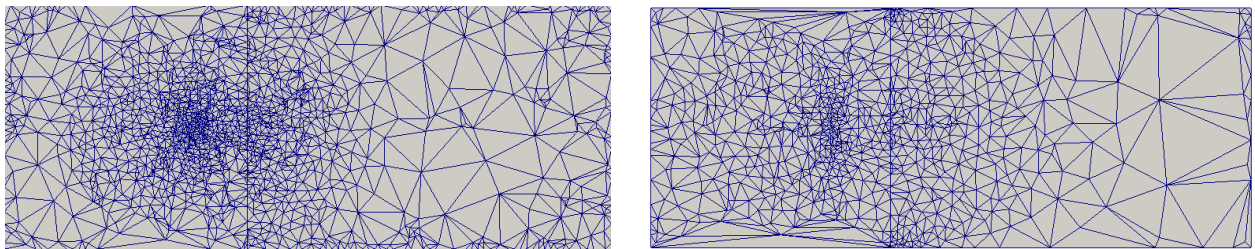


FIGURE 38 – Maillage à 1 an, avant modification à gauche, après à droite

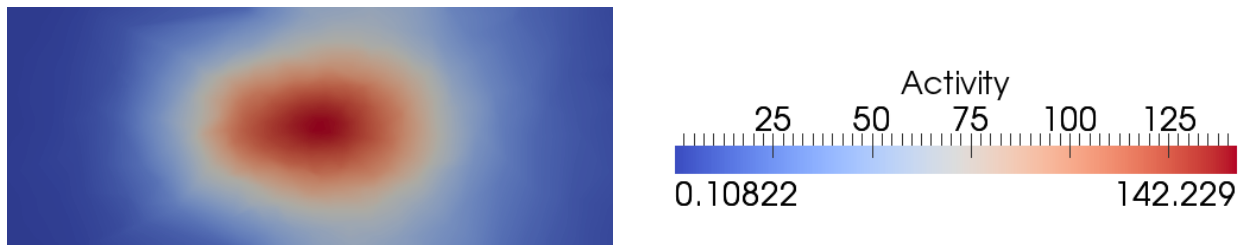


FIGURE 39 – Concentration à 2 ans

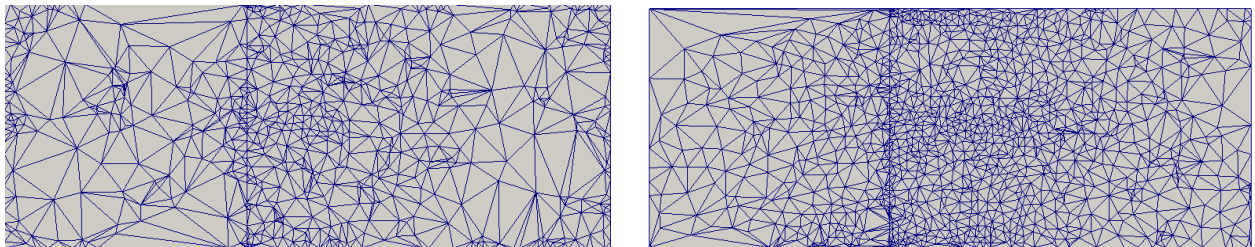


FIGURE 40 – Maillage à 2 ans, avant modification à gauche, après à droite

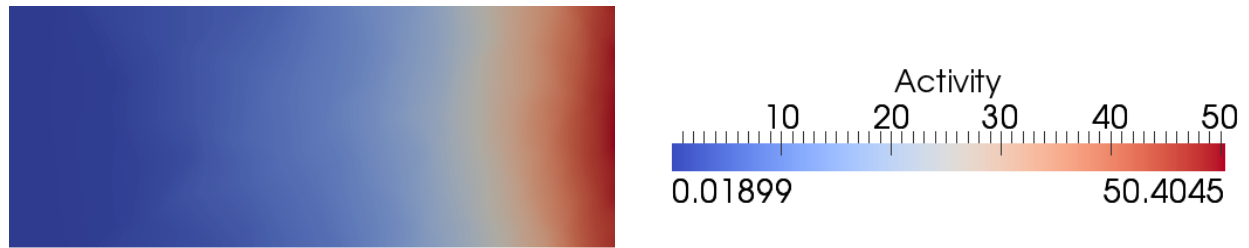


FIGURE 41 – Concentration à 5 ans

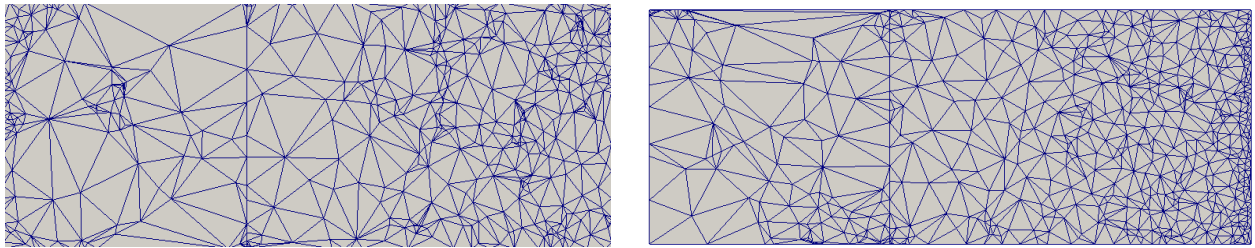


FIGURE 42 – Maillage à 5 ans, avant modification à gauche, après à droite

9.6 Annexe 6 : Notice d'utilisation de Melodie pour le couplage Transitoire-Transport

Pour le couplage des équations de transports et d'écoulement transitoire, on crée 5 dossiers :

- 1_Ecou_perm
- 2_Ecou_transi_adapt
- 3_Ecou_perm
- 4_Ecou_transi_fix
- 5_Transport

1. Dans le dossier 1_Ecou_perm :

- Création du fichier "scenario" où l'on charge le maillage M_0 et où l'on définit la région et la valeur du potentiel imposé, la région et la valeur de flux imposé (valeur qui doit être égale à la valeur du flux imposé pour le calcul d'écoulement transitoire au temps initial);
- Création du fichier "entree" à partir du fichier "scenario" via Melomail;
- Calcul d'écoulement permanent sur le maillage M_0 ; on obtient en sortie le fichier "fort.75";

2. Dans le dossier 2_Ecou_transi_adapt :

- Copie du fichier "fort.75" du dossier 1_Ecou_perm;
- Copie du fichier "Refine_transitoire.data";
- Création du fichier "scénario" où on charge le maillage M_0 et où on définit la région et la valeur du potentiel imposé, la région de flux imposé, on précise que les valeurs de flux imposé doivent être lues sur le fichier "fort.17";
- Création du fichier "entree" à partir du fichier "scenario" via Melomail; ajout d'un signe "-" à l'indice correspond au type de calcul dans le fichier "entree" (pour indiquer que le potentiel initial doit être lu sur le fichier "fort.75"); le fichier "entree" contient les indices des noeuds où on souhaite imposer le flux;
- Création des fichiers "fort.17" et "fort.27"; le fichier "fort.27" doit être vide; une ligne du fichier "fort.17" contient la date à laquelle on veut imposer le flux suivie des valeurs de flux à imposer correspondant aux noeuds notés dans le fichier "entree";
- Calcul d'écoulement transitoire sur maillage adaptatif à partir du maillage M_0 ; en sortie : fichiers "fort.17", "fort.27" actualisés, fichier "mail_extern.melo" définissant le nouveau maillage M_1 ;

3. Dans le dossier 3_Ecou_perm :

- Copie du fichier "mail_extern.melo" du dossier 2_Ecou_transi_adapt;
- Création du fichier "scenario" où l'on charge le maillage (ici maillage M_1) et où l'on définit la région et la valeur du potentiel imposé, la région et la valeur de flux imposé (exactement comme dans le fichier "scenario" du premier calcul d'écoulement permanent);
- Création du fichier "entree" à partir du fichier "scenario" via Melomail;
- Calcul d'écoulement permanent sur le maillage M_1 ; on obtient en sortie le fichier "fort.75";

4. Dans le dossier 4_Ecou_transi_fix :

- Copie du fichier "fort.75" du dossier 3_Ecou_perm
- Copie des fichiers "fort.17" et "fort.27" du dossier 2_Ecou_transi_adapt

- Copie du fichier "Refine_transitoire.data" où l'on précise que l'on ne fait pas d'adaptation de maillage ;
 - Création du fichier "scenario" où l'on charge le maillage M_1 et où l'on définit la région et la valeur du potentiel imposé, la région de flux imposé ;
 - Création du fichier "entree" à partir du fichier "scenario" via Melomail ; ajout d'un signe "-" à l'indice correspond au type de calcul dans le fichier "entree" ;
 - Calcul d'écoulement transitoire sur maillage fixe M_1 ; en sortie : fichier "fort.77"
5. Dans le dossier 5_Transport :
- Copie du fichier "mail_extern.melo" du dossier 4_Ecou_transi_fix ;
 - Copie du fichier "Refine_transitoire.data" où l'on précise que l'on ne doit pas supprimer les noeuds du maillage initial lors du déraffinement ;
 - Copie du fichier "fort.77" du dossier 4_Ecou_transi_fix ;
 - Création du fichier "scenario" où l'on charge le maillage M_1 et où l'on définit la région du dépôt ;
 - Création du fichier "entree" à partir du fichier "scenario" via Melomail ; ajout du chiffre "5" devant l'indice correspond au type de calcul dans le fichier "entree" (pour indiquer que le champs de potentiel doit être lu sur le fichier "fort.77" aux différents temps) ;
 - Calcul de transport

10 Bibliographie

Références

- [1] B. Amaziane, M. Bourgeois, M. El Fatini, *Adaptive mesh refinement for a finite volume method for flow and transport of radionuclides in heterogeneous porous media*
- [2] B. Amaziane, M. Bourgeois, M. El Fatini, *Recherche d'un estimateur d'erreur a posteriori pour le logiciel Melodie en 2D et application à l'adaptation de maillage*, IRSN/UPPA Accord spécifique no 1, Rapport de recherche (2011)
- [3] B. Amaziane, A. Bergam, M. El Ossmani, Z. Mghazli, *A posteriori estimators for vertex centred finite volume discretization of a convection-diffusion-reaction equation arising in flow in porous media*, Int. J. Numer. Meth. Fluids (2009), no. 59, 259-284
- [4] F. Benkhaldoun, J. Fort, K. Hassouni, J. Karel, *Simulation of planar ionization wave front propagation on an unstructured adaptive grid*, Journal of computational and applied mathematics 236 (2012), 4623-4634
- [5] C. Carstensen, R. Lazarov, S. Tomov, *Explicit and averaging a posteriori error estimates for adaptive finite volume methods*, SIAM, Numer. Anal., 42 (2005), no. 6, 2496-2521
- [6] R. D. Hornung, J. A. Trangenstein, *Adaptive mesh refinement and multilevel iteration for flow in porous media*, Cours de l'Université de Duke, Département de mathématiques
- [7] S. Nicaise, *A posteriori error estimations of some cell centered finite volume methods for diffusion-convection-reaction problems*, SIAM, Numer. Anal., 44 (2006), no 3, 949-978
- [8] M. Nicolas, *Écoulements dans les milieux poreux*, Cours de l'Université de Provence, Marseille (2003)
- [9] P. Omnès, *An introduction to finite schemes for elliptic equations*, Cours de l'Ecole Sup Galilée, formation Mathématiques Appliquées et Calcul Scientifique
- [10] A. Rivet, *Estimations a posteriori pour la modélisation des écoulements et des transferts de polluants en milieux poreux*, Rapport de stage IRSN, Ecole Sup Galilée (2012)
- [11] M. Vohralik, *Residual flux-based a posteriori error estimates for finite volume and related locally conservative methods*, Numer. Math. 111 (2008), no. 1, 121-158