Validation numérique de l'homogénéisation pour un modèle simplifié de stockage avec sources aléatoires

Introduction

Modélisation de la migration de radionucléideVers un modèle probabiliste

Calcul des moments

- Comportement aléatoire des sources : un exemple
- Définition et calcul des premiers moments
- Simulations numériques

Homogénéisation du modèle aléatoire

- Présentation générale
- Résultats théoriques
- Validation numérique

- Introduction
 - Modélisation de la migration de radionucléide
 - Vers un modèle probabiliste
- Calcul des moments
 - Comportement aléatoire des sources : un exemple
 - Définition et calcul des premiers moments
 - Simulations numériques
- Homogénéisation du modèle aléatoire
 - Présentation générale
 - Résultats théoriques
 - Validation numérique

Introduction – modélisation

- Objectif : Valider (illustrer) les résultats de l'homogénéisation
 - Géométrie et équation simplifiées
 - ⇒Approche valable (sauf mention contraire) dans des cas plus complexes et plus réalistes
 - Modélisation simplifiée de la migration de radionucléide en milieu poreux (1 phase saturée):

$$\omega_p R \frac{\partial C}{\partial t} - div \left(\overline{D}.\overline{grad} \left(C \right) - \overline{V}C \right) + \omega_p R \lambda C = Q$$

$$\Rightarrow \omega_p R \frac{\partial C}{\partial t} + L(C) = Q$$

Introduction – modélisation

Une géométrie 2D simplifiée :



Caractéristiques de l'1129 :

- Période radioactive de l'I¹²⁹ : 15.10⁶ ans



Introduction - modélisation

- Un exemple de simulation :
 - rupture simultanée de tous les containeurs
 - calculs effectués avec Castem (EFMH)



Introduction – aspect aléatoire

- Plusieurs sources d'incertitudes :
 - Caractéristiques physiques du milieu
 - Description exhaustive impossible
 - Comportement de relâchement
 - Contenu des colis variable
 - Phénomène d'usure/rupture bien modélisé par un contexte aléatoire
- Prise en compte de l'aléa sur la fuite dans la modélisation

Introduction – aspect aléatoire

• Modèle probabiliste :

Aléa sur le terme source : $Q(\omega)$

 \Rightarrow la solution du problème devient aléatoire : $C(\omega)$

$$\omega_{p}R\frac{\partial C(\omega)}{\partial t} - L(C(\omega)) = Q(\omega) \quad (P)$$

 On peut caractériser la solution à travers ses moments

Introduction

Modélisation de la migration de radionucléideVers un modèle probabiliste

- Calcul des moments
 - Comportement aléatoire des sources : un exemple
 - Définition et calcul des premiers moments
 - Simulations numériques
- Homogénéisation du modèle aléatoire
 - Présentation générale
 - Résultats théoriques
 - Validation numérique

Calcul des moments - un exemple

- Un cas particulier d'aléa sur les sources Une courbe de relâchement typique, avec :
 - Aléa sur le temps de déclenchement
 - Aléa sur la quantité de matière relâchée
 - Indépendance entre tous les aléas
- ⇒ Terme source associé à l'alvéole i :

$$Q_{i}(\omega,t) = \alpha_{i}(\omega)\tilde{f}(t-\tau_{i}(\omega))$$



Calcul des moments - un exemple

• Conséquence de la linéarité :

la solution $C(\omega, x, t)$ de (P) devient une superposition des $c_i(x, t)$ solutions de

$$\omega_p R \frac{\partial c_i}{\partial t} + L(c_i) = \tilde{\mathbf{f}} \cdot \mathbb{1}_{B_i} \quad (P_i)$$

$$\implies C(\omega, x, t) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i(\omega) c_i(t - \tau_i(\omega), x)$$

La linéarité et l'indépendance donnent l'espérance et la variance sous la forme:

*
$$E[C(\cdot, x, t)] = \sum_{i=1}^{N} E[\alpha_{i}]E[c_{i}(t - \tau_{i}, x)]$$

*
$$Var[C(\cdot, x, t)] = \sum_{i=1}^{N} E[\alpha_{i}^{2}]E[c_{i}(t - \tau_{i}, x)^{2}] - E[\alpha_{i}]^{2} E[c_{i}(t - \tau_{i}, x)]^{2}$$

et si on connaît f_{τ} la densité de probabilité des décalages τ_i , par définition: $E[c_i(t-\tau_i,x)] = \int c_i(s,x) f_{\tau}(t-s) ds$ $E[c_i(t-\tau_i,x)^2] = \int c_i(s,x)^2 f_{\tau}(t-s) ds$

De même, la corrélation entre différents temps et points de l'espace Cor(X,Y) = E[X.Y] se calcule ainsi:

$$Cor(C(\cdot, x_1, t_1), C(\cdot, x_2, t_2)) = \sum_{i=1}^{N} E[\alpha_i^2] E[c_i(t_1 - \tau_i, x_1)c_i(t_2 - \tau_i, x_2)]$$
$$+ \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} E[\alpha_i] E[\alpha_j] E[c_i(t_1 - \tau_i, x_1)] E[c_j(t_2 - \tau_j, x_2)]$$

Avec par définition:

$$E\left[c_{i}\left(t_{1}-\tau_{i},x_{1}\right)c_{i}\left(t_{2}-\tau_{i},x_{2}\right)\right]=\int c_{i}\left(t_{1}-s,x_{1}\right)c_{i}\left(t_{2}-s,x_{2}\right)f_{\tau}\left(s\right)ds$$

Par définition, la covariance et le coefficient de corrélation se déduisent de l'espérance et de la corrélation par :

*
$$Cov(X,Y) = Cor(X,Y) - E[X]E[Y]$$

$$\ast \left| \rho\left(C\left(\cdot, x_{1}, t\right), C\left(\cdot, x_{2}, s\right)\right) = \frac{Cov\left(C\left(\cdot, x_{1}, t\right), C\left(\cdot, x_{2}, s\right)\right)}{\sqrt{Var\left[C\left(\cdot, x_{1}, t\right)\right]Var\left[C\left(\cdot, x_{2}, s\right)\right]}} \right. \\ \left. = \rho^{1, 2}\left(t, s\right) \right|$$

- Tous ces moments sont bien déterminés si on fixe E[α] et Var[α] finis et f_τ
- Leur calcul requiert la résolution de N (=nb de sources) problèmes similaires
 - \Rightarrow gains possibles dans la résolution numérique :
 - Construction d'une discrétisation commune
 - Préconditionnement des matrices
 - Résolution des systèmes linéaires

Calcul des moments - simulation numérique

 Calcul des moments en tout temps (*t*,*s*) et en deux points (*x*₁,*x*₂) :

$$\begin{cases} N = 21 & E[\alpha_i] = 1 \\ Var[\alpha_i] = 0.1 \end{cases}$$





Calcul des moments – moyenne et variance



17

Calcul des moments – covariance



18

Calcul des moments – coefficient de corrélation



- $\rho \ge 0$: valeurs non corrélées ou variant dans le même sens
- temps longs décorrélés des temps courts
- temps longs corrélés entre eux



Introduction

Modélisation de la migration de radionucléideVers un modèle probabiliste

Calcul des moments

- Comportement aléatoire des sources : un exemple
- Définition et calcul des premiers moments

– Simulations numériques

- Homogénéisation du modèle aléatoire
 - Présentation générale
 - Résultats théoriques
 - Validation numérique

Homogénéisation – présentation

- Difficultés de la simulation numérique :
 - grand domaine (~km) / petits détails (sources ~m)
 - \Rightarrow maillage très lourd et calcul coûteux
- Une solution possible : l'homogénéisation
 - construction d'un modèle global macroscopique sur un domaine homogénéisé plus simple
 - approche adaptée à l'obtention d'un modèle champ lointain à partir des renseignements champs proche

Homogénéisation – présentation

- Eléments de base :
 - Mise en évidence de deux échelles spatiales de taille (micro/macro)
 - Détermination d'un petit paramètre ε caractérisant le rapport entre les deux échelles
 - Périodicité sur l'échelle "microscopique" (peut être relaxé)
- Le problème limite (ε →0) donne le modèle global (macroscopique)

Homogénéisation – présentation

Cas du stockage :

- macro : site de stockage micro : alvéole
- petit paramètre : $\varepsilon = 1/N$
- périodicité horizontale
- apparition d'une source "homogène" de support singulier dans le modèle global

$$Q_{i}^{\varepsilon}(\omega,t) = \mathbb{1}_{B_{i}^{\varepsilon}} \frac{1}{\varepsilon^{\gamma}} q(T_{x^{\prime} \varepsilon} \omega, t)$$
$$T_{x^{\prime} \varepsilon} \omega \text{ processus stationnaire}$$

et ergodique



Homogénéisation – résultats théoriques

• On considère :

 $- u^{\varepsilon}$ solution aléatoire du problème détaillé

$$\omega_{p}R\frac{\partial u^{\varepsilon}(\omega)}{\partial t} + L(u^{\varepsilon}(\omega)) = \sum_{i=1}^{N} Q_{i}^{\varepsilon}(\omega) \text{ dans } G$$

 $- u^0$ solution du problème homogénéisé

$$\omega_{p}R\frac{\partial u^{0}}{\partial t} + L(u^{0}) = Q^{0}.\delta_{\Sigma} \quad \text{dans } G$$

avec $Q^{0}(t) = s_{1}s_{2}E[q(\cdot,t)]$

Homogénéisation – résultats théoriques

• On peut montrer que

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \left\| u^{\varepsilon} - u^{0} \right\|_{L^{2}(0,\infty;H^{1}(G))} = 0 \quad \text{p.s.}$$

- On a donc convergence vers un problème:
 déterministe
 - avec une géométrie homogène plus simple
 - avec une source homogène spatialement $\Rightarrow u^0$ est une approximation simple à calculer
- On complète ce résultat avec une estimation du taux de convergence

Homogénéisation – résultats théoriques

 Sous certaines hypothèses de mélange (+ que ergodicité), on peut montrer l'estimation d'erreur suivante :

$$E\left\|u^{\varepsilon}-u^{0}\right\|_{L^{2}\left(0,T;H^{1}(G)\right)}^{2}\leq C\left(\varepsilon^{2}+\varepsilon^{2\gamma}\right)$$

 Ceci permet d'estimer la qualité de l'approximation de *u*^ε faite par *u*⁰

Homogénéisation – validation numérique

• On a:
$$E\left[\left\|u^{\varepsilon}-u^{0}\right\|_{L^{2}\left(0,T;L^{2}\left(G\right)\right)}^{2}\right]=\int_{0}^{T}\int_{G}\left(u^{0}\right)^{2}dxdt-2\int_{0}^{T}\int_{G}E\left[u^{\varepsilon}u^{0}\right]dxdt+\int_{0}^{T}\int_{G}E\left[\left(u^{\varepsilon}\right)^{2}\right]dxdt$$

• Dans le cas où $u^{\varepsilon}(\omega, x, t) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i(\omega) c_i(t - \tau_i(\omega), x)$, on calcule que :

$$I_{2} = \int_{0}^{T} \left(\int_{0}^{T} g(s,t) f_{\tau}(t-s) dt \right) ds \quad \text{et } I_{3} = \int_{0}^{T} h(s) F_{\tau}(s) ds$$

avec $g(s,t) = \sum_{i=1}^{N} E[\alpha_i] \int_G c_i(x,s) u^0(x,t) dx$ et $h(s) = \sum_{i=1}^{N} E[\alpha_i^2] \int_G c_i(x,s)^2 dx$

Homogénéisation – validation numérique

• Mise en œuvre du calcul



Homogénéisation – validation numérique

Résultats numériques



Homogénéisation – simulation numérique



Conclusion

- Application des techniques d'homogénéisation au problème aléatoire
- Calcul des moments dans un cas particulier
- Validation numérique de la convergence
- Perspectives :
 - Résultats numériques du cas 3D
 - Modélisation plus réaliste de l'aléa
 - Application au cas non linéaire
 - Convergence en loi