



Rapport de stage de fin d'étude de 3<sup>e</sup> année effectué à la Maison de la  
Simulation dans le cadre de la formation :

Mathématiques Appliquées et Calcul Scientifique  
à

L'école d'ingénieur *SupGalilée*

SIMULATION D'ÉCOULEMENT  
EN MILIEUX POREUX

***Ernest MOKET***

TUTEURS : MICHEL KERN, FRÉDÉRIC DAUVERGNE



# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>6</b>
<b>1 Introduction Générale</b>	<b>7</b>
1.1 Généralités . . . . .	7
1.2 Description du cas test <i>COUPLEX</i> . . . . .	8
1.2.1 Introduction . . . . .	8
1.2.2 Présentation . . . . .	8
1.2.3 Données physiques . . . . .	9
<b>2 Bases théoriques de la méthode des éléments finis mixtes</b>	<b>11</b>
2.1 Étude du problème continu . . . . .	11
2.2 Éléments finis de Raviart Thomas . . . . .	15
<b>3 Mise en Œuvre</b>	<b>19</b>
3.1 Construction du maillage . . . . .	19
3.2 Mise à échelle . . . . .	20
3.3 Implémentation dans <b>LifeV</b> . . . . .	23
3.3.1 Programmes <code>user_fun.{cpp,hpp}</code> . . . . .	24
3.3.2 Programme principal <code>main.cpp</code> . . . . .	25
3.3.3 Programme <code>Darcy.{cpp,hpp}</code> . . . . .	26
<b>4 Visualisations et Commentaires</b>	<b>30</b>
4.1 Domaine Réel . . . . .	30
4.1.1 La charge hydrodynamique . . . . .	31
4.1.2 Vitesse . . . . .	34
4.2 Amélioration des résultats . . . . .	36
4.2.1 La charge hydrodynamique . . . . .	38
4.2.2 Vitesse . . . . .	39
4.3 Domaine redimensionné . . . . .	41
4.3.1 La charge hydrodynamique . . . . .	42
4.3.2 Vitesse . . . . .	42
<b>Conclusion</b>	<b>46</b>
<b>Appendices</b>	<b>47</b>
<b>A La Maison de la Simulation</b>	<b>48</b>

B	GMSH	50
C	Code FreeFem++	52
D	Code bash modificateur fichier <i>.msh</i>	54

# Table des figures

1.1	Géométrie du domaine $\Omega$ . . . . .	9
2.1	élément finis Raviart Thomas . . . . .	16
3.1	Domaine redimensionné (695m× 20 en hauteur 25000m en Largeur) . . . . .	20
3.2	Domaine réel (695m en hauteur et 25000m en Largeur) . . . . .	20
3.3	Domaine redimensionné, bords intérieur supprimés . . . . .	21
4.1	Répartition charge hydrodynamique maillage 14x25 . . . . .	31
4.2	Répartition charge hydrodynamique maillage 14x25, avec ligne de champ . . . . .	32
4.3	Répartition charge hydrodynamique maillage 560x1000, avec ligne de champ . . . . .	32
4.4	Zoom zone encadrée . . . . .	33
4.5	Répartition charge hydrodynamique maillage 84x3000, avec ligne de champ . . . . .	33
4.6	Zoom zone encadrée . . . . .	34
4.7	Vitesse, maillage 84x3000 . . . . .	34
4.8	Vitesse $V_x$ , Profil $X = 200$ . . . . .	35
4.9	Vitesse $V_x$ , Profil $X = 20000$ . . . . .	36
4.10	Vitesse $V_y$ , Profil $X = 200$ . . . . .	36
4.11	Vitesse $V_y$ , Profil $X = 20000$ . . . . .	37
4.12	Maillage régulier isotrope . . . . .	37
4.13	Répartition charge hydrodynamique domaine réel, 560x1000 . . . . .	38
4.14	Répartition charge hydrodynamique domaine redimensionné, 560x1000 . . . . .	38
4.15	Vitesse $V_x$ , Profil $X = 20$ . . . . .	39
4.16	Vitesse $y$ , Profil $X = 20000$ . . . . .	40
4.17	Vitesse $V_x$ , Profil $X = 20$ . . . . .	40
4.18	Vitesse $y$ , Profil $X = 20000$ . . . . .	41
4.19	Répartition charge hydrodynamique maillage 70x125, avec ligne de champ . . . . .	42
4.20	Répartition charge hydrodynamique maillage 280x500, avec ligne de champ . . . . .	42
4.21	Zoom zone encadrée . . . . .	43
4.22	Vitesse $V_x$ , Profil $X = 200$ . . . . .	43
4.23	Vitesse $V_x$ , Profil $X = 20000$ . . . . .	44
4.24	Vitesse $V_y$ , Profil $Y = 200$ . . . . .	44
4.25	Vitesse $V_y$ , Profil $Y = 20000$ . . . . .	45
B.1	Menu du module <code>geometry</code> . . . . .	50
B.2	Aspect du menu . . . . .	51
B.3	Domaine $\Omega$ . . . . .	51

# Liste des tableaux

1.1	Preméabilité . . . . .	9
3.1	Description des paramètres de conditions aux limites . . . . .	25
3.2	Description des paramètres de discrétisation . . . . .	27
4.1	Les différents maillages . . . . .	30
4.2	Les différents maillages . . . . .	41

# INTRODUCTION

L'industrie du nucléaire produit des déchets qu'il est nécessaire de stocker avec prudence afin d'éviter tout dangers qu'ils pourraient présenter. Ainsi la modélisation mathématique pour l'étude des sites de stockage de déchets nucléaires dans les formations géologiques profondes est utile.

La simulation des sites de stockage est très complexe du fait de la disparité des échelles spatiales et temporelles des phénomènes à caractériser, et d'autre part en raison de la complexité et de la variété des processus physiques mis en jeu. Une autre caractéristique importante est la grande hétérogénéité des milieux (perméabilités), dont les propriétés locales sont souvent imparfaitement connues, qui doit être prise en compte dans les simulations.

Nous allons travailler sur un problème modèle appelé *COUPLEX* [1]. Les modèles *COUPLEX* sont un ensemble de cas tests réalistes simplifié visant à simuler l'écoulement et le transport des radionucléides autour d'un dépôt de déchets nucléaires. Cette étude se fait en deux étapes : l'écoulement du fluide et le transport de radionucléides. Ici nous ne traiterons que l'écoulement.

La modélisation du phénomène se fait avec une équation de diffusion qui est utilisée pour décrire l'écoulement d'un fluide dans un milieu poreux. La résolution de ces équations se fait par la méthode des éléments finis mixtes.

Pour la mise en œuvre numérique, notre code de calcul sera intégré à la bibliothèque *LifeV*, une bibliothèque d'éléments finis fournissant des implémentations des méthodes mathématiques et numériques. Elle est utilisée à la fois la recherche et la bibliothèque de production.

Pour effectuer cette étude nous allons tout d'abord présenter les équations qui modélise l'écoulement d'un fluide afin de les appliquer au cas test *COUPLEX*.

Lorsque les équations liées au cas d'étude seront posées nous présenterons la méthode numérique qui permet de résoudre le système.

Ensuite nous passerons à la mise en œuvre numérique, la discrétisation du domaine, suivie de l'implémentation du code de calcul à intégrer à la bibliothèque **LifeV**.

Enfin nous passerons à la visualisation des résultats et leur analyse.

# Chapitre 1

## Introduction Générale

Ce chapitre présentera les équations générales pour la modélisation de l'écoulement suivi de la description du cas d'étude auxquelles elles seront appliquées et enfin les données physiques à prendre en compte.

### 1.1 Généralités

Le système d'équations dans lequel on retrouve la loi de Darcy a été obtenu par H. Darcy [5] il y a plus de 150 ans. Il est utilisé pour modéliser l'écoulement d'un fluide incompressible visqueux à travers un milieu poreux. Ces équations ont été obtenues de manière empirique.

La loi de Darcy est valable dans différents cas, tels que :

- l'écoulement saturé et non saturé
- l'écoulement en régime permanent et transitoire
- l'écoulement dans les aquifères
- l'écoulement en milieux isotropes ou anisotropes
- etc

La loi de Darcy régissant l'écoulement stationnaire d'un fluide incompressible à travers un milieu poreux de conductivité hydraulique  $k$  est :

$$\vec{u} = -k\vec{\nabla}p$$

Et nous avons la conservation de la masse :

$$\text{div}(\vec{u}) = 0$$

Soit  $\Omega$  un ouvert borné et connexe de  $\mathbb{R}^d$ ,  $d = 2$  ou  $3$ , à frontière lipschitzienne, et soit  $n$  le vecteur unitaire normal à  $\partial\Omega$  et extérieur à  $\Omega$ , avec  $\Gamma_N \cap \Gamma_D = \partial\Omega$  et  $\Gamma_N \cup \Gamma_D = \emptyset$ . On considère donc le système d'équations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{lll} \vec{u} = -k\vec{\nabla}p & \text{dans } \Omega & \text{Loi de Darcy} \\ \text{div } u = 0 & \text{dans } \Omega & \text{Conservation de la masse} \\ u.n = g_N & \text{sur } \Gamma_N & \text{Vitesse imposée} \\ p = g_D & \text{sur } \Gamma_D & \text{pression imposée} \end{array} \right.$$

Nous avons ici la loi de conservation suivi de la loi de Darcy. Ici les inconnues sont le champ de vecteur vitesse  $\vec{u}$  à valeur dans  $\mathbb{R}^d$ , qui représente la *vitesse de Darcy* du fluide en  $m/s$ , et



la fonction scalaire  $p$  qui représente sa *pression*. Le paramètre  $k$  est le champ de conductivité hydraulique en  $m/ans$ . Il est défini par une matrice symétrique définie positive.  $g_N$ ,  $g_D$  sont les fonctions la vitesse et la pression imposée.

Nous allons passer à la description du cas test sur lequel nous allons appliquer ce système équation.

## 1.2 Description du cas test *COUPLEX*

Le test effectué est basé sur un modèle de terrain 2D simplifié utilisé pour les évaluations de sûreté dans la gestion des déchets nucléaires. Il conduira à un problème de type diffusion classique, mais avec des paramètres présentant de fortes variations spatiales.

### 1.2.1 Introduction

Le stockage en profondeur de déchets nucléaires pose un certain nombre de difficulté pour les simulations numériques. Cela est dû à la disparité des échelles, des coefficients physiques très variables et des exigences de précision élevées.

Le cas test 'COUPLEX' [3] étudié ici est un calcul en champ lointain simplifiée. Le modèle est 2D, avec quatre couches géologiques. Comme principales difficultés numériques nous avons :

- la conductivité hydraulique varie entre 10 et  $10^{-5}$  entre les couches géologiques différentes, soit six ordres de grandeur
- Le milieu présente un rapport de longueur caractéristique de 30 entre la profondeur et la largeur (milieu mince)

Afin de se concentrer sur les difficultés numériques, nous rappelons que ce test est simplifié par rapport à une simulation de sûreté réelle.

### 1.2.2 Présentation

Le réservoir se situe à une profondeur de 450 m à l'intérieur d'une couche d'argile située entre une couche de calcaire et une couche de marne au dessus et une couche « Dogger<sup>1</sup> » calcaire en dessous. L'eau s'écoule lentement à travers les milieux poreux et écoule les matières radioactives dès que le conteneur commence à fuir.

Le domaine de calcul est un rectangle  $\Omega = [0, 25000] \times [0, 695]$  en mètres. Les couches de «Dogger», d'argile, de calcaire et de marne sont agencées comme suit :

- Le « Dogger » constitue la couche de fond :  $z \in [0; 200]$
- L'argile se situe entre la ligne horizontale  $z = 200$  et la ligne à partir de  $(0, 295)$  à  $(25000, 350)$ , ce qui nous donne comme équation de la droite ( $C$ ) :  $z = 2.2 \times 10^{-3}x + 295$  ;
- Le calcaire se situe entre la droite ( $C$ ) et la droite horizontale  $z = 595$  ;
- La marne est la surface :  $z \in [595, 695]$

Le réservoir  $R$  est modélisé par un rectangulaire dans la couche d'argile :  $R = [18440, 21680] \times [244, 250]$ . La figure 1.1 résume toutes ces données.

La modélisation du problème soulève deux difficultés principales :

---

1. [http : //fr.wikipedia.org/wiki/Dogger](http://fr.wikipedia.org/wiki/Dogger)

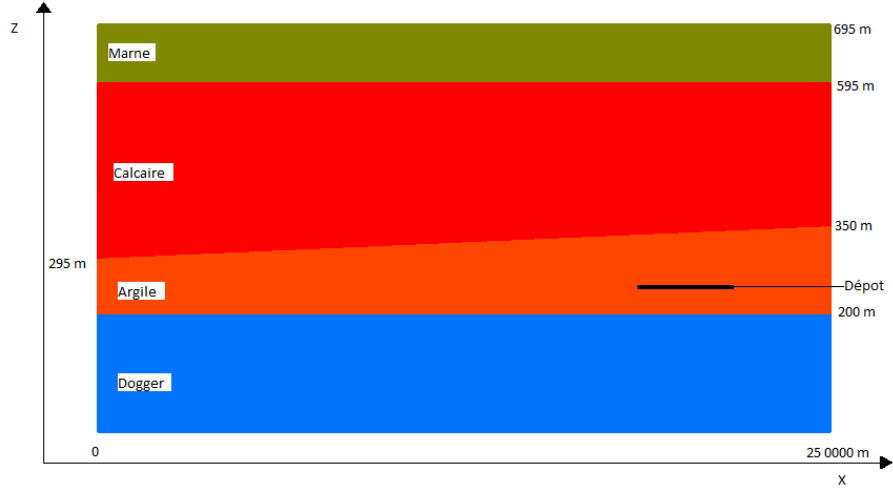


FIGURE 1.1 – Géométrie du domaine  $\Omega$

- La géométrie du domaine est fortement allongée avec une largeur de 25 km et une profondeur de 700 m.
- Les perméabilités sont très différentes d'une couche à l'autre.

### 1.2.3 Données physiques

Pour mettre en œuvre ce problème il nous faut aussi indiquer les valeurs de la perméabilité et préciser les conditions aux limites.

	Marne	Calcaire	Argile	«Dogger»
$K$ (m/ans)	$3.1536 \times 10^{-5}$	6.3072	$3.1536 \times 10^{-6}$	25.2288

TABLE 1.1 – Perméabilité

**Remarque :** La différence de perméabilité entre les couches est importantes. En effet la région argile contenant le réservoir est très imperméable tandis que la couche «Dogger» en dessous est très perméable.

#### Représentation physique des conditions aux bords

- $\Gamma_2$  : bord supérieur,  $z = 0, x \in [0, 25000], H = 180 + \frac{160x}{25000}$
- $\Gamma_3$  : bord gauche région calcaire,  $x = 0, z \in [295, 595], H = 200$
- $\Gamma_4$  : bord droit région calcaire,  $x = 25000, z \in [350, 595], H = 310$
- $\Gamma_5$  : bord gauche région «Dogger»,  $x = 0, z \in [0, 200], H = 286$
- $\Gamma_6$  : bord droit région «Dogger»,  $x = 25000, z \in [0, 200], H = 289$
- $\Gamma_1$  : bords extérieurs restant,  $\frac{\partial H}{\partial n} = 0$

$H$  représente ici la charge hydrodynamique,  $H = P/\rho g + z$ ,  $\vec{u} = -K\nabla H$  avec  $K$  le tenseur de perméabilité qui est différent du  $k$  défini en section 1.1, page 7,  $P$  la pression,  $g$  la pesanteur et  $\rho$  la densité.

Notre étude portera donc sur le système d'équations suivant :

$$\left\{ \begin{array}{lll} \vec{u} & = & -K\nabla H \quad \text{Dans } \Omega \\ \text{div } (\vec{u}) & = & 0 \quad \text{Dans } \Omega \\ \frac{\partial H}{\partial n} & = & 0 \quad \text{Sur } \Gamma_1 \\ H & = & 180 + \frac{160x}{25000} \quad \text{Sur } \Gamma_2 \\ H & = & 200 \quad \text{Sur } \Gamma_3 \\ H & = & 310 \quad \text{Sur } \Gamma_4 \\ H & = & 286 \quad \text{Sur } \Gamma_5 \\ H & = & 289 \quad \text{Sur } \Gamma_6 \end{array} \right.$$

Maintenant que nous avons posé notre problème, nous allons présenter les bases théoriques de la méthode des éléments finis mixtes.

# Chapitre 2

## Bases théoriques de la méthode des éléments finis mixtes

A la fin du chapitre précédent, le système d'équations liées au cas d'étude était présenté. Ce chapitre présentera la méthode des éléments finis mixtes utilisée pour résoudre ce système d'équation.

Le système d'équation est le suivant :

$$\left\{ \begin{array}{ll} K^{-1}u + \vec{\nabla}p &= 0 \quad \text{dans } \Omega \\ \operatorname{div} u &= 0 \quad \text{dans } \Omega \\ u \cdot n &= g_N \quad \text{sur } \Gamma_N \\ p &= g_D \quad \text{sur } \Gamma_D \end{array} \right.$$

La loi de Darcy a été reformulée, en effet l'utilisation de l'inverse de la perméabilité permettra d'effectuer la formulation variationnelle mixte avec plus de facilité. Le cas d'étude se base sur des conditions de Neumann homogènes. Donc nous avons  $g_N = 0$ . Le problème fournit une formulation mixte du problème de *Laplace* muni de conditions aux limites de Neumann et de Dirichlet afin de calculer précisément la vitesse  $\vec{u}$ . Celui-ci admet deux formulations variationnelles appelées duale et primale, mais nous n'étudierons que celle appelée **duale** [4].

### 2.1 Étude du problème continu

Tout d'abord introduisons des définitions connues qui seront utiles pour la suite : l'ensemble des fonctions définies sur  $\Omega$  et de carré intégrable est :

$$L^2(\Omega) = \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \text{ mesurable avec } \int_{\Omega} f^2 dx < +\infty\}$$

L'espace de fonctions de classe  $C^\infty$  à support compact est noté :

$$D(\Omega) = \{f \in C^\infty(\Omega) | \exists K \subset \Omega \text{ compact}, f|_{\mathbb{R}^d \setminus K} \equiv 0\}$$

Pour effectuer la formulation mixte duale, nous allons introduire l'espace suivant :  $H(\operatorname{div}, \Omega)$ , qui est le domaine de l'opérateur de divergence dans  $L^2(\Omega)^d$  :

$$H(\operatorname{div}, \Omega) = \{v \in L^2(\Omega)^d; \operatorname{div}(\vec{v}) \in L^2(\Omega)\}.$$

Muni de la norme :

$$||v||_{H(\text{div}, \Omega)}^2 = ||v||_{L^2(\Omega)^d}^2 + ||\text{div}(\vec{v})||_{L^2(\Omega)}^2$$

$H(\text{div}, \Omega)$  est un espace de Hilbert [4]. Nous introduisons aussi l'espace suivant :

$$H_0(\text{div}, \Omega) = \{v \in H(\text{div}, \Omega); v.n = 0 \text{ sur } \Gamma_N\}$$

qui est fermé dans  $H(\text{div}, \Omega)$  grâce au théorème de trace.

On va établir la formulation variationnelle mixte du problème de Darcy sous les hypothèses suivantes :

### Hypothèses

1.  $p_0 \in H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)$
2.  $K$  est à coefficients bornés et mesurables sur  $\Omega$  et est uniformément elliptique.  $\exists \alpha > 0, \gamma < \infty$  indépendants de  $x \in \Omega$  tel que, pour tout  $\vec{\lambda} \in \mathbb{R}^d, x \in \Omega$ ,

$$\gamma \vec{\lambda} \cdot \vec{\lambda} \geq K(x) \vec{\lambda} \cdot \vec{\lambda} \geq \alpha \vec{\lambda} \cdot \vec{\lambda}$$

3.  $\Omega$  ouvert borné à frontière lipschitzienne
4.  $\text{mesure}(\Gamma_D) > 0$

$$\forall v \in H_0(\text{div}, \Omega), \quad \forall q \in L^2(\Omega), \text{ on a}$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} K^{-1} \vec{u} \cdot \vec{v} \, dx + \int_{\Omega} \vec{\nabla} p \vec{v} \, dx &= 0 \\ \int_{\Omega} K^{-1} \vec{u} \cdot \vec{v} \, dx - \int_{\Omega} \text{div}(\vec{v}) p \, dx &= -\langle \gamma_n(\vec{v}), \gamma(p) \rangle \text{ par le théorème de trace} \\ \int_{\Omega} K^{-1} \vec{u} \cdot \vec{v} \, dx - \int_{\Omega} \text{div}(\vec{v}) p \, dx &= - \int_{\Gamma_D} p_0 v \, dx - \int_{\Gamma_N} p v.n \, dx \end{aligned}$$

L'intégrale  $\int_{\Gamma_D} p_0 v \, dx$  devrait en fait être interprétée comme un crochet de dualité, au moyen du théorème de trace pour  $H(\text{div}, \Omega)$ , ce qui permettrait de préciser les hypothèses sur la donnée  $p_0$ . Nous n'allons pas pousser l'étude théorique jusqu'à ce point.

Puisque  $v \in H_0(\text{div}, \Omega)$ , on a donc la formulation mixte suivante :

$$\begin{cases} a(u, v) - b(v, p) = -l(v) & \forall v \in H_0(\text{div}, \Omega) \\ b(u, q) = 0 & \forall q \in L^2(\Omega) \end{cases}$$

Avec

$$\begin{cases} a(u, v) = \int_{\Omega} K^{-1} \vec{u} \cdot \vec{v} \, dx & \forall u, v \in H_0(\text{div}, \Omega) \\ b(v, p) = \int_{\Omega} \text{div}(\vec{v}) p \, dx & p \in L^2(\Omega), \quad v \in H_0(\text{div}, \Omega) \\ l(v) = \int_{\Gamma_D} p_0 v \, dx & \forall v \in H_0(\text{div}, \Omega) \end{cases}$$

Toute solution de l'équation de départ est solution de la formulation mixte ci-dessus. Nous allons maintenant vérifier que la formulation variationnelle mixte admet une unique solution. Les points à vérifier sont les suivants [4] :

- la continuité de  $a$ ,  $b$  et  $l$
- la coercivité de  $a$  sur  $W = \{\vec{u} \in H(\text{div}, \Omega); b(\vec{u}, q) = 0\}$
- la condition *inf-sup* dite **LBB** (*Ladyshenskaya - Brezzi - Babuska*) est vérifiée.

### Continuité

$a$  est une forme continue si :

$$\exists c_1 > 0 \text{ tel que } |a(u, v)| \leq c_1 \|u\| \|v\| \quad \forall u, v \in H_0(\text{div}, \Omega)$$

Dans notre cas on a :

$$\begin{aligned} a(u, v) &= \int_{\Omega} K^{-1} \vec{u} \cdot \vec{v} \, dx \\ |a(u, v)| &= \left| \int_{\Omega} K^{-1} \vec{u} \cdot \vec{v} \, dx \right| \\ &\leq \int_{\Omega} |K^{-1} \vec{u} \cdot \vec{v}| \, dx \\ &\leq c_1 \int_{\Omega} \vec{u} \cdot \vec{v} \, dx \\ |a(u, v)| &\leq c_1 \|u\| \|u\| \end{aligned}$$

Par l'application de l'inégalité de Cauchy-Schwarz, avec  $c_1 = \alpha^{-1}$ , défini en hypothèse

On démontre de la même manière que  $b$  et  $l$  sont des formes continues c'est à dire

$$\exists c_2 > 0 \text{ tel que } |b(v, p)| \leq c_2 \|v\| \|p\| \quad \forall v \in H_0(\text{div}, \Omega), p \in L^2 \Omega$$

$$\exists c_3 > 0 \text{ tel que } |l(v)| \leq c_3 \|v\| \quad \forall v \in H_0(\text{div}, \Omega)$$

Dans ce cas on utilise le théorème de trace.

### Coercivité

Introduisons l'espace :

$$W' = \{\vec{u} \in H(\text{div}, \Omega); \text{div}(\vec{u}) = 0\}$$

$$a(u, u) = \int_{\Omega} K^{-1} \vec{u} \cdot \vec{u} \, dx \geq C \|u\|_{H(\text{div}, \Omega)}^2$$

avec  $C = \frac{1}{\gamma}$ , défini dans les hypothèses.

### Condition Inf-Sup

La condition *inf-sup* est définie comme suit :

$$\exists \beta > 0 \text{ tel que } \inf_{q \in L^2 \Omega} \sup_{v \in H_0(\text{div}, \Omega)} \frac{|b(v, q)|}{\|q\| \|v\|} \geq \beta$$

Pour le démontrer nous chercherons à montrer :

$$\forall q, \exists v_q \text{ tel que } : \frac{|b(v_q, q)|}{\|v_q\|} \geq \beta \|q\|$$

Pour ce faire nous allons utiliser l'équation :

$$\begin{cases} -\Delta \phi &= q & \text{dans } \Omega \\ \frac{\partial \phi}{\partial n} &= 0 & \text{sur } \Gamma_N \\ \phi &= 0 & \text{sur } \Gamma_D \end{cases}$$

Soit  $\rho \in H_D^1(\Omega)$ ,  $H_D^1(\Omega) = \phi \in H^1(\Omega), \phi|_{\Gamma_D} = 0$

$$a(\phi, \rho) = \int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \nabla \rho \, dx$$

$$L(\rho) = \int_{\Omega} q \rho \, dx$$

On remarque que :

- $a$  est bilinéaire continu car :

$$| \int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \nabla \rho \, dx | \leq \| \phi \| \| \rho \|$$

- $a$  est coercive car :

$$\int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \nabla \phi \, dx \geq \frac{1}{C_p^2} \| \phi \|^2, \quad C_p \text{ Constante de Poincaré}$$

- $L$  est linéaire continu car :

$$| \int_{\Omega} q \rho \, dx | \leq \| q \| \| \rho \|$$

Par conséquent, d'après le théorème de Lax Milgram le problème variationnel admet une solution unique  $\phi \in H_D^1$ . [2].

Nous posons alors :  $v_q = -\nabla \phi$ ,  $\| \nabla \phi \|$  est équivalente à la norme  $H^1$ , ceci est du à la condition de Dirichlet.

$$\begin{aligned} b(v_q, q) &= \int_{\Omega} \text{div} (v_q) q \, dx \\ &= - \int_{\Omega} \Delta \phi q \, dx \\ &= \int_{\Omega} q^2 \, dx \\ b(v_q, q) &= \| q \|_{L^2(\Omega)}^2 \end{aligned}$$

De même

$$\begin{aligned}
-\int_{\Omega} \Delta \phi \cdot \phi \, dx &= \int_{\Omega} q \cdot \phi \, dx \\
\int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \nabla \phi \, dx &= \int_{\Omega} q \cdot \phi \, dx \\
\|\nabla \phi\|^2 &\leq \|q\| \|\phi\| \quad \text{par Cauchy Schwarz} \\
\|\nabla \phi\|^2 &\leq C_p \|q\| \|\nabla \phi\| \quad \text{Avec l'inégalité de Poincaré généralisé} \\
\|\nabla \phi\| &\leq C_p \|q\|
\end{aligned}$$

Or

$$\|v_q\| = \|\nabla \phi\|$$

On a ainsi :

$$\begin{aligned}
\frac{|b(v_q, q)|}{\|v_q\|} &= \frac{\|q\|_{L^2(\Omega)}^2}{\|v_q\|_{L^2(\Omega)}} \\
&\geq \frac{\|q\|_{L^2(\Omega)}^2}{C_p \|q\|_{L^2(\Omega)}} \\
&\geq \frac{1}{C_p} \|q\|_{L^2(\Omega)}
\end{aligned}$$

Donc notre système vérifie toutes les conditions énoncé précédemment. Il admet donc une solution. Nous allons pouvoir passé aux éléments finis de Raviart Thomas.

## 2.2 Éléments finis de Raviart Thomas

Ainsi, nous avons le système : pour  $u \in H_0(\text{div}, \Omega)$  et  $p \in L^2(\text{div})$

$$\begin{cases} a(u, v) - b(v, p) = -l(v) & \forall v \in H_0(\text{div}, \Omega) \\ b(u, q) = 0 & \forall q \in L^2(\text{div}) \end{cases}$$

qui est la formulation variationnelle du problème mixte pour approcher numériquement le problème.

Définissons les espaces d'éléments finis :

$$V_h = \{v \in V \mid v|_K = (b_K x_1 + a_K, b_K x_2 + c_K), a_K, b_K, c_K \in \mathbb{R}, K \in K_h\}$$

avec  $\bar{\Omega} = \bigcup_{i=1}^N \bar{K}_i$  et  $N$  le nombre de triangles dans  $K_h$ .  $K_h$  est donc une triangulation de  $\Omega$ , et  $A_d$ ,  $d = 1, 2, 3$  l'ensemble des arêtes de chaque triangle.

$$W_h = \{w : w \text{ est constant sur chaque triangle } K_h\}$$



Notons que  $V_h$  peut être décrit comme ceci :

$V_h = \{v : v|_K = (b_K x_1 + a_K, b_K x_2 + c_K), K \in K_h, a_K, b_K, c_K \in \mathbb{R},$   
et les composantes normales de  $v$   
sont continues entre les bords intérieurs en  $K_h\}$ .

Cet espace est appelé  $RT_0$ . Tout polynôme  $v \in RT_0$  est parfaitement déterminé si on connaît  $b_h = \int_{A_h} v \cdot \nu \, dx$ ,  $h = 1, 2, 3$ . Le triplet est unisolvant.

**Preuve** Soit l'application :

$$\begin{aligned} \Phi : RT_0 &\rightarrow \mathbb{R}^3 \\ v &\rightarrow (b_h)_{h=1,2,3} \end{aligned}$$

La dimension de  $RT_0$  est égale à celle de  $\mathbb{R}^3$ . Montrons alors que  $\Phi$  est injective ce qui impliquera que  $\Phi$  est bijective.

Supposons  $b_i = 0 \quad \forall i = 1, 2, 3$ , avec  $v \in RT_0$ . On a alors  $\text{div}(\vec{v}) = 2b_K$

De plus en utilisant la formule de Green :

$$\int_{K_h} \text{div}(v) \, dx = \int_{A_h} v \cdot \nu \, dx = 0$$

Ainsi  $b_k = 0$ , d'où  $\vec{v} = (a_K, c_K)$ . La nullité des flux entraîne que le vecteur  $(a_K, c_K)$  est orthogonale à deux directions non colinéaires donc c'est le vecteur nul.

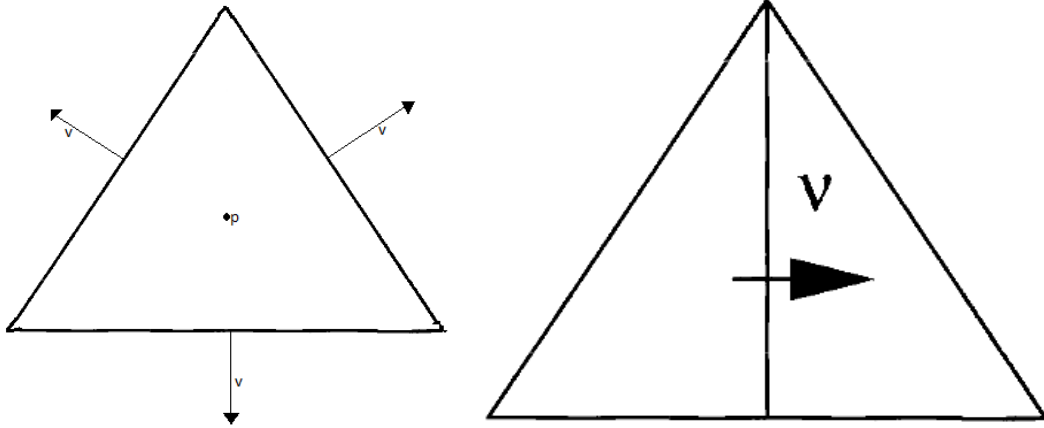


FIGURE 2.1 – élément finis Raviart Thomas

Avec ces définitions on a :  $V_h \subset V$  et  $W_h \subset W$ . Ainsi la méthode des éléments finis mixtes est défini comme suit :

Trouver  $u_h \in V_h$  et  $p_h \in W_h$  tels que :

$$\begin{cases} a(u_h, v) - b(v, p_h) = -l(v) & \forall v \in V_h \\ b(u_h, q) = 0 & \forall q \in W_h \end{cases}$$

Cette formulation admet aussi une unique solution, cela se démontre de la même manière qu'en section 2.1, page 11.

Si  $u$ ,  $p$  et  $u_h$ ,  $p_h$  sont les solutions respectives des différents problèmes mixtes posés, on peut démontrer que l'estimation de l'erreur est la suivante :

$$||p - p_h|| + ||u - u_h|| \leq Ch$$

où  $C$  dépend de la taille des deuxièmes dérivées partielles de  $p$  [8].

Nous allons montrer que la formulation variationnelle discrète se ramène à un système linéaire. Soit  $\{x_i\}$ ,  $i = 1, \dots, M$  l'ensemble des milieux des bords  $A_h$  des triangles  $K_h$ . A chaque point  $x_i$ , nous associons un vecteur normal unitaire  $\nu_i$ . Pour  $x_i \in \Gamma$ ,  $\nu_i$  n'est autre que la normale unitaire extérieure à  $\Gamma$ . Pour  $x_i \in e = \bar{K}_1 \cap \bar{K}_2$ ,  $K_1, K_2 \in K_h$ . Nous définissons maintenant les fonctions de base de  $V_h$  par :

$$\int_{A_h} (\varphi_i \cdot \nu_i)(x_j) dx = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

avec  $i = 1, \dots, M$ .

Toute fonction  $v \in V_h$  a une unique représentation

$$v(x) = \sum_{i=1}^M v_i \varphi_i(x), \quad x \in \Omega,$$

où  $v_i = (v \cdot \nu_i)(x_i)$ . Aussi les fonctions de base  $\psi_i \in W_h$ ,  $i = 1, \dots, N$ , sont définies par :

$$\psi_i(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } i \in K_i \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Toutes les fonctions  $w \in W_h$  ont aussi la représentation suivante :

$$q(x) = \sum_{i=1}^N q_i \psi_i(x), \quad x \in \Omega, q_i = q|_{K_i}$$

En utilisant les fonctions de base obtenue notre formulation mixte s'écrit :

$$\begin{cases} a(u_h, \varphi_i) - b(\varphi_i, p_h) = -l(\varphi_i) & i = 1, \dots, M \\ b(u_h, \psi_i) = 0 & i = 1, \dots, N \end{cases}$$

On pose

$$u_h(x) = \sum_{i=1}^M u_i \varphi_i(x), \quad u_i = u_h(x_i)$$

$$p_h(x) = \sum_{k=1}^N p_k \psi_k(x), \quad p_k = p_h|_{K_i}$$

Lorsqu'on remplace ces deux expressions dans l'équation précédente on obtient :

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^M a(\varphi_i, \varphi_j) - \sum_{i=1}^N b(\varphi_j, \psi_k) p_k = -l(\varphi_i) & j = 1, \dots, M \\ \sum_{i=1}^M b(\varphi_i, \psi_j) = 0 & j = 1, \dots, N \end{cases}$$

On introduit ainsi les matrices et vecteurs suivants :

$$A = (a_{ij})_{i,j=1,\dots,M}, \quad B = (b_{jk})_{k=1,\dots,N,j=1,\dots,M}$$

$$U = (u_i)_{i=1,\dots,M} \quad P = (p_k)_{k=1,\dots,N} \quad L = (l_j)_{j=1,\dots,N}$$

où

$$a_{ij} = \int K^{-1} \varphi_i \varphi_j \, dx, \quad b_{jk} = - \int \operatorname{div} (\varphi_j) \psi_k \, dx, \quad l_j = \int p_0 \psi_j \, dx$$

Cela nous permet de définir le système suivant :

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -L \\ 0 \end{pmatrix}$$

Soit la matrice :

$$M = \begin{pmatrix} A & B \\ B^T & 0 \end{pmatrix}$$

La matrice  $A$  est symétrique définie positive. Tandis que la matrice  $B$  est creuse avec deux coefficients non nulles dans chaque rangée dans le cas présent.

# Chapitre 3

## Mise en Œuvre

Dans ce chapitre nous explicitons l'application de notre problème. Pour ce faire nous allons discrétiser notre problème avec le mailleur de notre choix, dans ce cas nous utiliserons **FreeFem++**. Ensuite nous passerons à l'implémentation sous Nous **LifeV**.

### 3.1 Construction du maillage

Pour la modélisation géométrique du domaine il était possible d'utiliser différents mailleurs. Notre choix c'est porté sur **FreeFem++**.

**FreeFem++** est un logiciel libre développé au laboratoire Jacques-Louis Lions de l'université Pierre et Marie Curie dédié à la résolution d'équation aux dérivées partielles par des méthodes de types éléments finis [7]. Celui-ci permet donc de créer des maillages, ainsi que de résoudre des équations aux dérivées partielles par des méthodes de type éléments finis. Ici nous ne donnerons pas une liste des diverses fonctionnalités de **FreeFem++** nous présentons juste la fonction que nous avons utilisée principalement : `savemesh(NomMaillage,NomFichier.msh)` qui permet de sauver un maillage dans `NomFichier.msh`. Lors de la création de notre maillage nous obtenons le résultat figure 3.1

La discrétisation du domaine se fait en fixant le nombre d'arête sur chaque bord. Étant donné que le domaine présente en hauteur plusieurs bords de longueur différentes (six).

**Remarque** : Le domaine obtenu n'est pas la représentation réelle de notre cas d'étude nous avons effectué un redimensionnement. En effet selon les données de notre étude le résultat est plus proche de la figure 3.2. Le modèle redimensionné a pour coordonnée  $\tilde{Y} = L_y \times Y$ ,  $L_y = 20$  le facteur d'échelle. En faisant cela nous devons mettre notre problème à l'échelle ce qui sera détaillé dans la prochaine section.

Le maillage obtenu figure 3.1 est bien représenté cependant il existe un inconvénient. En effet en **FreeFem++** lorsqu'aucune condition n'est spécifiée sur un bord, le logiciel considère automatiquement que la condition au bord est une condition de Neumann Homogène :  $\frac{\partial U}{\partial n} = 0$ . Par conséquent les bords intérieurs du domaine présenteront de faux résultats lors de la visualisation.

Pour pallier ce problème nous avons donc décidé dans un premier temps de supprimer les bords intérieurs voir figure 3.3. Cependant avec ce maillage nous n'arrivons pas à déterminer les différentes régions.

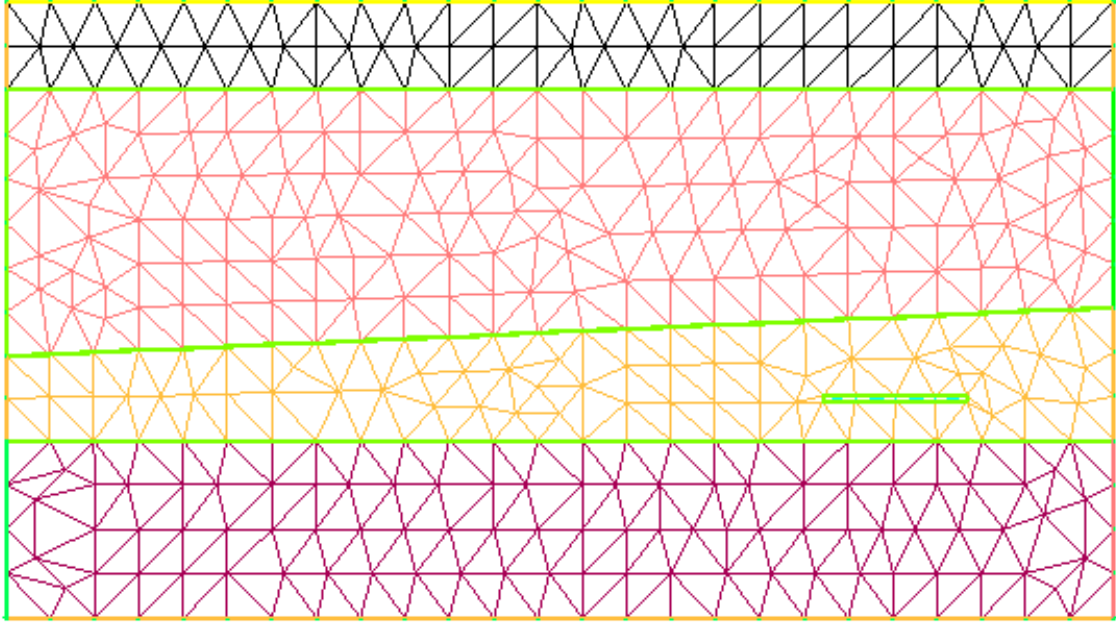


FIGURE 3.1 – Domaine redimensionné (695m× 20 en hauteur 25000m en Largeur)



FIGURE 3.2 – Domaine réel (695m en hauteur et 25000m en Largeur)

C'est ainsi qu'il fut nécessaire de créer un script bash permettant de modifier le fichier *.msh*. Celui-ci modifie le label des triangles appartenant aux interfaces et celui des arêtes considérées comme étant des arêtes aux bords pour les convertir en arêtes internes.

Ayant présenté le maillage, nous allons exposer plus en détail la technique de mise à l'échelle.

## 3.2 Mise à échelle

L'étude du problème posé s'effectue dans un domaine redimensionné avec un nouvel  $Y$  qu'on appellera  $\tilde{Y}$  tel que :

$$\tilde{Y} = L_y \times Y, \quad \text{avec } L_y = 20$$

En faisant cela l'étude théorique du problème est modifiée, nous avons l'apparition de facteur d'échelle. Donc pour résoudre le problème redimensionné équivalent au problème réel nous devons reformuler notre système d'équation.

### Présentons un cas général

L'équation sur laquelle nous travaillerons est celle définie section 1.2.3 avec  $U = \vec{u}$

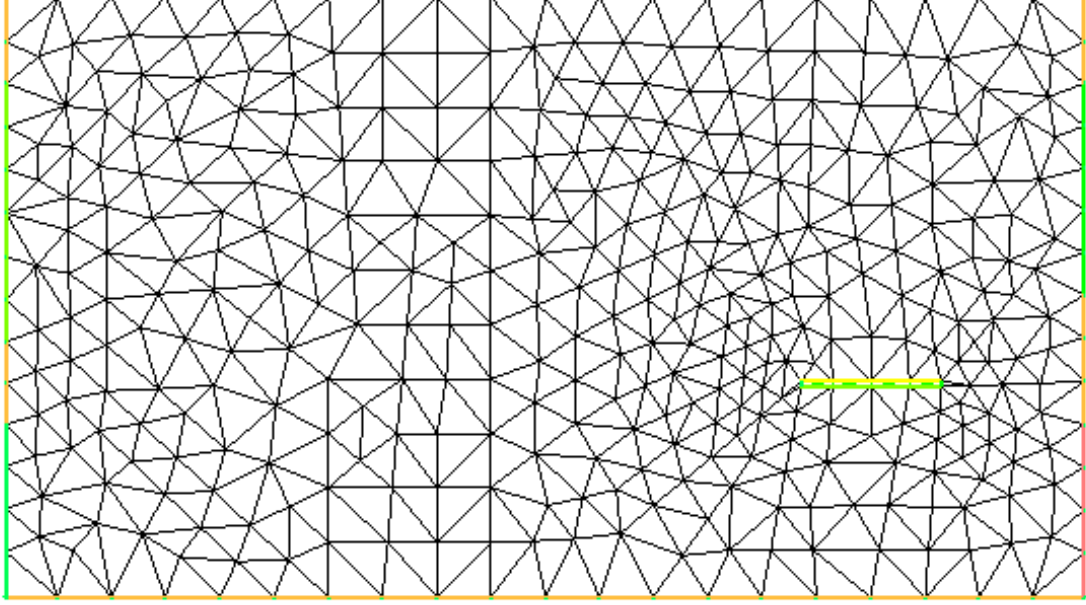


FIGURE 3.3 – Domaine redimensionné, bords intérieur supprimés

Maintenant nous établissons la nouvelle équation vérifiant les conditions d'échelles.

Soit  $X, Y, U = \begin{cases} U_x \\ U_y \end{cases}$ ,  $H$  les inconnues se rapportant au domaine réel et  
 $\tilde{X}, \tilde{Y}, \tilde{U} = \begin{cases} \tilde{U}_x \\ \tilde{U}_y \end{cases}$ ,  $\tilde{H}$  et ceux se rapportant au domaine redimensionné tel qu'on ait :

$$\tilde{X} = L_x \times X, \quad \tilde{Y} = L_y \times Y, \quad \text{avec } L_x, L_y \text{ les coefficients d'échelle}$$

$$\begin{cases} U_x = \frac{1}{C_x} \tilde{U}_x(\tilde{X}, \tilde{Y}) = \frac{1}{C_x} \tilde{U}_x(L_x X, L_y Y) \\ U_y = \frac{1}{C_y} \tilde{U}_y(\tilde{X}, \tilde{Y}) = \frac{1}{C_y} \tilde{U}_y(L_x X, L_y Y) \end{cases} \quad \text{avec } C_x, C_y \text{ les coefficients d'échelle}$$

$$H = \frac{1}{\alpha} \tilde{H}(\tilde{X}, \tilde{Y}) = \frac{1}{\alpha} \tilde{H}(L_x X, L_y Y) \Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial H}{\partial X} = \frac{L_x}{\alpha} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{X}} \\ \frac{\partial H}{\partial Y} = \frac{L_y}{\alpha} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{Y}} \end{cases} \quad \text{avec } \alpha \text{ coefficient d'échelle}$$

Calculons les dérivées partielles

$$\begin{cases} \frac{\partial U_x}{\partial X} = \frac{1}{C_x} \frac{\partial \tilde{U}_x}{\partial \tilde{X}} = \frac{1}{C_x} \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \tilde{X}} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial \tilde{X}} = \frac{L_x}{C_x} \frac{\partial \tilde{U}_x}{\partial \tilde{X}} \\ \frac{\partial U_y}{\partial X} = \frac{1}{C_y} \frac{\partial \tilde{U}_y}{\partial \tilde{Y}} = \frac{1}{C_y} \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \tilde{Y}} \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial \tilde{Y}} = \frac{L_y}{C_y} \frac{\partial \tilde{U}_y}{\partial \tilde{Y}} \end{cases}$$

On a donc :

$$\operatorname{div} (\tilde{U}) = \frac{\partial \tilde{U}_x}{\partial \tilde{X}} + \frac{\partial \tilde{U}_y}{\partial \tilde{Y}} = \frac{C_x}{L_x} \frac{\partial U_x}{\partial X} + \frac{C_y}{L_y} \frac{\partial U_y}{\partial Y}$$

Cependant la divergence doit vérifier la condition d'échelle suivante :

$$\operatorname{div} (\tilde{U}) = \lambda \operatorname{div} (U) = 0, \quad \text{avec } \lambda \text{ constante d'échelle}$$

Donc la condition suivante doit être vérifiée :  $\frac{C_x}{L_x} = \frac{C_y}{L_y}$ . Et puisque  $\operatorname{div} (U) = 0$ , on peut prendre  $\lambda = 1$  et donc  $C_x = L_x$  et  $C_y = L_y$

Passons maintenant à la loi de Darcy  $U = -K \nabla H$ .

Avec la définition  $\tilde{H}$  et les calculs précédents, nous avons les résultats suivants :

$$\begin{cases} U_x = -K \frac{\partial H}{\partial X} \\ U_y = -K \frac{\partial H}{\partial Y} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{1}{L_x} \tilde{U}_x = -K \frac{L_x}{\alpha} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{X}} \\ \frac{1}{L_y} \tilde{U}_y = -K \frac{L_y}{\alpha} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{Y}} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \tilde{U}_x = -K \frac{L_x^2}{\alpha} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{X}} \\ \tilde{U}_y = -K \frac{L_y^2}{\alpha} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{Y}} \end{cases}$$

Le système d'équation relatif à la géométrie redimensionné est :

$$\begin{cases} \tilde{U} = -K L \vec{\nabla} \tilde{H} & \text{dans } \tilde{\Omega} \\ \operatorname{div} \tilde{U} = 0 & \text{dans } \tilde{\Omega} \\ \tilde{U} \cdot n = 0 & \text{sur } \tilde{\Gamma}_N \\ \tilde{H} = \alpha H_0 & \text{sur } \tilde{\Gamma}_D \end{cases}$$

Avec  $L = \begin{bmatrix} \frac{L_x^2}{\alpha} & 0 \\ 0 & \frac{L_y^2}{\alpha} \end{bmatrix}$ , nous avons donc un problème du même type avec une perméabilité anisotrope.

Après obtention des différents résultats  $(\tilde{H}, \tilde{U})$ , nous devons nous ramener aux résultats du problème réel. Et pour ce faire nous devons diviser les résultats obtenus par les coefficients d'échelle respectifs.

$$U = \begin{bmatrix} \frac{1}{L_x} & 0 \\ 0 & \frac{1}{L_y} \end{bmatrix} \tilde{U} = \begin{cases} \frac{1}{L_x} \tilde{U}_x \\ \frac{1}{L_y} \tilde{U}_y \end{cases}, \quad H = \frac{1}{\alpha} \tilde{H}$$

Ceci conclut l'étude du cas général. Si nous voulons nous ramener à notre cas d'étude spécifique nous avons les valeurs suivantes pour les coefficients d'échelles :

$$L_x = 1, \quad L_y = 20 \quad \alpha = 1$$

Nous pouvons dès maintenant passer à l'implémentation avec **LifeV**.

### 3.3 Implémentation dans LifeV

**LifeV** est une bibliothèque d'éléments finis fournissant des implémentations des méthodes mathématiques et numériques [6]. Elle est à la fois utile dans la recherche et sert de bibliothèque de production. Elle a déjà été utilisée dans le contexte médical et industriel afin de simuler l'interaction fluide-structure et de transport de masse. **LifeV** a été créé avec la collaboration de quatre établissements : l'école Polytechnique Fédérale de Lausanne (CMCS) en Suisse, Politecnico di Milano (MOX) en Italie, l'INRIA (REO, ESTIME) en France et l'Université Emory (Sc. Comp) aux Etats-Unis.

Le développement de **LifeV** a été financé au cours des années par un certain nombre de sujets, y compris la Commission européenne, la Fondazione Politecnico, Siemens Medical Solutions Italie, la Fondation d'anévrisme cérébral, la National Institute of Health, la National Science Foundation, le ministère italien de la recherche et de l'éducation universitaire.

On trouvera plus d'informations sur le site web<sup>1</sup> dédié.

Notre but est d'effectuer une implémentation en **LifeV** pour résoudre le système d'équations suivants :

$$\left\{ \begin{array}{ll} u = -K\nabla H & \text{dans } \Omega \\ \operatorname{div}(\vec{u}) = 0 & \text{dans } \Omega \\ \frac{\partial H}{\partial n} = 0 & \text{sur } \Gamma_1 \\ H = 180 + \frac{160x}{25000} & \text{Sur } \Gamma_2 \\ H = 200 & \text{sur } \Gamma_3 \\ H = 310 & \text{sur } \Gamma_4 \\ H = 286 & \text{sur } \Gamma_5 \\ H = 289 & \text{sur } \Gamma_6 \end{array} \right.$$

Pour compiler le code **LifeV**, nous utilisons **cmake**<sup>2</sup> qui permet de créer automatiquement un **makefile** et de faire la compilation. Le fichier chargé de gérer la compilation avec **cmake** est **CMakeLists.txt**.

**LifeV** est une bibliothèque contenant des modules qu'il est nécessaire de modifier pour créer son propre problème à résoudre. Les sources globales sont :

- **Darcy.cpp** : Fichier résolvant le problème posé. Celui-ci sera présenté plus en détail par la suite.
- **data** : Fichier contenant les données pour la résolution du problème posé, le nom des fichiers en sortie, le nom du maillage, etc
- **main.cpp** : Programme principal,
- **parameterList.xml** : Fichier lié aux paramètres tel que le conditionneur, le maximum d'itérations etc.
- **user\_fun.cpp** : Fichier contenant les différentes fonctions pour résoudre le problème, la perméabilité, le second membre, etc
- **Darcy.hpp** : Fichier contenant les prototypes des fonctions présentes dans **Darcy.cpp**
- **user\_fun.hpp** : Fichier contenant les prototypes des fonctions présentes dans **user\_func.cpp**.

Les sources du module sur lesquelles nous avons travaillées sont :

---

1. <http://www.lifev.org/>  
2. <http://www.cmake.org/cmake/help/help.html>



- Darcy.{cpp,hpp}
- user\_fun.{cpp,hpp}

Présentons un peu plus en détails les différentes modifications apportées.

### 3.3.1 Programmes user\_fun.{cpp,hpp}

Dans `user_fun.cpp` nous définissons des conditions aux bords, la perméabilité, le second membre. Le programme suit la structure suivante : définitions de la perméabilité de chaque sous-domaine, initialisation du second membre et enfin l'initialisation de conditions aux bords. Comme nous pouvons le remarquer nous devons apporter beaucoup de modifications pour qu'il puisse résoudre le problème *COUPLEX*.

Tout d'abord la définition de la perméabilité. Cette définition se fait avec la fonction : `Matrix inversePermeability::eval ( const UInt& iElem, const Vector3D& P, const Real& /*time*/ ) const`. Celle-ci prend en paramètres un entier `iElem`, un vecteur 3D `P` et le temps qui ne sera pas utilisé ici. Elle renvoie l'inverse de la perméabilité. La structure de cette fonction est simple : nous avons commencé par définir les différentes perméabilités par zones et nous avons ensuite construit la matrice inverse de  $K$ .

Maintenant nous passons au second membre. Celui-ci vaut  $f = 0$ . Nous avons donc initialisé la fonction définissant le second membre à zéro.

Enfin nous passons à la définition des bords pour les conditions aux limites. Nous allons tout d'abord définir les labels liés au bord :

```
const UInt Neumann = 1;      Pour le bord  $\Gamma_1$ 
const UInt Top = 2;         Pour le bord  $\Gamma_2$ 
const UInt LimestoneLeft = 3; Pour le bord  $\Gamma_3$ 
const UInt LimestoneRight = 4; Pour le bord  $\Gamma_4$ 
const UInt DoggerLeft = 5;   Pour le bord  $\Gamma_5$ 
const UInt DoggerRight = 6;  Pour le bord  $\Gamma_6$ 
```

Suite à cela nous définissons les fonctions réelles qui seront utilisées dans l'objet conditions aux limites. // Boundary condition of Dirichlet

// Top

```
Real DirichletTop ( const Real&, const Real&, const Real&, const Real&, const ID& );
```

// Limestone Left

```
Real DirichletLl ( const Real&, const Real&, const Real&, const Real&, const ID& );
```

Nous ne présentons que deux fonctions, celle pour la condition de Neumann et une avec des conditions de Dirichlet. Ces fonctions prennent en paramètres trois nombres réels (`real`) qui représentent les coordonnées  $x$ ,  $y$ , et  $z$  et elles renvoient la valeur liée au bord pour lequel cette fonction est définie.

Toutes ces entrées sont définies dans le fichier `user_fun.hpp`. Puisque les labels et les fonctions sont bien définis nous n'avons plus qu'à appliquer les conditions aux limites. La fonction chargée de le faire est : `addBC`.

```
void addBC( const std::string& name,
const EntityFlag& flag,
```

```

const bcType_Type& type,
const bcMode_Type& mode,
BCFunctionBase& bcf,
const std::vector<ID>& comp );

```

Elle prend en paramètre :

- une chaîne de caractères pour le nom de la condition aux limites
- le label lié à la condition limite
- le type, défini dans le tableau ci-dessous
- le mode, défini dans le tableau ci-dessous
- une fonction impliquant la condition limite si nécessaire
- un vecteur stockant la liste des composantes impliquées dans la condition limite

Nom	options	Description
type	Natural Essential Robin	Neumann Dirichlet
mode	Scalar Full Component Normal Tangential	conditions au bord à 1 dimension conditions au bord à 3 Composante conditions au bord à Composante séparé conditions au bord normal conditions au bord tangentielle

TABLE 3.1 – Description des paramètres de conditions aux limites

Dans notre exemple, nous rappelons que nous avons deux types de condition aux limites, Neumann et Dirichlet, que nous devons fixer sur six faces différentes : le bord au dessus, le bord droit et gauche de la couche de calcaire, le bord droit et gauche de la couche « Dogger » et partout ailleurs nous avons du Neumann.

Nous n'avons plus qu'à modifier la fonction pour la mise en œuvre des conditions aux bords, `void setBoundaryConditions(bcHandlerPtr_Type & bcDarcy)`, avec tous les paramètres et fonctions que nous avons définis auparavant. Elle prend en paramètre un pointeur de type `bcHandlerPtr_Type` qui contiendra les conditions aux limites.

### 3.3.2 Programme principal main.cpp

Le fichier qui représente le programme principal ne fait que 20 lignes environs. En effet nous y faisons juste appel aux fonctions qui résolvent le problème. Voici le contenu du fichier `main.cpp` :

```

#include <lifev/core/LifeV.hpp>
#include <lifev/core/algorithm/PreconditionerIfpack.hpp>
#include <lifev/core/algorithm/PreconditionerML.hpp>
#include "Darcy.hpp"
using namespace LifeV;
int main(int argc, char* argv[ ])
{

```

```

#ifdef HAVE_MPI
    MPI_Init( &argc, &argv );
#endif
    Darcy_linear Darcy( argc, argv );
    // Error of the problem
    const LifeV::Real error = Darcy.run(); Fonction principale
#ifdef HAVE_MPI
    MPI_Finalize();
#endif
    return ( EXIT_SUCCESS );
}

```

### 3.3.3 Programme Darcy.{cpp,hpp}

Le fichier `Darcy.cpp` contient les fonctions pour la résolution de notre problème. Il est structuré comme suit :

- Initialisation du maillage et partition,
- Mise en œuvre des conditions aux limites
- Création et applications des différents espaces pour la résolution.
- Résolution du problème
- Exportation des différents résultats

Dans **LifeV** nous avons l'objet chargé de contenir les données du maillage : `MeshData`. Après avoir obtenu le maillage nous passons à sa partition. Cette partition se fait grâce à la fonction `doPartition` qui prend en paramètres le maillage entier et l'identifiant du processus en cours et renvoie le maillage qui lui est associé.

Tout ceci se fait comme suit dans le code :

```

// Creation de l'objet maillage
MeshData meshData;
// Mise en place du fichier contenant le maillage
meshData.setup(dataFile, Members->discretization_section"/space_discretization");
// Creation du maillage
regionMeshPtr_Type fullMeshPtr( new regionMesh_Type );
// Mise en place du maillage
readMesh( *fullMeshPtr, meshData );
// Partition local du maillage.
regionMeshPtr_Type meshPtr ( new regionMesh_Type ( Members->comm ) );
// Creation de la partition du maillage
meshPartitionerPtr_Type meshPart ( new meshPartitioner_Type );
// Effectue la partition avec la bibliothèque parMetis
meshPart->doPartition ( fullMeshPtr, Members->comm );
// Assignment du maillage local.
meshPtr = meshPart->meshPartition();
// Efface les variables devenues inutiles
meshPart.reset();

```

```
fullMeshPtr.reset();
```

Noms	options	Descriptions
mesh_dir		Chemin vers le répertoire du maillage
mesh_file		Nom du fichier contenant le maillage
vel_order	P1 $RT_0$ P2	ordre de discrétisation de la vitesse
press_order	P1 P2	ordre de discrétisation de la pression

TABLE 3.2 – Description des paramètres de discrétisation

**Remarque** : Dans **Lifev** c'est parMetis<sup>3</sup> qui est chargé de partitionner le maillage à la volée. Cela signifie que nous n'avons pas besoin de fournir le maillage partitionné afin d'avoir la simulation en cours. Dans notre cas, après l'appel du constructeur **MeshPartitioner**, **meshPart** va stocker la partie locale du maillage.

Ensuite nous avons la mise en œuvre des conditions aux limites. Pour ce faire nous devons juste faire appel à la fonction **setBoundaryConditions**

Puis nous avons la création des différents espaces d'éléments finis, pour la résolution du problème posé.

Nous avons 3 types d'espaces, l'espace d'éléments finis pour la pression, l'espace d'éléments finis pour la vitesse et l'espace pour l'interpolation de la vitesse. Pour chacun de ces espaces nous devons définir la référence des éléments finis utilisés : **const ReferenceFE**, la règle de quadrature : **const QuadratureRule** et la règle de quadrature pour les bords **const QuadratureRule**. Lorsque ceux ci sont bien définis il ne reste plus qu'à associer chaque paramètre défini ci-dessus à son espace. La création d'espace se fait avec la fonction **fESpacePtr\_type**. Celle ci prend en paramètres :

- Le maillage
- le type d'élément choisi
- La dimension des champs

Nous avons le maillage, les conditions aux limites et les espaces d'éléments finis, toutes les données sont réunies pour la résolution du problème. Avec **LifeV** nous avons le type suivant : **DarcyLinearSolver\_Type DarcySolver**;

C'est un pointeur qui contient les champs pour la résolution d'un problème de Darcy. Ainsi la variable **DarcySolver** à comme champs :

- **setData** : définit les données pour le solveur
- **setDisplayer** : règle l'affichage du problème

---

3. <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/parmetis/overview>

- `setup` : phase d'installation pour le solveur linéaire
- `setInversePermeability` : définit l'inverse de la perméabilité
- `setBoundaryCondition` : impose les conditions aux limites
- `setPrimalField` : définit de champs de pression
- `setdualField` : définit le champs de vitesse
- `solve` : résolution du problème

Explicitons un peu plus en détails chacun de ses champs.

`DarcySolver.setData` : prend en paramètre le pointeur sur le fichier de donnée pour préparer le calcul de la solution.

`DarcySolver.setInversePermeability` : prend en paramètre la fonction inverse de la perméabilité, c'est ici que rentre en jeu la perméabilité calculée dans la fonction `user_func.cpp`

`DarcySolver.setBoundaryCondition` : comme pour la perméabilité c'est ici que rentrent en jeu les résultats se rapportant aux conditions limites calculées précédemment.

`DarcySolver.setprimalField/-/.setdualField/-/.setHybridField` prends en paramètres les espaces liés à chacun des champs respectifs et définit les différents champs utilisés pour résoudre le problème

`DarcySolver.solve` : avec toutes les données recueillies auparavant résout le problème de Darcy.

Notre problème est maintenant résolu nous devons passer maintenant à la visualisation. En **LifeV**, on utilise Paraview pour post-traiter les solutions du problème. L'écriture d'une solution de Paraview est assez simple en utilisant la classe `ExporterHDF5`.

```
// nom du fichier
const std::string exporterFileName=dataFile("exporter/file_name",
"PressureVelocity");
exporter.reset(new ExporterHDF5<regionMesh_Type>
(dataFile,exporterFileName));
```

Permet d'écrire les champs de données résultats.

Nous définissons une variable qui stockera la solution, pour la vitesse et la pression :

```
primalExporter.reset( new vector_Type ( primalField->getVector(),
exporter->mapType() ) );
dualExporter.reset ( new vector_Type ( dualInterpolated->getVector(),
exporter->mapType() ) );
```

Enfin, nous sauvegardons les variables :

```
// Pression
exporter->addVariable ( ExporterData < regionMesh_Type >::ScalarField,
dataFile( "exporter/name_primal", "Pressure" ),
p_FESpacePtr,
primalExporter,
static_cast<UInt>( 0 ),
```

```

        ExporterData < regionMesh_Type >::SteadyRegime,
        ExporterData < regionMesh_Type >::Cell );

// Vitesse
exporter->addVariable ( ExporterData < regionMesh_Type >::VectorField,
                        dataFile( "exporter/name_dual", "Velocity" ),
                        uInterpolate_FESpacePtr,
                        dualExporter,
                        static_cast<UInt>( 0 ),
                        ExporterData < regionMesh_Type >::SteadyRegime,
                        ExporterData < regionMesh_Type >::Cell );

```

Le format de fichier est *xdmf* qui présente deux fichier : un fichier d'extension *.h5* qui contient les donnée en binaire, et un fichier d'extension *.xmf* qui contient la description des données.

# Chapitre 4

## Visualisations et Commentaires

Le chapitre précédent présentait la mise en œuvre du problème d'étude *COUPLEX*, c'est à dire la création du maillage et l'implémentation en **LifeV**. Ce chapitre présentera les résultats visualisés avec ParaView<sup>1</sup>. Nous allons donc commencer par présenter les résultats obtenus sur le domaine réel, et ensuite nous travaillerons sur le domaine redimensionné. Passons maintenant à la présentation des résultats sur le domaine réel.

### 4.1 Domaine Réel

Le problème présenté section 1.2.3, page 9 admet une unique solution  $(\vec{u}, H)$  ( $\vec{u}$  la vitesse et  $H$  la charge hydrodynamique). Nous avons présenté notre domaine réel dans la section 3.1, page 19. Celui-ci pose un problème de visualisation dû à sa forme. Ainsi pour pouvoir effectuer une visualisation nous allons utiliser un facteur d'échelle en paraview. Pour ce faire il suffit de changer le facteur en  $y$  (qui vaut 1) par 20. Ceci nous permet de visualiser plus aisément les résultats.

Pour montrer la convergence de la solution, il est nécessaire d'effectuer plusieurs maillages afin de voir vers quelle solution nous aboutissons.

Discrétisation	Nb triangles	nb inconnus
14x25	240	396
56x100	1090	1788
70x125	1532	2490
140x250	4580	7257
280x500	16560	25585
560x1000	64978	99024
42x1500	128574	194403
56x2000	228278	344773
84x3000	511218	769911

TABLE 4.1 – Les différents maillages

Le tableau 4.1 présente les différents maillages utilisés pour aboutir à la solution du problème. La discrétisation  $M \times N$  représente les paramètres conférés à **FreeFem++** pour qu'il

---

1. <http://www.paraview.org>

puisse construire le maillage.  $M$  représente le nombre d'arêtes suggérées en hauteur et  $N$  le nombre d'arêtes suggérées en largeur. En effet **FreeFem++** cherche par défaut à construire un maillage isotrope, ce qui cause des difficultés avec une géométrie très anisotrope telle que notre domaine. La discrétisation en sortie peut être différente de celle qui est demandée.

Le maillage 14x25 présenté 4.1, page 30, est un maillage grossier qui est utile pour présenter le problème lié à la discrétisation du domaine.

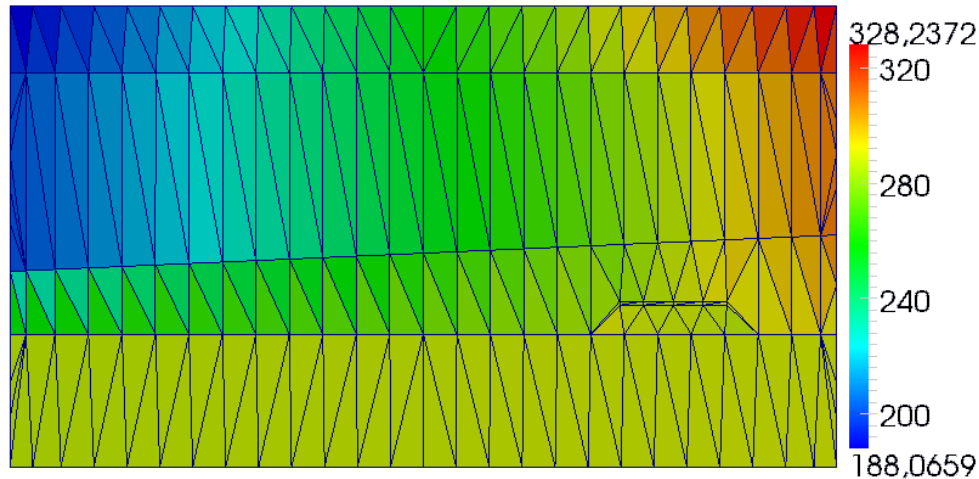


FIGURE 4.1 – Répartition charge hydrodynamique maillage 14x25

La figure 4.1 représente la discrétisation du domaine avec comme donnée 14x25. Le maillage est régulier et isotrope pour le domaine réel, cependant il ne permet pas de représenter précisément les résultats physiques car en hauteur nous avons besoin de plus de triangle comme la figure 3.1, page 20. Ceci sera le cas pour tous les maillages appliqués au domaine réel. Par conséquent nous aboutirons à des résultats non satisfaisant car la discrétisation en hauteur n'est pas convenable.

Nous allons maintenant analyser les résultats obtenus pour les différents inconnus du problème en commençant par la charge hydrodynamique.

#### 4.1.1 La charge hydrodynamique

Pour analyser les résultats obtenus pour la charge hydrodynamique nous allons analyser l'évolution des résultats obtenus par les maillages 14x25, 560x1000 et 84x3000.

Le résultats obtenus 4.2 n'est physiquement pas exact. En effet nous observons une ligne de champs dans la zone «Dogger», or nous avons vu, dans la section 1.2.3, page 9, que les conditions limites sont  $H = 280$  à gauche et  $H = 286$  à droite et au-dessus une condition de Neumann Homogène. Par conséquent la charge hydrodynamique est constante dans cette zone et donc elle ne doit présenter aucune lignes de champs.

La figure 4.3 représente la solution obtenue avec le maillage 560x1000. Nous remarquons une grande différence avec le maillage 14x25. Nous commençons à converger vers une solution. Cependant lorsqu'on zoome dans la zone encadrée on observe des oscillations voir figure 4.4.



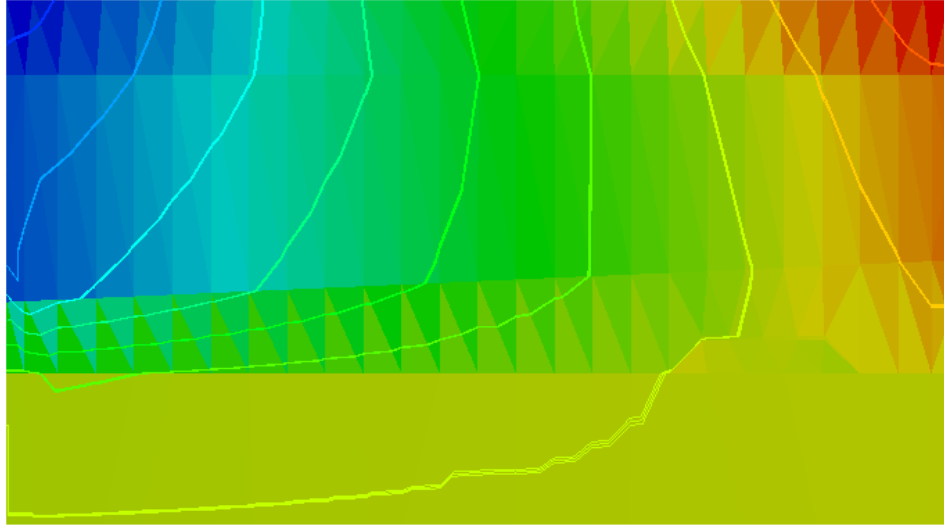


FIGURE 4.2 – Répartition charge hydrodynamique maillage 14x25, avec ligne de champ

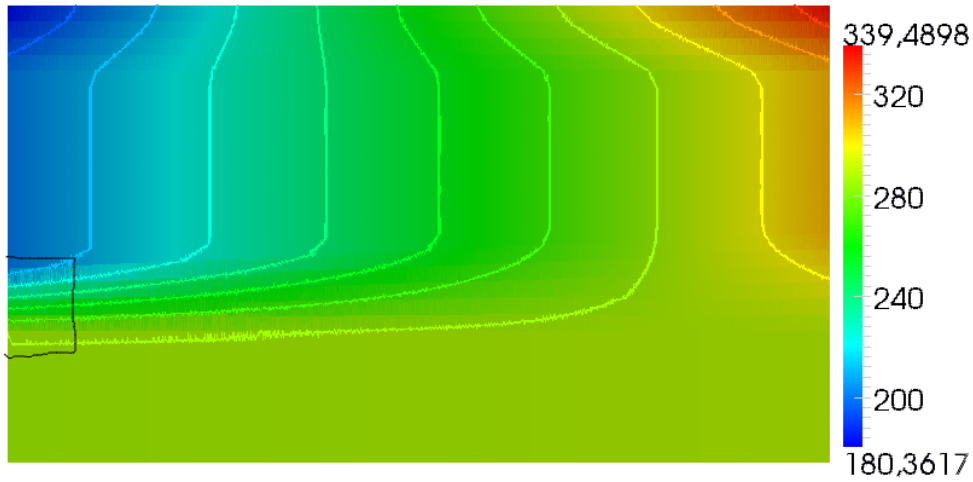


FIGURE 4.3 – Répartition charge hydrodynamique maillage 560x1000, avec ligne de champ

Avec un maillage plus raffiné : 84x3000, nous avons la figure 4.5. Celle-ci améliore les résultats obtenus avec le maillage 560x1000. Nous observons une convergence vers une solution. Analysons maintenant cette solution pour savoir si elle est cohérente avec les données du problème. Pour ce faire nous allons analyser les lignes de champs dans les différentes régions.

**Dans la région Marne** nous avons comme données au dessus une condition de Dirichlet  $H = 180 + \frac{160x}{25000}$  et des conditions de Neumann homogènes avec comme perméabilité  $K = 3.1536 \times 10^{-5}$  m/ans. La charge hydrodynamique évolue donc de 180 à 340 sur le bord se trouvant au dessus de la couche Marne. Les lignes de champs vérifient bien les conditions aux bords.

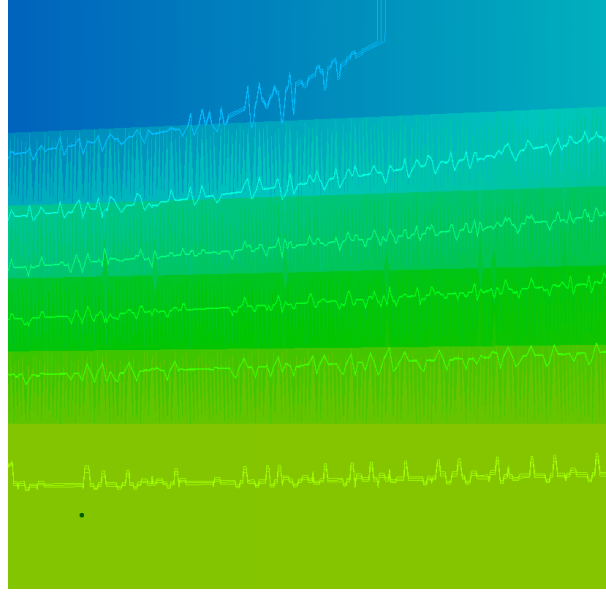


FIGURE 4.4 – Zoom zone encadrée

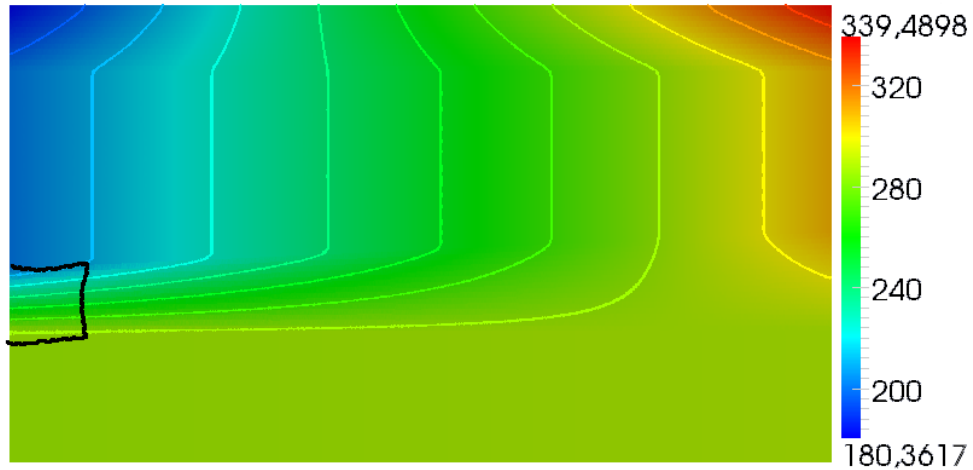


FIGURE 4.5 – Répartition charge hydrodynamique maillage 84x3000, avec ligne de champ

**Dans la région Calcaire** nous avons comme données des conditions de Dirichlet sur les bords gauche et droit  $H = 200$  et  $H = 310$ , avec comme perméabilité  $K = 6.3072$  m/ans.

**Dans la région Argile** nous avons des conditions de Neumann homogène sur les bords gauche et droit. Avec une perméabilité de  $3.1536 \times 10^{-6}$  m/ans

**Dans la région «Dogger»** les conditions limites sont  $H = 280$  à gauche et  $H = 286$  à droite et en-dessus une condition de Neumann homogène. Avec une perméabilité de  $25.2288$  m/ans

Nous remarquons que la figure 4.5 respecte toutes les conditions limites. Il est donc possible de conclure que la solution converge vers une solution.

Cependant on observe toujours des oscillations avec le maillage 84x3000.

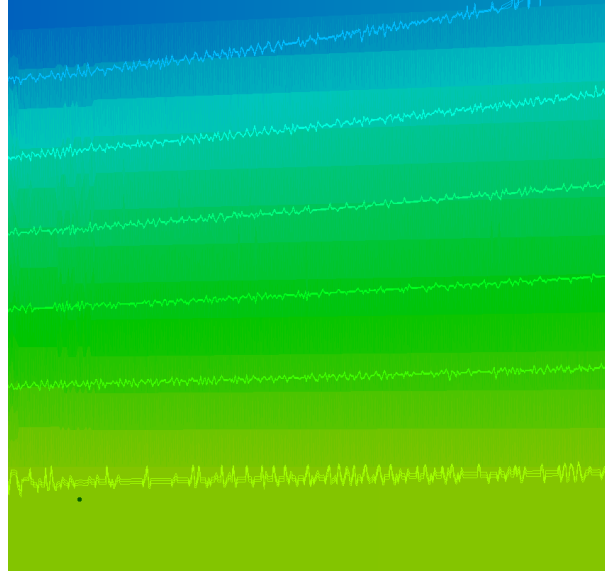


FIGURE 4.6 – Zoom zone encadrée

### 4.1.2 Vitesse

La vitesse obtenue pour le maillage 83x3000 est représentée par la figure 4.7. Cependant une analyse de cette figure s'avère complexe. Alors dans ce cas, il serait judicieux de visualiser l'évolution des champs de vitesse sur l'axe  $X$  et d'analyser le comportement des différents champs de vitesse.

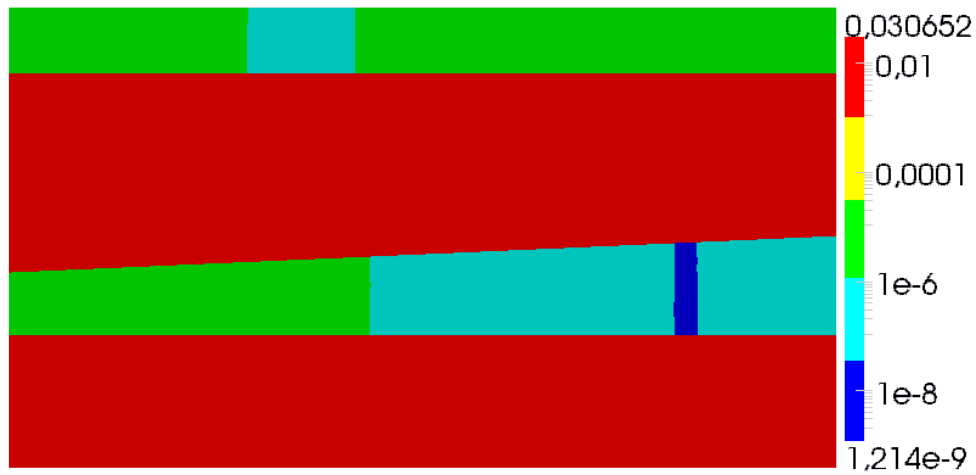


FIGURE 4.7 – Vitesse, maillage 84x3000

Tout d'abord nous avons le champ de vitesse  $V_x$ , sur l'axe  $X = 200$  figure 4.8. Celle-ci varie bien en fonction des différentes zones du domaine. Lors de l'analyse des résultats obtenus pour la charge hydrodynamique nous avons rappelé les différentes conditions limites

et les perméabilités et donc le flux le plus grand se situ dans la zone calcaire. Nous remarquons donc que la norme de la vitesse varie en fonction des perméabilités des différentes régions du domaine :

- «Dogger» :  $[0 ; 200]$ ,
- Argile :  $[200 ; 295]$ ,
- Calcaire :  $[295 ; 595]$
- Marne :  $[595 ; 695]$

Également nous observons une convergence vers une solution qui est régulière et donc pourrait être considérée comme satisfaisante.

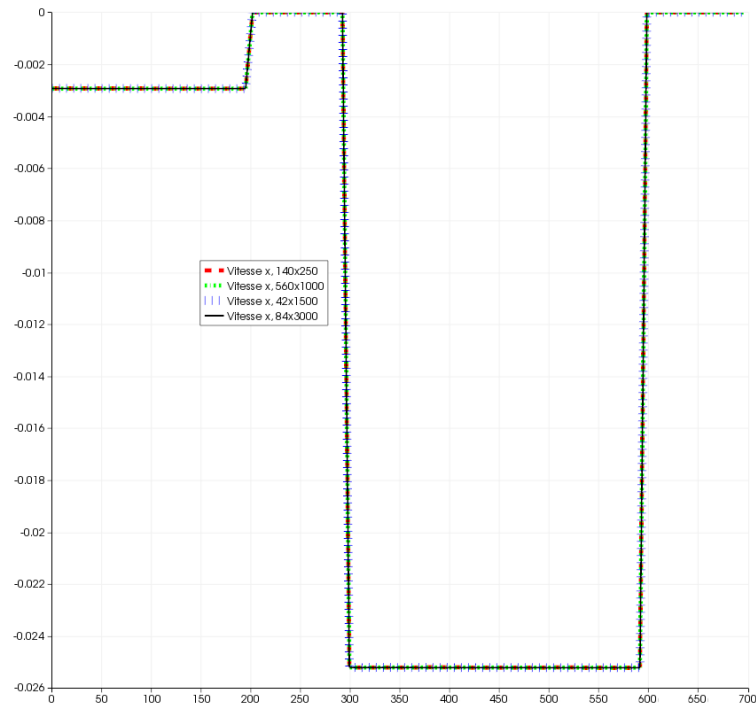


FIGURE 4.8 – Vitesse  $V_x$ , Profil  $X = 200$

La figure suivante représente le champ vitesse  $V_x$  toujours, mais cette fois ci sur l'axe  $X = 20000$ . L'observation ici est la même que précédemment : évolution de la vitesse en fonction des différentes régions et convergence vers une solution.

Le champs de vitesse  $V_y$  quant à lui est représenté par la figure 4.10 et figure 4.11.

La figure 4.10 représente le champ de vitesse sur l'axe  $X = 20$ . Comme dans le cas du champ de vitesse  $V_x$  la vitesse évolue en fonction des régions. De plus les courbes obtenues pour les différents maillages convergent vers une solution cependant celle-ci n'est pas assez régulière ce qui indique que la solution obtenue ne peut être considérée comme convenable.

Les remarques faites sont les mêmes pour le champ de vitesse  $V_y$  sur l'axe  $X = 20000$  présenté par la figure 4.11. Les courbes convergent vers une solution cependant celle-ci n'est pas régulière.

L'analyse des résultats obtenus dans cette section montre qu'ils sont cohérents avec les données du problème.

Cependant ceux ci ne sont pas satisfaisants, la charge hydrodynamique présente des oscillations, les courbes de vitesse du champ  $V_y$  ne sont pas régulières. Il est donc nécessaire

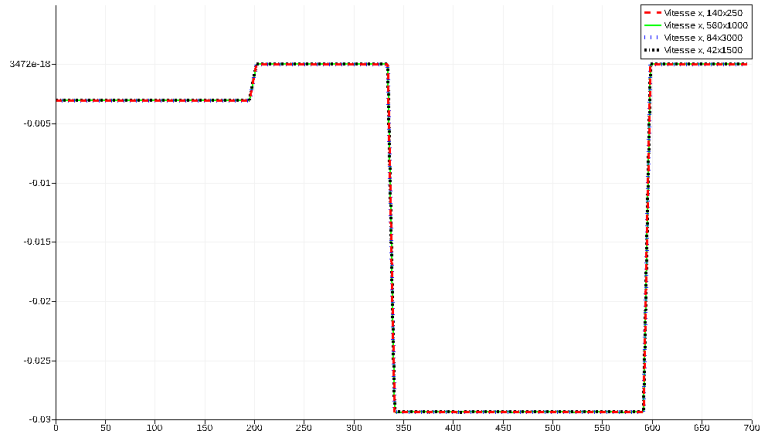


FIGURE 4.9 – Vitesse  $V_x$ , Profil  $X = 20000$

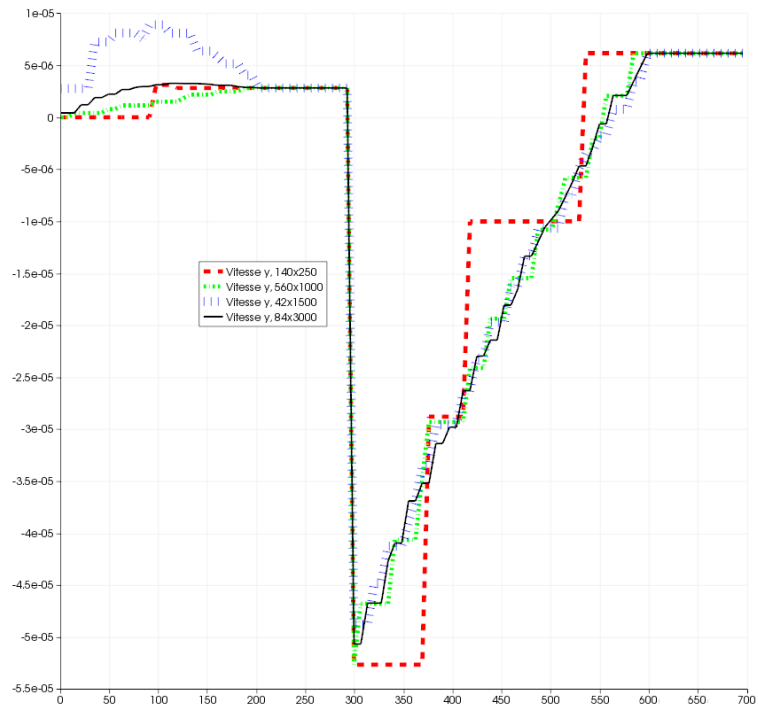


FIGURE 4.10 – Vitesse  $V_y$ , Profil  $X = 200$

d'étudier le problème d'une manière différente pour trouver des solutions convenables. L'idée serait de travailler sur le domaine redimensionné.

## 4.2 Amélioration des résultats

Les résultats obtenus dans la section 4.1, page 30 ne sont pas très satisfaisant. En effet nous constatons des oscillations sur les lignes de champ liées à la charge hydrodynamique et les courbes de vitesse du champ  $V_y$  ne sont pas régulières.

Pour tenter d'obtenir des solutions convenables l'utilisation du domaine redimensionné

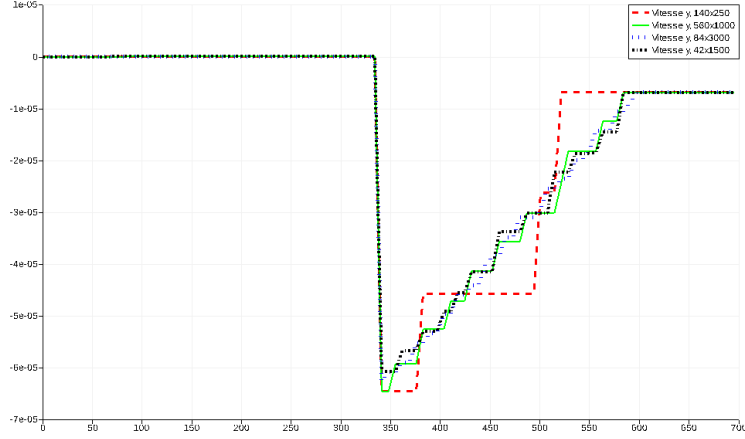


FIGURE 4.11 – Vitesse  $V_y$ , Profil  $X = 20000$

serait intéressante. Dans la section 3.1, page 19 nous avons défini ce que représentait le domaine redimensionné. Suite à cela un maillage isotrope et régulier fut présenté.

La démarche consistera donc à appliquer le maillage obtenu avec le domaine redimensionné au domaine réel afin d'avoir un maillage régulier lorsque nous visualisons le domaine réel. Il ne s'agit pas d'effectuer la même discrétisation, mais d'adapter le fichier de sortie *.msh*, du maillage redimensionné, pour qu'il concorde au domaine réel.

Ainsi on part de la géométrie réelle, on effectue une transformation géométrique ( $\tilde{Y} = 20 \times Y$ ) et on génère un maillage régulier sur cette géométrie. Ensuite on transforme à nouveau les coordonnées  $Y$  ( $Y = \frac{\tilde{Y}}{20}$ ) pour un retour sur la géométrie réelle avec un maillage anisotrope. Nous appellerons cette méthode : Application du maillage redimensionné. La figure 4.12 représente le maillage obtenue.

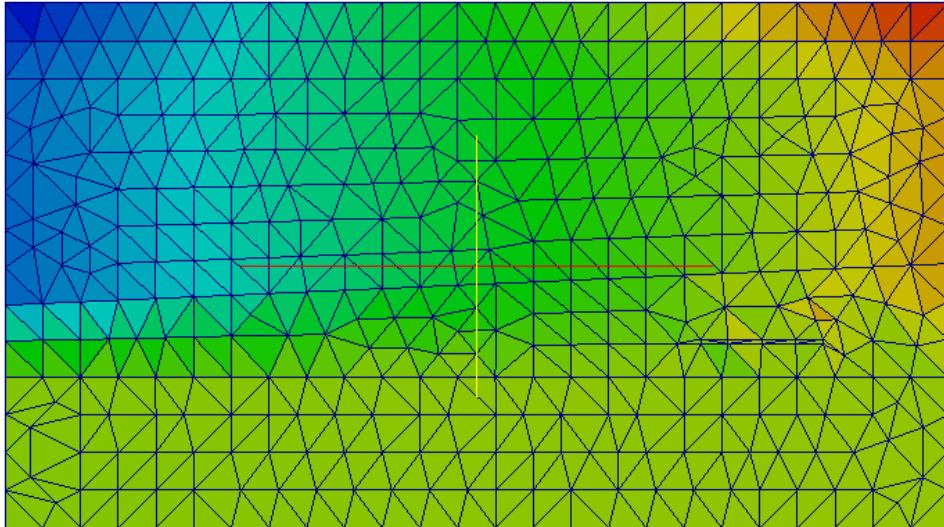


FIGURE 4.12 – Maillage régulier isotrope

Le but principal de cette section est de comparer les résultats obtenus sur le domaine réel avec la méthode cite plus haut et les résultats obtenus sur le domaine redimensionné.

### 4.2.1 La charge hydrodynamique

Les résultats précédents obtenus pour la charge hydrodynamique n'étaient pas satisfaisant car ils présentaient des oscillations, la solution n'était pas régulière. Afin d'obtenir des résultats convenables nous appliquons le maillage redimensionné. La figure 4.13 représente la solution obtenu pour ce cas et la figure 4.14 représente la solution obtenue pour le domaine redimensionné.

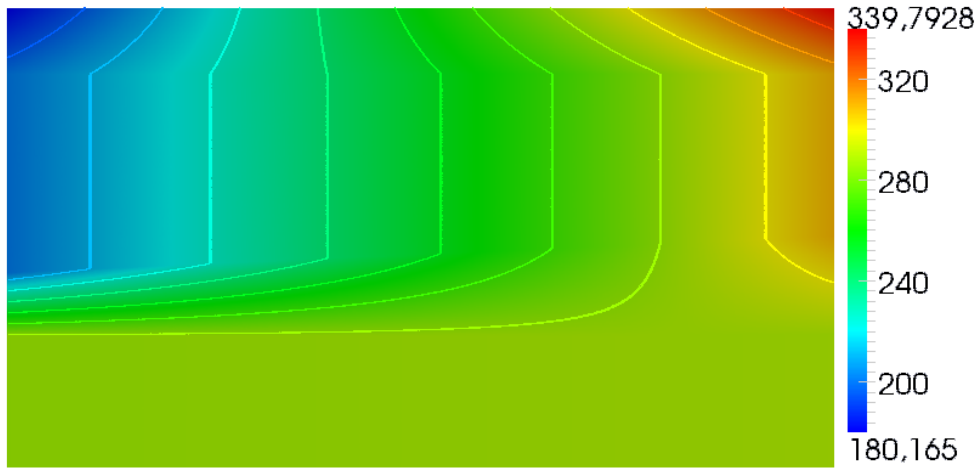


FIGURE 4.13 – Répartition charge hydrodynamique domaine réel, 560x1000

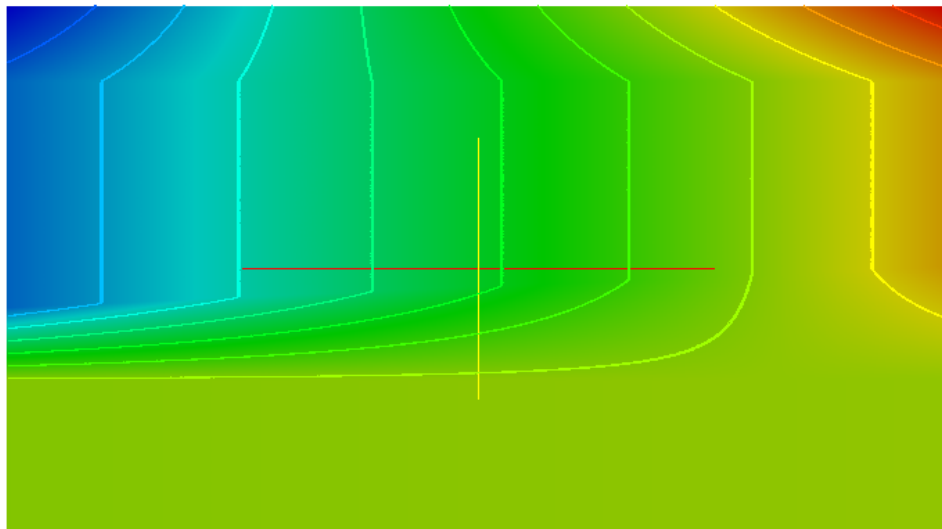


FIGURE 4.14 – Répartition charge hydrodynamique domaine redimensionné, 560x1000

Les deux figures ont été obtenues avec le même maillage 560x1000. Les lignes de champ ne présente aucunes oscillations, elles sont régulières. Dans les deux cas les lignes de champs suivent la même trajectoire et ne sont pas différentes. Nous avons donc les mêmes résultats.

## 4.2.2 Vitesse

L'analyse des vitesses obtenues se fera comme dans les sections précédentes avec la visualisation des champs de vitesse sur l'axe  $X = 20$  et  $X = 20000$ .

Les figures 4.15 et 4.16 présentent le champ de vitesse  $V_x$  sur l'axe  $X = 20$  et  $X = 20000$ . Les courbes du domaine redimensionné (en rouge) évolue entre  $[0 ; 13900]$ . En effet le coefficient d'échelle pour le domaine redimensionné est  $L_y = 20$ . Ce qui explique cette différence d'échelle entre les deux courbes. Cependant nous observons une symétrie de facteur  $L_y = 20$ . C'est à dire que si les abscisses des courbes redimensionnées étaient tous divisés par  $L_y = 20$  alors les deux courbes seraient identiques. On a donc des résultats conformes.

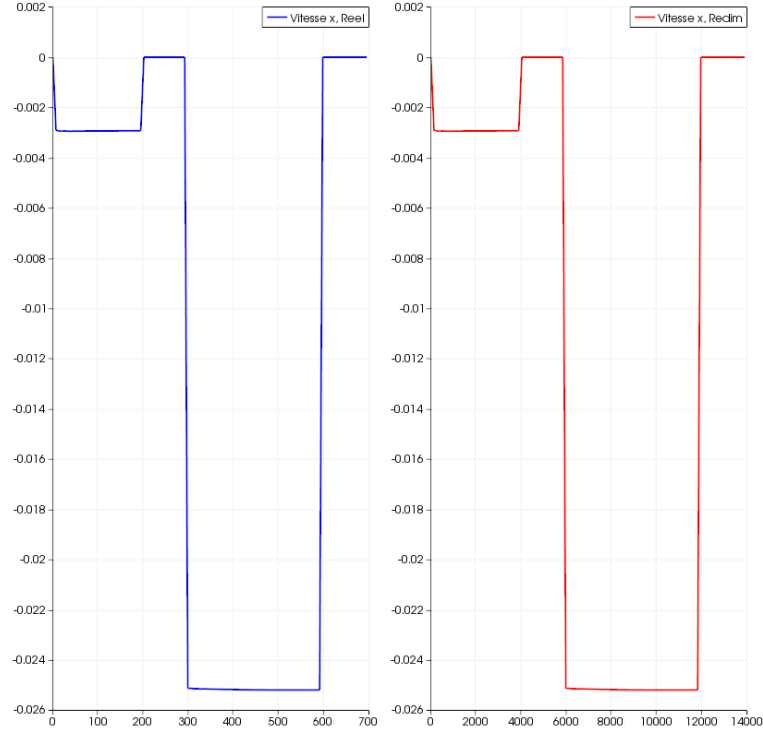


FIGURE 4.15 – Vitesse  $V_x$ , Profil  $X = 20$

Les figures 4.17 et 4.18 présentent le champ de vitesse  $V_y$  sur l'axe  $X = 20$  et  $X = 20000$ . Nous faisons la même observation que précédemment à savoir les abscisses des courbes redimensionnées appartiennent à l'intervalle  $[0 ; 13900]$ . Par contre ici nous n'avons pas les mêmes valeurs pour le champ de vitesse,  $V_y \in [-1, 3 \times 10^{-3}; 6 \times 10^{-4}]$  pour le domaine redimensionné  $V_y \in [-6, 5 \times 10^{-5}; 3 \times 10^{-5}]$ . Cela est dû à notre coefficient d'échelle. Dans la section 3.2, page 20 nous avons le résultat suivant :  $U_y = \frac{1}{L_y} \tilde{U}_y$ , avec  $\tilde{U}_y$  le champs de vitesse dans le domaine redimensionné,  $U_y$  le champ de vitesse dans le domaine réel et  $L_y$  le coefficient d'échelle. Cela explique la variation du champ de vitesse dans le domaine redimensionné et indique que nous avons des résultats satisfaisants.

Les résultats ont été obtenus en utilisant le maillage du domaine redimensionnée sur le domaine réel. Nous pouvons conclure qu'ils sont satisfaisant car aucune oscillation n'était visible sur les lignes de champs de la charge hydrodynamique et les courbes de vitesse étaient régulières.



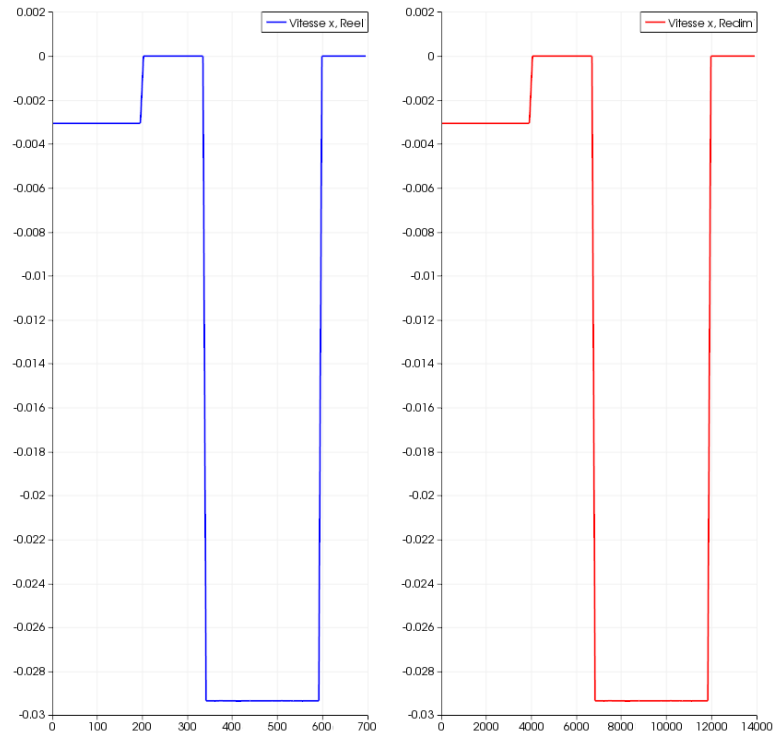


FIGURE 4.16 – Vitesse  $y$ , Profil  $X = 20000$

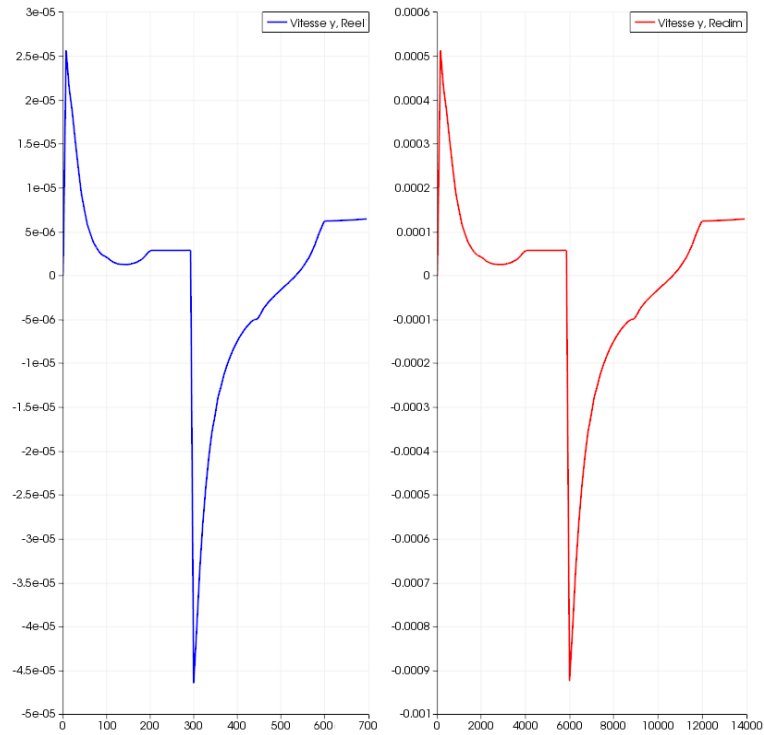


FIGURE 4.17 – Vitesse  $V_x$ , Profil  $X = 20$

Nous utilisons le maillage du domaine redimensionné sur le domaine réel, de plus dans la section 3.2, page 20 nous avons démontré que la résolution du problème redimensionné est le

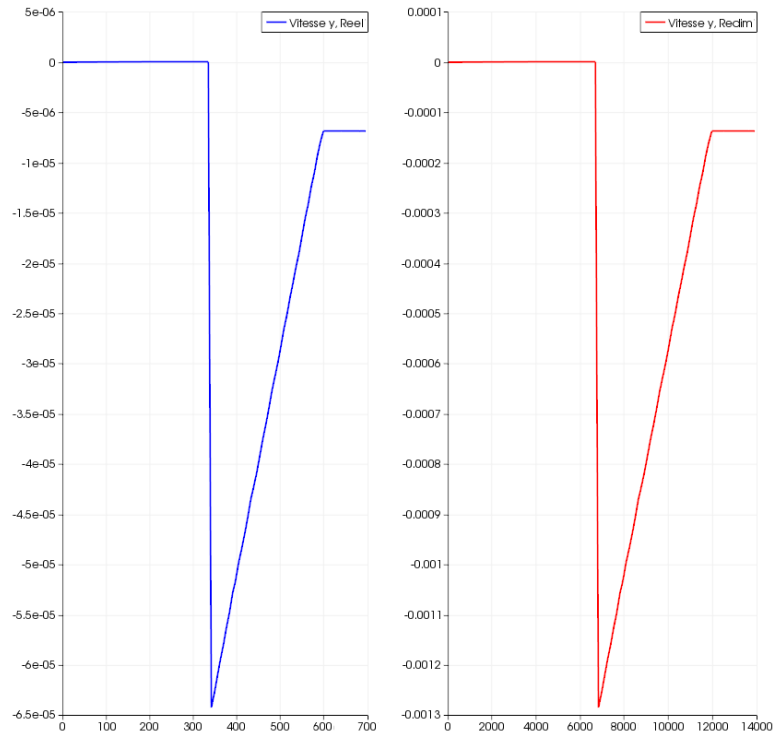


FIGURE 4.18 – Vitesse  $y$ , Profil  $X = 20000$

même que celle du domaine réel avec l'apparition des constantes d'échelle. Tout cela implique que nous pouvons travailler directement sur le domaine redimensionné.

Nous allons étudier maintenant le comportement de la solution du problème sur la géométrie redimensionnée.

### 4.3 Domaine redimenssionné

Cette section présentera le comportement de nos résultats sur le domaine réel, afin de savoir si l'on converge. L'étude à été effectuée avec les maillages définis dans le tableau 4.2.

Discrétisation	Nb triangles	nb inconnus
14x25	721	1185
56x100	12522	18960
70x125	18402	27783
140x250	73258	110376
280x500	299366	450285
560x1000	1206510	1811589

TABLE 4.2 – Les différents maillages

Nous allons maintenant analyser les résultats obtenus pour les différents inconnus du problème en commençant par la charge hydrodynamique.

### 4.3.1 La charge hydrodynamique

L'étude du comportement de la charge hydrodynamique se fera avec les maillages 70x125 et 280x500 pour effectuer une comparaison avec les résultats obtenus pour le domaine réel.

La figure 4.19 représente la charge hydrodynamique pour la maillage 70x125. Ce maillage est obtenu avec 18402 triangles il présente moins d'oscillations que la figure 4.3, page 32 avec maillage sur la géométrie réel qui contient 64978 triangles.

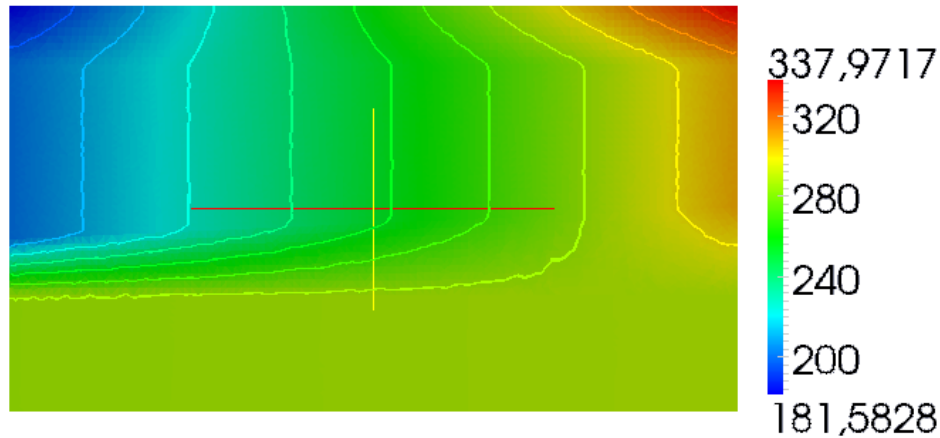


FIGURE 4.19 – Répartition charge hydrodynamique maillage 70x125, avec ligne de champ

On effectue la même remarque aussi avec la figure 4.20 pour le maillage 280x500, qui contient 299366 et la figure 4.5, page 33.

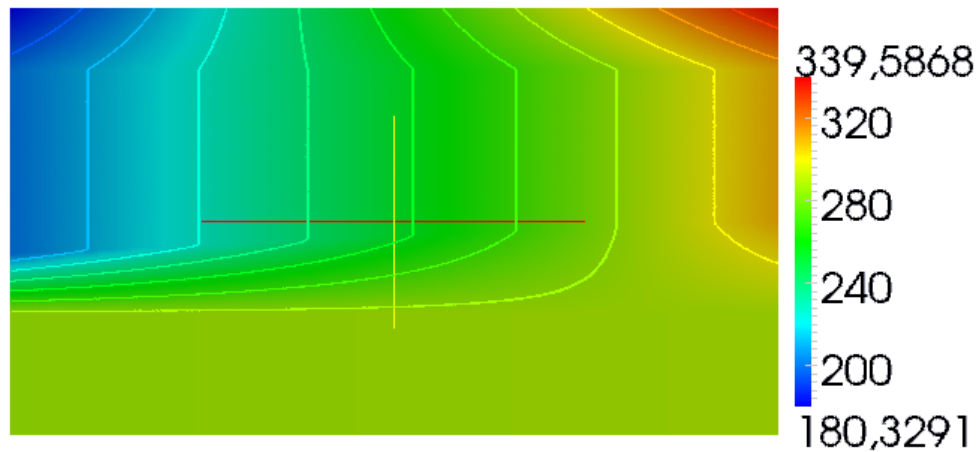


FIGURE 4.20 – Répartition charge hydrodynamique maillage 280x500, avec ligne de champ

Cela montre que travailler sur la géométrie redimensionnée offre des résultats satisfaisants avec moins de triangle.

### 4.3.2 Vitesse

Nous allons présenter la vitesse obtenue pour les charges hydrodynamique présentées auparavant.

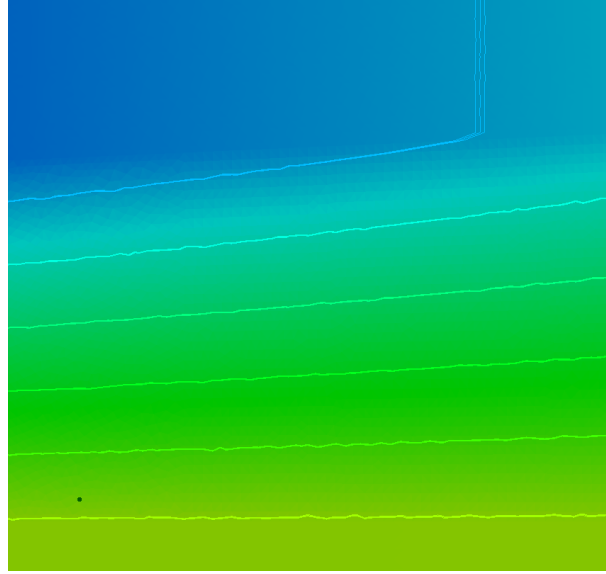


FIGURE 4.21 – Zoom zone encadrée

L'analyse des vitesses obtenues se fera comme dans les sections précédentes avec la visualisation des champs de vitesse sur l'axe  $X = 200$  et  $X = 20000$ .

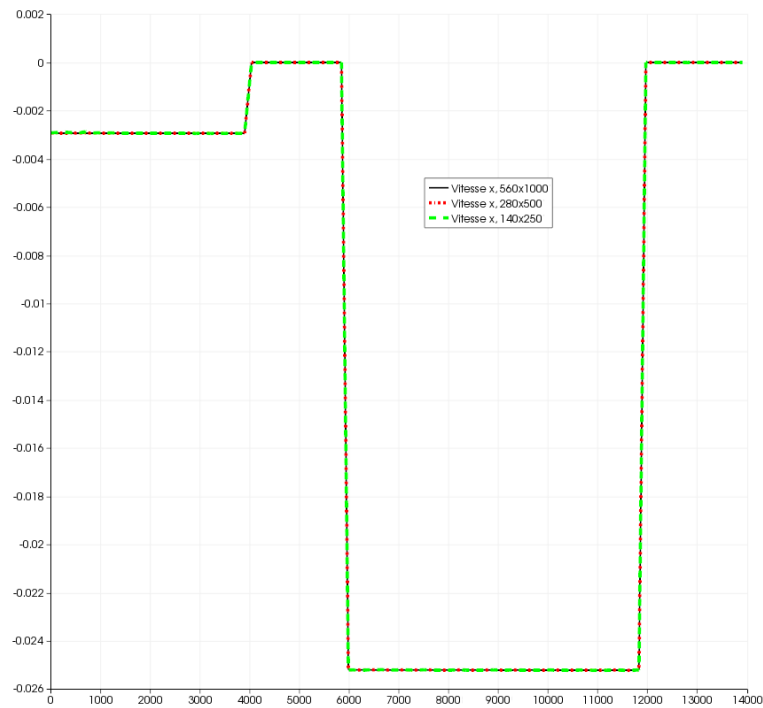


FIGURE 4.22 – Vitesse  $V_x$ , Profil  $X = 200$

Les figures 4.22 et 4.23 représentent les champs de vitesse  $V_x$  sur l'axe  $X = 200$  et l'axe  $X = 20000$ . Les résultats ont été obtenus avec les maillages  $140 \times 250$ ,  $280 \times 500$  et  $560 \times 1000$ . Le comportement des courbes indique que nous avons une convergence vers la solution. Cependant, le champ de vitesse ne présentait aucun problème de convergence dans la géométrie réelle.

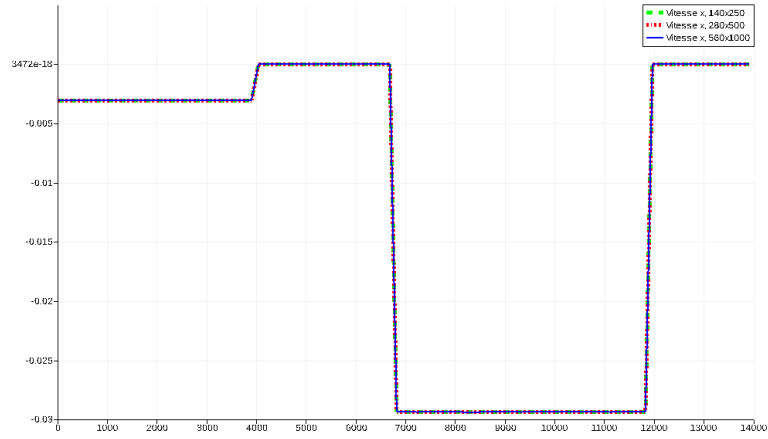


FIGURE 4.23 – Vitesse  $V_x$ , Profil  $X = 20000$

Les figures 4.22 et 4.23 représentent les champs de vitesse  $V_y$  sur l'axe  $X = 200$  et l'axe  $X = 20000$ . Les résultats ont été obtenus avec les maillages que ceux du champ de vitesse  $V_y$

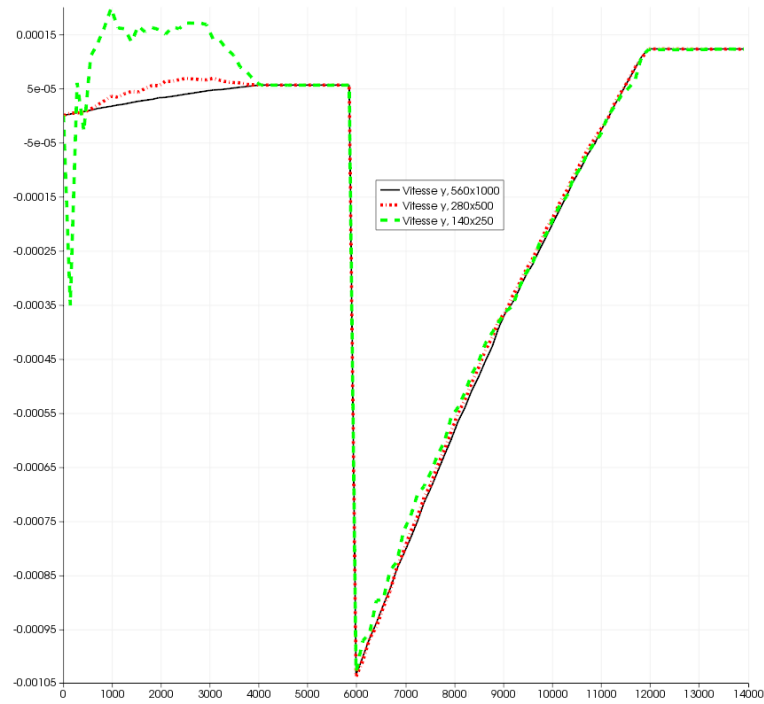


FIGURE 4.24 – Vitesse  $V_y$ , Profil  $Y = 200$

Les courbes de la figure 4.22 convergent moins rapidement, en effet la courbe en bleu est celle approchant le plus la solution (Maillage le plus raffiné). Cela s'explique par le fait que l'axe  $X$  est proche du bord. Ainsi pour avoir une convergence plus rapide il aurait fallu par exemple raffiner le maillage deux fois plus.

Les courbes de la figure 4.25 quand à elle convergent plus rapidement vers une solution régulière que celle de la figure 4.11, 37. En effet le maillage 140x250 qui contient que 73258 présente une solution plus régulière que le maillage 84x3000 sur la géométrie réelle qui contient

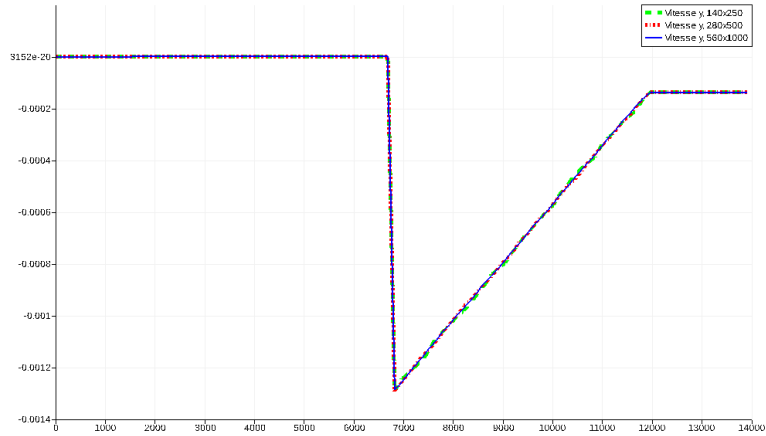


FIGURE 4.25 – Vitesse  $V_y$ , Profil  $Y = 20000$

511218 triangles.

**Pour conclure** , nous pouvons donc affirmer que travailler sur le domaine redimensionné nous offre les même résultats que le domaine réel. De plus, la convergence est plus rapide car il est facile de trouver un maillage adapté pour le domaine redimensionné.

En somme travailler directement sur le domaine redimensionné s'avère être une application correcte et avantageuse.

# CONCLUSION

La simulation des sites de stockage est très complexe du fait de la disparité des échelles. Pour tenter de contourner cette difficulté nous avons utilisé une méthode qui consistait à redimensionner la géométrie.

Cela nous a permis d'obtenir des résultats convenable pour l'écoulement et une vitesse de bonne qualité (sur un maillage fin). Cependant tous nos résultats on été obtenu en compilant en séquentielle. En effet la compilation en parallèle posa des soucis technique notamment avec le découpage en sous domaine qu'il faudrait pouvoir contrôler manuellement.

Au terme de cette analyse nous pouvons affirmer que le travail du transport des radionucléides pourrait se faire à partir du domaine redimensionné, avec un maillage très raffiné car il est nécessaire d'utiliser une vitesse de bonne qualité.

## Bilan personnel

Lors de mon stage j'ai été très bien assisté par mes tuteurs. Le déroulement du stage s'est fait comme suit : l'étude de la théorie, lecture de documentation, d'article puis l'implémentation dans un langage que je connaissais. Mon seul regret est de n'avoir pu implémenter durant le stage le transport des radionucléides.

La formation MACS m'a dispensé la plupart des outils mathématiques requis que ce soit en éléments finis, ou au niveau du langage de programmation. Les nombreux projets durant mon cursus m'ont permis d'avoir des facilités lors de l'implémentation.

# Appendices



# Annexe A

## La Maison de la Simulation

Avec le déploiement d'une infrastructure matérielle pour le calcul intensif, aussi bien au niveau national avec la mise en place de GENCI qu'au niveau Européen dans le cadre du projet PRACE, les chercheurs ont maintenant accès à un parc de supercalculateurs de classe mondiale. De tels supercalculateurs devraient rendre possible des avancées majeures dans les différents domaines scientifiques mais aussi contribuer à des avancées importantes ayant des conséquences en terme de compétitivité industrielle. Atteindre ces objectifs impose de disposer d'applications conçues et optimisées pour un très fort degré de parallélisme. De plus, la compréhension des masses de données produites par les grandes simulations nécessite des outils de post-traitement et de visualisation adaptés. La complexité des architectures de systèmes de la classe Petaflop/s et celles des simulations visées représentent un véritable défi. S'y attaquer impose de constituer des équipes pluridisciplinaires comprenant des informaticiens du HPC (High Performance Computing), des spécialistes du traitement numérique, des mathématiciens appliqués et des experts des domaines applicatifs visés.

Ce constat a conduit le CEA et le CNRS à créer la Maison de la Simulation dont l'objectif est de favoriser l'utilisation efficace par la communauté scientifique de ces grands équipements ainsi que la recherche dans le domaine du HPC.

La Maison de la Simulation est un laboratoire regroupant cinq partenaires (CEA, CNRS, INRIA, université d'Orsay et université de Versailles - St Quentin) qui a pour objectif d'accompagner, de soutenir et de stimuler les communautés scientifiques afin de tirer le meilleur parti des supercalculateurs, en particulier déployés dans le cadre de GENCI et du projet Européen PRACE. Elle favorise notamment l'émergence en France d'une communauté du calcul intensif et développe les synergies fortes entre chercheurs et ingénieurs de différentes disciplines nécessaires pour concrétiser les avancées scientifiques importantes attendues du calcul haute performance. Ses initiatives sont tournées à la fois vers les communautés déjà utilisatrices des grands moyens de calcul mais également vers la recherche de nouveau champ d'applications du calcul haute performance.

Pour mener à bien ses missions, la Maison de la Simulation se développe selon trois axes :

- **Un centre de recherche pluridisciplinaire autour de la simulation numérique :**  
A ce titre, la Maison de la Simulation héberge des équipes de recherche pluridisciplinaires autour de projets à plus ou moins long terme liés au calcul intensif, depuis les mathé-

matiques, les méthodes numériques, l'algorithmique, l'informatique et le génie logiciel jusqu'à la physique des phénomènes étudiés. Il s'agit, en particulier, de promouvoir les applications où le calcul est à l'origine, ou permet d'espérer, des avancées majeures, tels que, par exemple, climatologie, études dynamiques multi-échelles et multi-physiques des matériaux, mécanique des fluides, combustion, astrophysique, fusion nucléaire, sciences de la vie,... Ces équipes mènent des recherches propres et favorisent l'émergence et l'utilisation d'outils numériques communautaires.

- **Une unité de service et d'expertise ouverte sur les communautés** : la Maison de la Simulation dispose d'une équipe d'ingénieurs spécialistes du calcul haute performance à même de fournir une expertise et une aide aux développements applicatifs de haut niveau aux projets sélectionnés et accueillis dans ses murs. Cette expertise concerne à la fois l'algorithmique parallèle, le développement et l'optimisation des codes ainsi que la visualisation et le post-traitement des données. Le soutien à la communauté du calcul intensif se fait également à travers l'attribution de bourses doctorales (éventuellement en co-tutelle) et post-doctorales spécifiques. L'ensemble de ces activités fait l'objet d'appels d'offre réguliers à destination des communautés scientifiques.
- **Un pôle d'enseignement et d'animation scientifique en calcul intensif** : la formation est indispensable afin de former des chercheurs et des ingénieurs capables d'utiliser efficacement les grands calculateurs dans l'ensemble des domaines de recherche. La Maison de la Simulation a vocation à être un acteur central et fédérateur de la formation en calcul intensif sur le plateau de Saclay et à partir de ses émanations régionales, aussi bien pour la formation initiale, en partenariat avec les Universités, que pour la formation permanente. De plus, la Maison de la Simulation organise régulièrement des colloques et ateliers scientifiques. Cette action d'animation scientifique se fera en collaboration étroite avec le GDR "Calcul" du CNRS qui dispose d'un réseau de compétences bien implanté. Par ailleurs, la Maison de la Simulation apportera un soutien aux activités d'animation scientifique du noeud Ile-de-France du CECAM qui sera en partie hébergé dans ses murs.

Source : Site web <sup>1</sup>

---

1. [http ://www.maisondelasimulation.fr/](http://www.maisondelasimulation.fr/)

# Annexe B

## GMSH

L'objectif ici est de présenter les commandes élémentaires qui ont permis de générer le maillage pour le problème *COUPLEX*.

GMSH à une interface ce qui permet de créer un maillage, soit grâce à celle ci, soit par un code dans un fichier *.geo*.

Dans le menu de GMSH nous avons le module *geometry*, il est dédié à la construction géométrique.

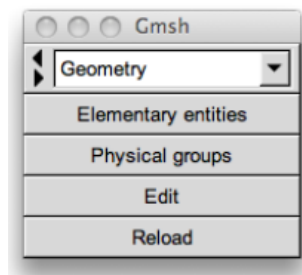


FIGURE B.1 – Menu du module *geometry*

Pour définir un nouveau point on va cliquer sur *Elementary entities*, *Add*, *New* et *Point* figure B.2.

A partir de ces points on peut tracer des segments en reliant deux points, des arcs de cercles à partir de 3 points, ....

Une fois la surface géométrique définie on va générer le maillage avec le module *mesh* figure ??

Le maillage obtenue pour le domaine d'étude est représenté figure B.3.

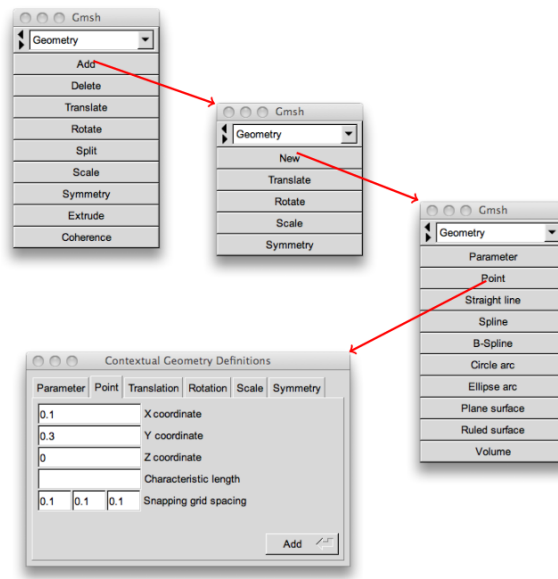


FIGURE B.2 – Aspect du menu

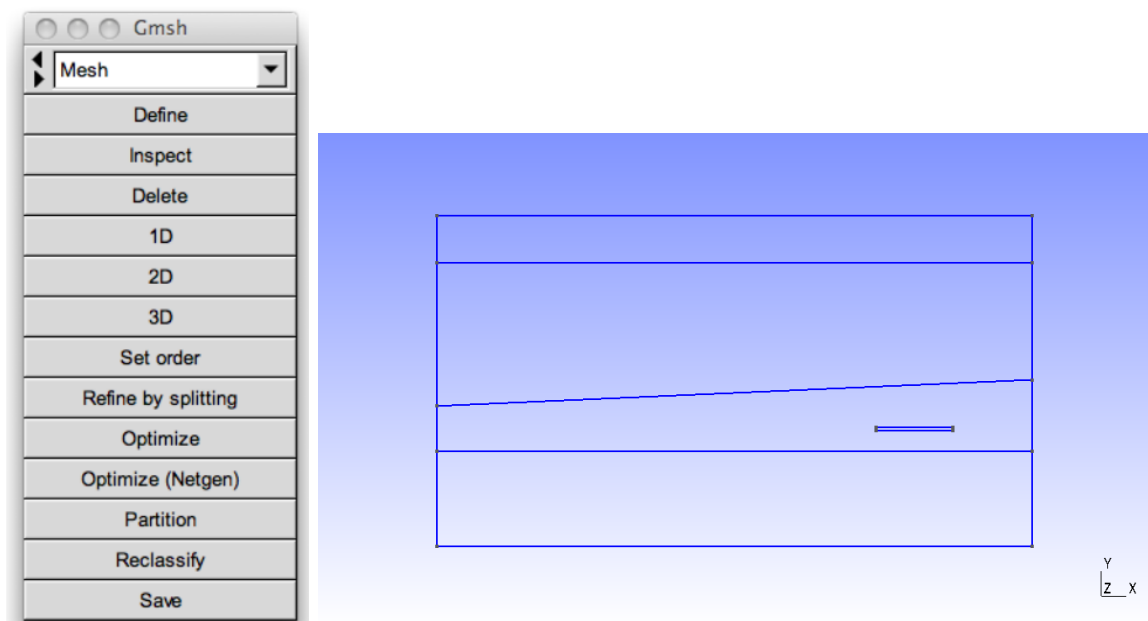


FIGURE B.3 – Domaine  $\Omega$

# Annexe C

## Code FreeFem++

Le code qui a permis de construire de maillage est le suivant :

```
real L=25000.; // Longueur du domaine en Km
real C=1.; // Coeficient de Legende
int n = 14, Nn = 25, Nr = 3;

// LABEL DESCRIPTION

/*
1 "Neuman"
2 "Top"
3 "LimestoneLeft"
4 "LimestoneRight"
5 "DoggerLeft"
6 "DoggerRight"
*/

// Domaine MARL

border MarlTop(t=L,0) {x = t; y = 695*C; label =2;};
border MarlRight (t=595*C,695*C){x = L; y = t; label =1;};
border MarlLeft(t=695*C,595*C){x = 0; y = t; label =1;};

// Domaine Limestone

border LimestoneRight (t=350*C,595*C){x = L; y = t; label =4;};
border LimestoneLeft(t=595*C,295*C){x = 0; y = t; label = 3;};

// Domaine Clay

border ClayRight (t=200*C,350*C){x = L; y = t; label =1;};
border ClayLeft(t=295*C,200*C){x = 0; y = t; label =1;};
```

```

// Domaine Repository

border RepositoryTop(t=21680,18440){x = t; y = 250*C; label =7;};
border RepositoryFoot(t=18440,21680){x = t; y = 244*C; label =7;};
border RepositoryRight (t=244*C,250*C){x = 21680; y = t; label =7;};
border RepositoryLeft(t=250*C,244*C){x = 18440; y = t; label =7;};

// Domaine DOGGER

border DoggerFoot(t=0,L) {x = t; y = 0; label =1;};
border DoggerRight (t=0*C,200*C){x = L; y = t; label =6;};
border DoggerLeft(t=200*C,0*C){x = 0; y = t; label =5;};

// Interface

border Inter1(t=0,L) {x = t; y = 200*C; label =7;};
border Inter2(t=0,L){x = t; y = (0.0022*t + 295)*C; label =7;};
border Inter3(t=0,L){x = t; y = 595*C; label =7;};

// Maillage Domaine

mesh AllDomain = buildmesh(DoggerLeft((n*2)/7) + DoggerRight((n*2)/7)
+ DoggerFoot(Nn) + ClayLeft(n/7) + ClayRight((n*3)/14)
+ RepositoryLeft(2) + RepositoryRight(2) + RepositoryTop(Nr)
+ RepositoryFoot(Nr) + LimestoneLeft((n*3)/7)
+ MarlLeft(n/7) + MarlRight(n/7) + MarlTop(Nn)
+ LimestoneRight((n*5)/14) + Inter1(Nn) + Inter2(Nn) + Inter3(Nn));

```

# Annexe D

## Code bash modificateur fichier *.msh*

```
#!/bin/sh
#Script to delete internal boundaries from a mesh created by FreeFem++
#This is need to have a mesh that fit the permeabilities boudaries when using the LifeV
#Author: Frédéric Dauvergne - 23 July 2013
#Todo: could use direct input file

#input : mesh_in.temp
#output: mesh_out.temp

file=$1
#Tag Caractere to replace by 0:
TagCaract=9999999

echo '-----'
echo 'Delete internal boundaries of the mesh file : '$file
echo '-----'
echo Create input file: "mesh_in.temp"
echo Create output file: "mesh_out.temp"

> mesh_in.temp
cp $file mesh_in.temp

head -n 1 mesh_in.temp > mesh_in0.temp

nbs='cat mesh_in0.temp'

echo 'number of dots, triangles and segments: ' $nbs

k=0
Begin=2
End=1
for i in ${nbs};do
```

```

k=$(( $k + 1 ))
End=$(( $i + $End ))
# echo '-----'
echo 'part '$k' is between '$Begin' and '$End' '
# echo '-----'
sed -n $Begin','$End'p' mesh_in.temp > mesh_in$k.temp
Begin=$(( $i + $Begin ))

done

k=1
> mesh_out$k.temp
cp mesh_in$k.temp mesh_out$k.temp

x=0
k=2

cat mesh_in$k.temp | awk '{print $1,$2,$3,'$x'}' > mesh_out$k.temp

k=3
y=$TagCaract

#sed '/'$y'/d' mesh_in$k.temp > mesh_out$k.temp
sed '/'$y'/[ '$y' ]*$y'/d' mesh_in$k.temp > mesh_out$k.temp

diff mesh_in$k.temp mesh_out$k.temp > mesh_diff$k.temp
wc mesh_diff$k.temp | awk '{print $1}' > mesh_nb$k.temp

nb='cat mesh_nb$k.temp'
nb=$(( $nb - 1 ))

k=0
x='echo ${nbs} | awk '{print $3}''
x=$(( $x - $nb ))
#echo $x

cat mesh_in$k.temp | awk '{print $1,$2,'$x'}' > mesh_out$k.temp

cat mesh_out*.temp > mesh_out.temp

> $file'_out'
cp mesh_out.temp $file'_out'
rm *.temp

```



```
#rm mesh_in.temp  
#rm mesh_out.temp  
  
echo 'Conversion done.'  
echo 'output file is : '$file'_out'
```

# Bibliographie

- [1] Ph. Ackerer, R. Mosé, and H. Hoteit. Nuclear waste disposal simulation : Couplex test cases. *Computational Geosciences*, 8 :99–124, 2004.
- [2] G. Allaire. *Analyse numérique et optimisation*. 1 edition, 2005.
- [3] A. Bourgeat, M. Kern, S. Schumacher, and J. Talandier. The couplex test case : Nuclear waste disposal simulation. *Computational Geosciences*, 8 :83–98, 2004.
- [4] F. Brezzi and M. Fortin. Mixed and hybrid finite element methods. *Springer serie in computational mathematics*, 15, 1991.
- [5] H. Darcy. *Les fontaines publiques de la ville de Dijon*. Victor dalmont edition, 1856.
- [6] G. Grandperrin, P. Grosetto, S. Deparis, G. Fourestey, C. Malossi, S. Quinodoz, and R. Ruizand P. Tricerri. Lifev - state of the art. 2011.
- [7] F. Hecht. Freefem++. *Université Pierre et Marie Curie*, Juin 2013.
- [8] G. Huan Z. Chen and Y. Ma. *Computational Methods for Multiphase flows in porous media*. Siam edition, 2006.