



Septembre 2006
Stage de fin d'étude
Promotion 2006

Rapport final

VALIDATION NUMERIQUE DE L'HOMOGENEISATION D'UNE EQUATION DE CONVECTION DIFFUSION AVEC ALEA DANS LE SECOND MEMBRE

Rédacteur : Farid SMAI

Entreprise : Institut Camille Jordan Modélisation
Mathématique pour l'Environnement

Tuteur : Alain Bourgeat et Olivier Gipouloux

Correspondant ECL : Abdel-Malek Zine

Sommaire

NOMENCLATURE DES GRANDEURS PHYSIQUES	3
PRESENTATION ET PROBLEMATIQUE	4
I. PHYSIQUE DU PROBLEME : TRANSPORT EN MILIEU POREUX	9
I.1/ DESCRIPTION D'UN MILIEU POREUX ET THEORIE DE LA CONTINUITE.....	9
I.2/ CIRCULATION DE FLUIDES EN MILIEU POREUX.....	10
I.3/ CONVECTION (OU ADVECTION).....	11
I.4/ DISPERSION CINEMATIQUE.....	11
I.5/ DIFFUSION MOLECULAIRE.....	12
I.6/ DISPERSION HYDRODYNAMIQUE ET OPERATEUR DE TRANSPORT.....	12
I.7/ SORPTION ET TRANSPORT.....	13
I.8/ DEGRADATION SPONTANEE DES COMPOSES RADIOACTIFS.....	14
II. MODELISATION D'UN PROBLEME TYPE ET RESOLUTION NUMERIQUE	16
II.1/ MODELISATION DU PROBLEME TYPE.....	16
II.2/ RESOLUTION NUMERIQUE DU PIRE CAS.....	19
III. HOMOGENEISATION DU PROBLEME ALEATOIRE : PRESENTATION ET RESULTATS THEORIQUES	22
III.1/ INTRODUCTION A L'HOMOGENEISATION.....	23
III.1.a/ <i>Présentation générale de la méthode</i>	23
III.1.b/ <i>Mise en œuvre de la méthode : paramétrage du problème de stockage</i>	25
III.2/ INTRODUCTION D'UN TERME SOURCE ALEATOIRE.....	27
III.2.a/ <i>Définition d'un cadre probabiliste général</i>	27
III.2.b/ <i>Définition d'un cas particulier</i>	28
III.3/ HOMOGENEISATION DU PROBLEME ALEATOIRE.....	29
IV. VALIDATION NUMERIQUE : DEVELOPPEMENT DU PROBLEME ALEATOIRE SUR UN CAS PARTICULIER	32
IV.1/ DEFINITIONS DES PROBLEMES DETAILLE ET HOMOGENE.....	32
IV.2/ CALCUL DES PREMIERS MOMENTS DE $u^E(\Omega)$	34
IV.2.a/ <i>Calcul du moment d'ordre 2</i>	35
IV.2.b/ <i>Mise en œuvre du calcul des moments d'ordre 1 et 2</i>	37
IV.2.c/ <i>Quelques résultats numériques et interprétations</i>	37
IV.3/ CALCUL DE L'ERREUR ENTRE LES SOLUTIONS DETAILLEE ET HOMOGENEISEE.....	40
IV.3.a/ <i>Calcul de la moyenne de l'erreur</i>	41
IV.3.b/ <i>Mise en œuvre du calcul de l'erreur</i>	43
IV.4/ VALIDATION DU GAIN APORTE PAR L'HOMOGENEISATION.....	45
CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES	49
ANNEXE : DETAILS DES MAILLAGES POUR LES GEOMETRIES DETAILLEE ET HOMOGENEISEE	50
BIBLIOGRAPHIE	54

Nomenclature des grandeurs physiques

Symbole	Description	Dimension
Q_v	Débit volumique	L^3T^{-1}
K	Conductivité hydraulique ou perméabilité	LT^{-1}
h	Charge hydraulique	L
p	Pression	$ML^{-1}T^{-2}$
ρ	Masse volumique	ML^{-3}
g	Accélération de la pesanteur	LM^{-2}
z	Profondeur	L
V	Vitesse de Darcy	LT^{-1}
k	Perméabilité intrinsèque	L^2
μ	Viscosité dynamique	$ML^{-1}T^{-1}$
C	Concentration massique	ML^{-3}
D'	Dispersion cinématique	L^2T^{-1}
D'_L	Dispersion longitudinale	L^2T^{-1}
D'_T	Dispersion transversale	L^2T^{-1}
α_L	Dispersivité longitudinale	L
α_T	Dispersivité transversale	L
D^*	Diffusion moléculaire effectif	L^2T^{-1}
D_d	Diffusion moléculaire en eau libre	L^2T^{-1}
D	Dispersion hydrodynamique	L^2T^{-1}
Q	Terme de source volumique	$ML^{-3}T^{-1}$
ω	Porosité	ad.
K_d	Coefficient de sorption	$M^{-1}L^3$
R_0	Facteur de retard	ad.
λ	Constante de désintégration radioactive	T^{-1}

Présentation et problématique

La gestion des déchets nucléaires est un problème complexe et multiple de par la diversité des déchets considérés et les contraintes de sûreté nécessaires ([11],[13],[14]). L'origine de ces déchets est variée : pour la France, on peut considérer que plus de la moitié des déchets nucléaires proviennent de l'industrie électronucléaire, un quart de la recherche, le reste étant essentiellement produit par le secteur de la défense. Outre leurs diverses origines, on catégorise les déchets selon deux critères principaux : l'activité et la durée de vie. On distingue ainsi les déchets à Très Faible Activité (TFA, de 1 à 100 Bq/g), Faible Activité (FA, 100 à 100 000 Bq/g), Moyenne Activité (MA, 100 000 à 100 millions Bq/g) et Haute Activité (HA, 10 milliards Bq/g). On parle de déchet à vie courte pour ceux contenant des isotopes avec une période radioactive (temps nécessaire à la désintégration de 50% de la quantité présente de l'isotope) inférieure à 30 ans, de déchets à vie longue pour les autres.

L'objectif de la gestion des déchets, qu'ils soient nucléaires ou chimiques, est de protéger l'homme et son environnement contre toute émission ou dissémination de matières dangereuses, il s'agit donc d'isoler les déchets tant qu'ils sont actifs. Le stockage est ainsi au cœur du problème de la gestion des déchets radioactifs. Les déchets de très faible activité, qui réunissent par exemple des déchets minéraux inertes (béton, gravats, terres...) et industriels (plastiques, ferrailles...) issus des installations nucléaires, voient leur niveau d'activité diminuer jusqu'à un niveau proche de la radioactivité naturelle en quelques dizaines d'années. A l'inverse, les déchets de haute activité à vie longue, qui sont issus des combustibles usés, nécessitent d'être confinés pendant des périodes de temps de l'ordre du million d'années avant de retrouver une radioactivité équivalente à celle du milieu naturel. Leur stockage est donc soumis à des contraintes supplémentaires telles que la garantie d'une fiabilité à très long terme, l'enfouissement des déchets est une des réponses possibles à ces exigences.

Le travail présenté se situe dans une problématique de confinement en milieu géologique de déchets de Haute Activité et à Vie Longue (HAVL). Les déchets ainsi désignés ne sont pas purs et contiennent à la fois des radionucléides à vie courte, généralement en quantité importante, et des radionucléides à vie longue en quantité moyennement à très importante, la période de certains des isotopes contenus dépassant la centaine de milliers d'années. Ces déchets sont conditionnés en vue de leur entreposage, c'est-à-dire qu'ils sont solidifiés pour ceux qui se présentent sous une forme dispersable, puis placés dans des conteneurs. Ces conteneurs, aussi appelés aussi colis, varient selon les déchets auxquels ils sont destinés mais leur principe général reste toujours le même : les déchets sont pris dans une matrice (typiquement composée de ciment et/ou de bitume), le conteneur lui-même étant constitué de béton ou d'acier.

Le stockage doit répondre à certains impératifs, parmi lesquels : s'opposer à la circulation d'eau, limiter le relâchement des radionucléides hors des colis et les immobiliser à l'intérieur du stockage lui-même, retarder et atténuer la migration dans le milieu géologique des radionucléides qui auraient été relâchés par les déchets. Pour répondre à ces objectifs, les organismes concernés - le CEA (Commissariat à l'Energie Atomique), l'ANDRA (Agence

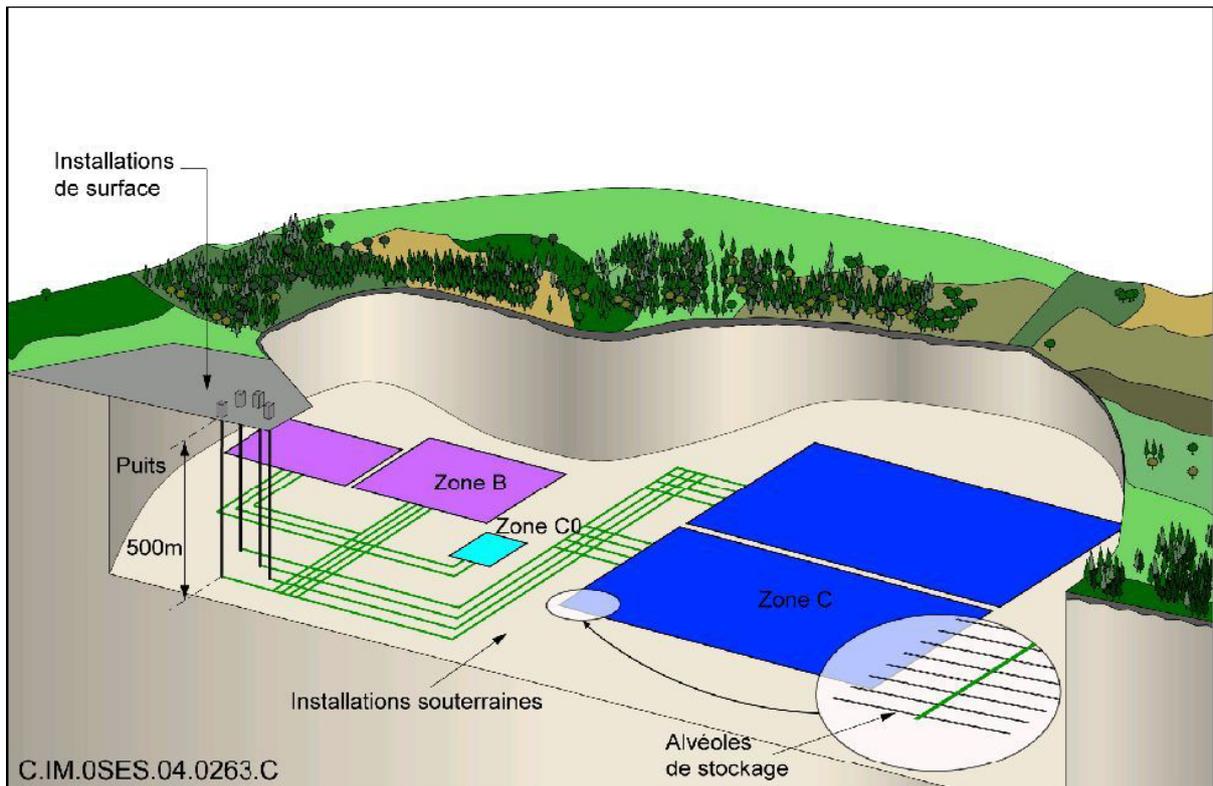


Fig. 1 – Structure d'un stockage des déchets nucléaires en milieu géologique profond

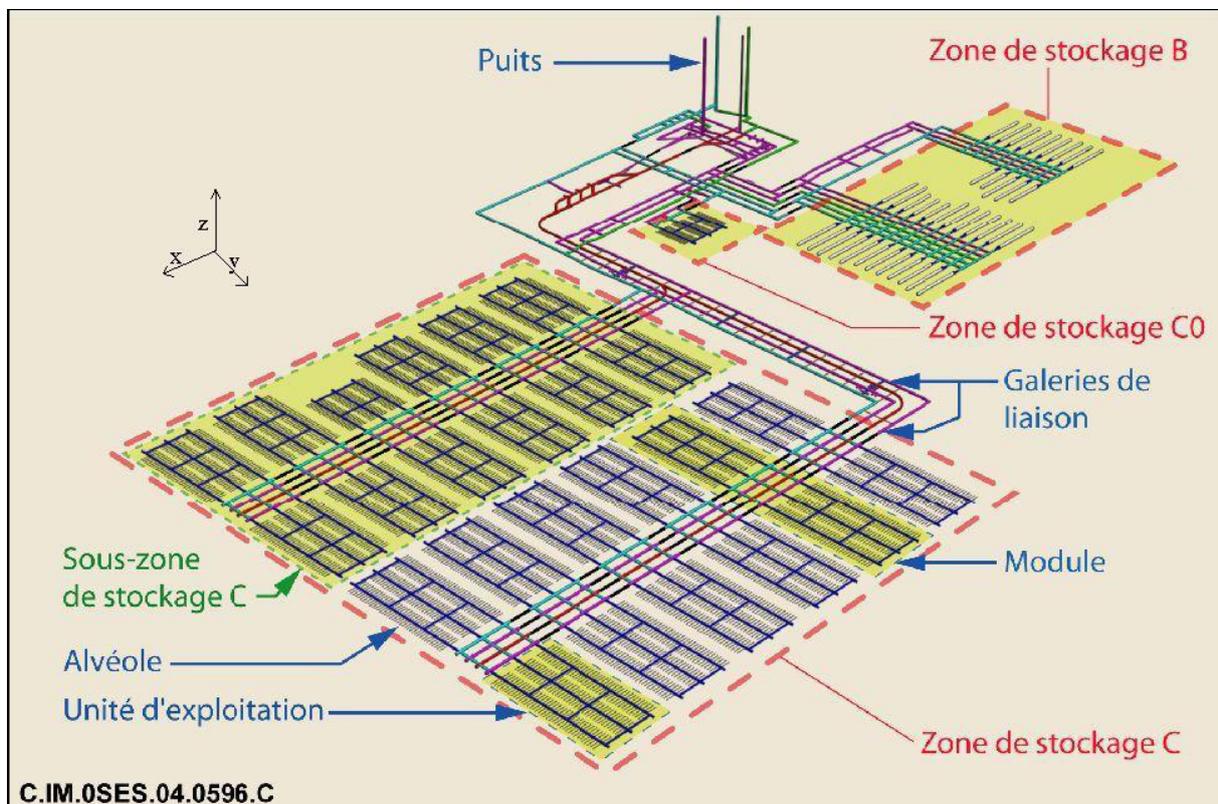


Fig. 2 – Composition d'une zone de stockage des déchets nucléaires en milieu géologique profond

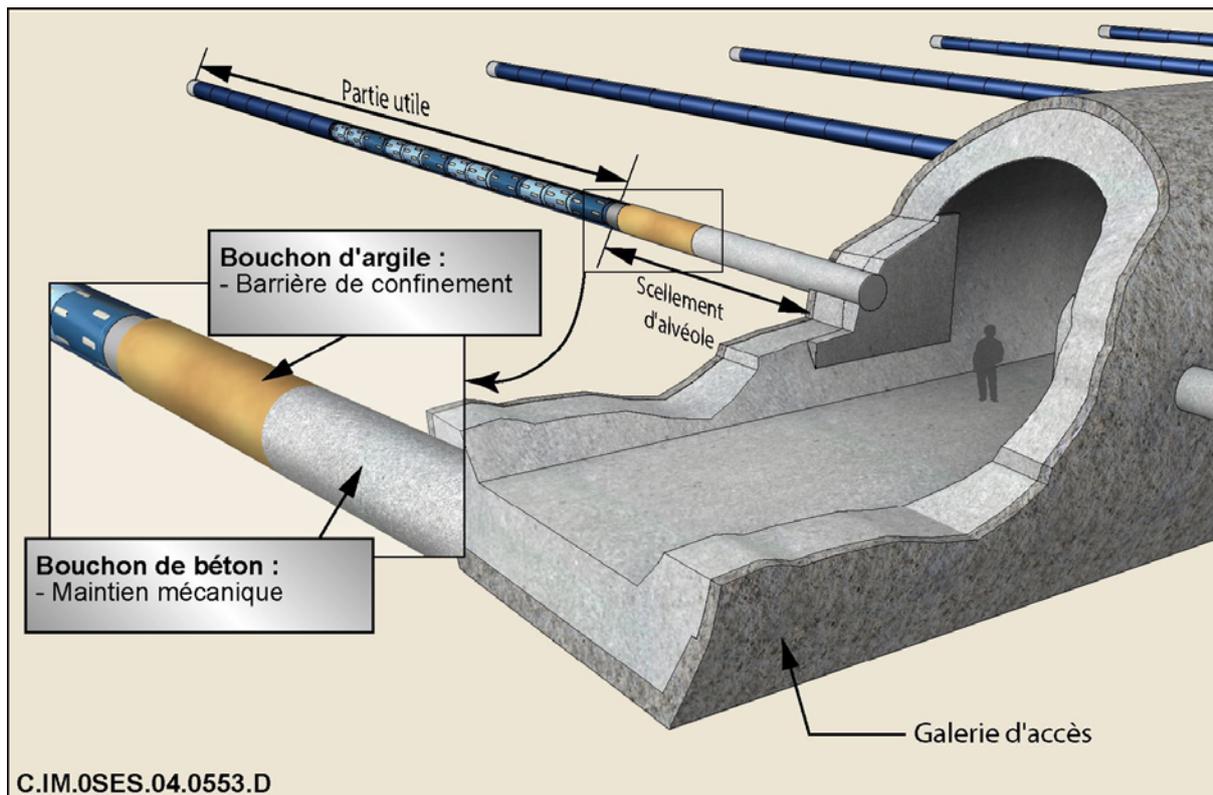


Fig. 3 – Structure d'un module : alvéoles + galerie

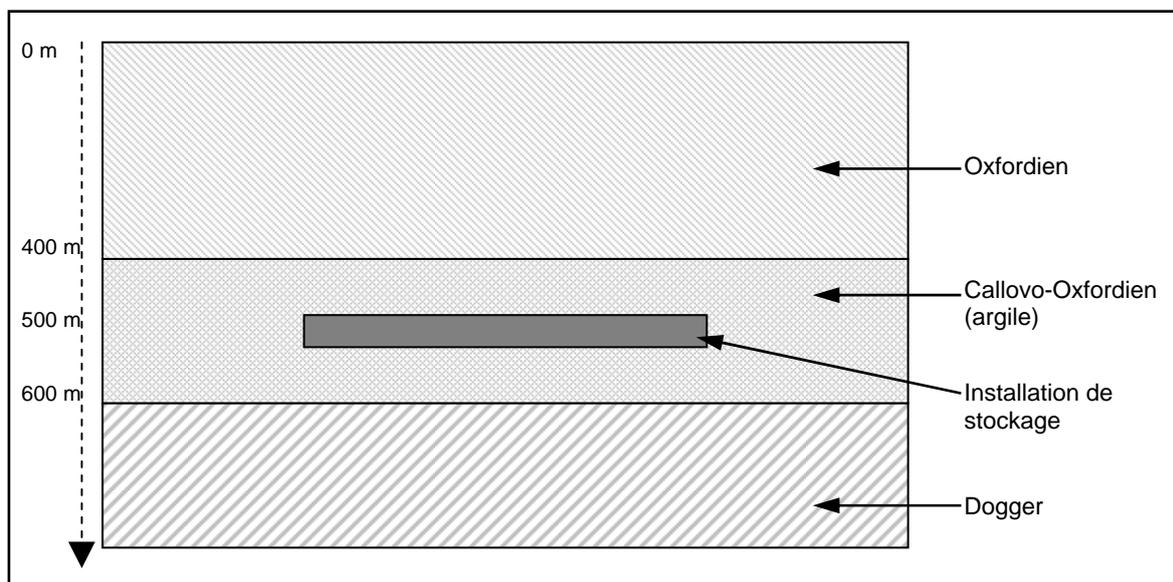


Fig. 4 – Implantation du stockage dans le milieu géologique

Nationale pour la gestion des Déchets RadioActifs) et l'IRSN (Institut de Radioprotection et de Sécurité Nationale) - ont étudié entre autre le stockage en milieu géologique et mis à profit les propriétés de certaines couches géologiques.

L'architecture du stockage envisagée se définit sur plusieurs échelles. Le stockage se décompose en plusieurs zones de stockage (figure 1) destinées à recevoir différents types de déchets. Chaque zone est composée de modules (figure 2) qui sont reliés par des galeries de liaison et traversés par des galeries d'accès. Les modules sont constitués d'alvéoles (figure 3) connectées aux galeries d'accès et qui contiennent les colis à entreposer. Les alvéoles sont des cavités souterraines creusées dans la formation géologique, leur architecture précise varie selon la zone de stockage pour s'adapter au type de déchets reçus et à leur conditionnement. Cette installation a été conçue sur un seul niveau et avec une faible extension verticale afin de pouvoir s'insérer dans une formation géologique d'argile (couche du Callovo-Oxfordien) tout en maximisant les épaisseurs d'argilite situées au-dessus et au-dessous du stockage (figure 4). Cette configuration permet d'exploiter au mieux la très faible perméabilité de l'argile et donne ainsi à la couche du Callovo-Oxfordien un rôle de barrière qui s'oppose à la circulation de l'eau et à la migration des radionucléides.

Etant donné les échelles de temps considérées (jusqu'à un million d'années), la fuite des colis ne peut-être négligée, il est donc essentiel de pouvoir évaluer comment se propageraient les radionucléides s'ils venaient à être libérés dans le milieu géologique. Compte tenu encore une fois des temps mis en jeu ainsi que de l'ampleur de l'installation, ces résultats ne sont pas directement accessibles par des voies expérimentales ; il est donc nécessaire de passer par l'élaboration d'un modèle physique et le calcul de ses solutions. La modélisation physique du problème, que l'on décrira dans la première partie de ce rapport, s'exprime en termes d'équations aux dérivées partielles et l'on dispose donc de diverses méthodes pour obtenir des solutions numériques au problème.

Il est ainsi possible de simuler les conséquences de la sortie des radionucléotides des colis. Ceci permet une première estimation des risques en considérant le pire cas où tout les colis relâchent de la même manière et au même moment leur contenu. Cependant ce pire cas n'est pas forcément représentatif de la réalité car il subsiste beaucoup d'incertitudes sur les données du modèle. En effet, le contenu exact des colis n'est pas connu à l'avance et peut varier d'un colis à l'autre. Il en va de même de la manière dont les colis relâchent les radionucléides. Enfin le milieu géologique présente lui aussi une certaine variabilité qu'il n'est pas possible de décrire complètement à cause des grandes dimensions du domaine : l'installation s'étend sur une surface de l'ordre du kilomètre carré et se situe à 500 mètres de profondeurs se qui rend inenvisageable une caractérisation exhaustive du milieu géologique. L'introduction de ces aléas dans le modèle, si elle le rapproche de la réalité, le rend aussi plus complexe puisqu'on abandonne la modélisation entièrement déterministe du pire cas pour adopter une représentation stochastique qui prend en compte les variabilités du modèle. Bien que le problème stochastique admette en principe une solution exacte de nature aléatoire, cette dernière n'est pas facilement accessible en pratique et on cherchera alors à évaluer certaines de ses caractéristiques telles que la moyenne, la variance ou des moments d'ordres plus élevés. Le travail présenté ici se restreint à l'étude des aléas sur les sources de radionucléides, chaque couche géologique étant considérée comme complètement déterminée.

Parallèlement à la question de la variabilité du modèle, la simulation d'un cas donné et déterministe peut poser elle aussi des problèmes du point de vue du temps de calcul et de la mémoire. En effet, la description détaillée de l'installation de stockage met en jeu des échelles de tailles très différentes : le site complet s'étend sur des dimensions de l'ordre du kilomètre

tandis que les colis susceptibles de relâcher les radionucléides ont une taille de l'ordre du mètre. Ceci implique qu'une modélisation complète de la géométrie de l'installation représente un coût en mémoire très important. A cela s'ajoute que le temps de résolution du système numérique est directement lié à la finesse de la description. Au final, la simulation du problème complet et détaillé représente un coût en mémoire et en temps de calcul conséquent qui nécessite de mettre en œuvre des techniques informatiques et de calcul spécifiques comme par exemple le calcul parallèle. Une autre manière d'aborder cette difficulté est de résoudre un problème qui soit moins coûteux mais qui reste proche du problème original ; ceci nécessite des développements mathématiques préalables afin de caractériser formellement la distance qui existe entre les solutions des deux problèmes. L'approche retenue s'appuie sur le grand nombre de sources de radionucléides et sur la régularité de leur disposition : le nouveau problème est en fait vu comme une limite du problème initial dans lequel le nombre de sources tendrait vers l'infini. On peut en effet mettre en évidence un petit paramètre (par exemple la taille d'un colis sur la taille du stockage) et faire un développement asymptotique et un changement d'échelle dans le problème, pour ensuite passer à la limite quand le petit paramètre tend vers zéro. Cette technique dite d'homogénéisation permet ainsi de définir un problème où les détails à petite échelle disparaissent pour ne considérer qu'une unique source limite que l'on qualifie d'homogène. Ce problème homogène ne comporte alors plus qu'une seule échelle caractéristique, ce qui rend sa résolution beaucoup plus économique en temps et en mémoire.

La première partie de ce rapport décrit donc la modélisation physique mis en jeu, c'est-à-dire le problème du transport d'élément radioactif en milieu poreux. La seconde partie établit le problème type qui sera étudié dans la suite du travail et les techniques numériques utilisées pour la résolution de ce problème. On introduit la technique de l'homogénéisation et les aspects aléatoires du problème dans la troisième partie afin de présenter les résultats théoriques de l'homogénéisation du problème aléatoire. Enfin, dans une quatrième partie, on développe une étude du problème aléatoire dans un cas particulier qui permet une validation numérique des résultats de la troisième partie. Dans le travail présenté ici, on se limitera à l'étude du cas bidimensionnel.

I. Physique du problème : transport en milieu poreux.

Les sols peuvent être assimilés à des milieux poreux contenant une certaine proportion d'eau. La migration des espèces chimiques dans les sols s'y fait par le biais de l'eau qu'ils contiennent : les espèces chimiques sont dissoutes dans l'eau, et les sols, perméables, permettent la circulation de l'eau et des espèces. On peut distinguer deux types de contributions essentielles dans la migration d'une espèce. D'une part un mouvement d'ensemble porté par la circulation de l'eau dans le milieu (convection) ; d'autre part une tendance à homogénéiser la concentration, cette tendance provient de deux mécanismes distincts : la dispersion cinématique et la diffusion moléculaire. Selon la nature des espèces et du milieu, d'autres phénomènes peuvent encore influencer la migration.

On recense dans cette partie les différents mécanismes intervenant dans la propagation de radionucléides dans une formation géologique ([10],[12]) afin de formuler le modèle de base qui servira de référence dans la suite de notre étude.

I.1/ Description d'un milieu poreux et théorie de la continuité

En toute généralité, un milieu poreux est un matériel constitué par une matrice solide et des vides, appelés pores. La fraction volumique de vide d'une roche définit sa porosité totale. Ces vides peuvent être occupés par de l'eau, de l'air ou d'autres fluides. Dans notre contexte, on ne s'intéressera uniquement aux milieux saturés en eau, c'est-à-dire dans lesquels tous les vides sont remplis d'eau.

Les milieux poreux naturels sont caractérisés par une extrême complexité de la distribution des pores, irrégulières, aussi bien en forme qu'en taille. Ainsi, si en théorie il est possible de décrire ce système à l'échelle du pore, les fortes hétérogénéités rendent cette description inatteignable lorsque la taille du système augmente. Ce constat force à envisager une approximation du système qui soit plus facile à manipuler que cette description microscopique. C'est ce que propose la théorie de la continuité. Dans cette théorie le système physique réel discret est remplacé par un système continu dans lequel les propriétés physiques le décrivant varient continument dans l'espace. L'hypothèse sous-jacente est qu'un système physique réel qui présente des variations très rapides à petite échelle peut être approximé par un système dans lequel l'évolution spatiale des propriétés étudiées est suffisamment régulière pour permettre l'utilisation du calcul différentiel pour décrire les processus s'y déroulant. Dans la représentation continue des milieux poreux, la valeur d'une variable physique en chaque point résulte d'une moyenne de la propriété physique réelle sur un volume élémentaire représentatif. Les dimensions d'un tel volume sont généralement grandes par rapport à la taille du grain mais petites par rapport à la longueur caractéristique sur laquelle les quantités considérées varient.

I.2/ Circulation de fluides en milieu poreux

Pour décrire le transport d'espèces chimiques en milieu poreux, une première condition est de savoir comment l'eau, qui est le vecteur de ces espèces dissoutes, s'écoule dans le milieu. On peut caractériser un milieu poreux par deux grandeurs : sa porosité cinématique et sa perméabilité intrinsèque. Le volume poreux dans lequel l'eau peut circuler est inférieur au volume vide total, la porosité cinématique correspond ainsi à la fraction de la porosité totale contenant l'eau qui peut circuler. Ceci exclut donc les volumes correspondant à l'eau attachée à la surface des grains par le jeu des forces d'attraction moléculaire, aux pores non connectés au réseau global, et aux pores en cul-de-sac dans lesquels l'eau est quasi immobile. La perméabilité intrinsèque est définie par la loi de Darcy.

La loi de Darcy est une loi empirique obtenue pour un flux monodimensionnel à travers une colonne de sable homogène et s'écrit :

$$Q_v = -KA \frac{dh}{dl} \quad (I.1)$$

avec Q_v le débit (L^3T^{-1}), K une constante appelée conductivité hydraulique ou perméabilité (LT^{-1}), A l'aire de la section perpendiculaire à l'écoulement (L^2), dh/dl le gradient de charge hydraulique. La charge hydraulique en un point s'exprimant de manière générale ainsi :

$$h = \frac{p}{\rho g} + z \quad (I.2)$$

avec p la pression ($ML^{-1}T^{-2}$), ρ la masse volumique (ML^{-3}), g l'accélération de la pesanteur (LT^{-2}) et z la profondeur (L). Si on divise le débit Q par la section A , on obtient une vitesse, v , dite vitesse de Darcy correspondant à une vitesse fictive puisqu'elle suppose que toute la surface, y compris la matrice, participe à l'écoulement. La vitesse, moyenne, du fluide dans les pores est égale à la vitesse de Darcy divisée par la porosité cinématique.

On généralise cette loi au cas générale tridimensionnel et anisotrope pour obtenir :

$$\vec{V} = -\overline{\overline{K}} \cdot \overrightarrow{grad}(h) \quad (I.3)$$

avec cette fois \vec{V} la vitesse de Darcy vectorielle (LT^{-1}) et $\overline{\overline{K}}$ le tenseur de perméabilité (LT^{-1}). Dans le cas d'un fluide incompressible tel que l'eau, la conservation de la masse en régime permanent donne la relation suivante :

$$div(\overline{\overline{K}} \cdot \overrightarrow{grad}(h)) = 0 \quad (I.4)$$

Cette dernière expression permet, avec la donnée de conditions limites aux bords du domaine, de déterminer la charge hydraulique h et par conséquent la vitesse de Darcy \vec{V} .

La perméabilité $\overline{\overline{K}}$ dépend des caractéristiques du milieu ainsi que des caractéristiques du fluide. On peut définir une perméabilité intrinsèque (L^2), $\overline{\overline{k}}$, ne dépendant que de la structure et de la connectivité des pores, à travers la relation :

$$\overline{\overline{K}} = \frac{\rho g}{\mu} \overline{\overline{k}} \quad (I.5)$$

avec g l'accélération de pesanteur, ρ la masse volumique du fluide et μ la viscosité dynamique du fluide ($ML^{-1}T^{-1}$).

I.3/ Convection (ou advection)

La convection est le mécanisme le plus intuitif de déplacement, il consiste en l'entraînement des éléments en solution par le fluide qui se déplace. L'équation de transport par convection pure dans un milieu monodimensionnel est la suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (I.6)$$

avec C la concentration de l'espèce (ML^{-3}) et U_x la vitesse moyenne linéaire du fluide (LT^{-1}). Dans cette situation, pour une répartition spatiale donnée de la concentration, l'allure de cette répartition est conservée dans le temps et avance simplement à la même vitesse que celle du fluide.

Dans le cas tridimensionnel, l'équation de transport par convection pure en milieu poreux devient alors, avec \vec{V} la vitesse de Darcy :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -div(\vec{V}.C) \quad (I.7)$$

ou dans le cas d'un fluide incompressible :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\vec{V} \cdot \overrightarrow{grad}(C) \quad (I.8)$$

I.4/ Dispersion cinématique

Du fait de la microstructure du milieu, la vitesse du fluide varie en amplitude et en direction au sein du milieu poreux. Cette variation des vitesses à petite échelle entraîne une dilution du soluté, appelée dispersion cinématique. Les principales causes de ces variations de vitesses sont les suivantes :

- profils des vitesses paraboliques, nulles sur les parois et maximales sur l'axe des capillaires intergrains ;
- dimension variable des pores qui a pour conséquence une variation des vitesses d'une section à l'autre ;
- cheminement localement différent, plus ou moins long par rapport à la direction de la vitesse moyenne.

Ainsi, du fait du mélange causé par la variabilité associée au mouvement de l'eau dans le milieu, les groupes de particules sont continuellement séparés pendant la circulation du fluide. Il en résulte un étalement longitudinal et transversal de la concentration autour du front convectif pur.

On peut décrire ce phénomène par une loi phénoménologique similaire à la loi de Fick où le coefficient de dispersion (L^2T^{-1}) s'exprime sous une forme tensorielle, symétrique, de second ordre $\overline{\overline{D'}}$ qui peut s'exprimer ainsi dans le cas tridimensionnel :

$$\overline{\overline{D'}} = \begin{vmatrix} D'_L & 0 & 0 \\ 0 & D'_T & 0 \\ 0 & 0 & D'_T \end{vmatrix} \quad (I.9)$$

où les directions principales du tenseur sont liées à l'écoulement. On définit ainsi D'_L le coefficient de dispersion longitudinal (L^2T^{-1}), dans le sens de l'écoulement, et D'_T le coefficient de dispersion transversal (L^2T^{-1}), dans les deux directions perpendiculaire à l'écoulement. Ces deux coefficients sont proportionnels à la vitesse linéaire de Darcy, $|\vec{V}|$, ils peuvent donc s'écrire ainsi :

$$\begin{aligned} D'_L &= \alpha_L |\vec{V}| \\ D'_T &= \alpha_T |\vec{V}| \end{aligned} \quad (I.10)$$

où α_L et α_T représentent la dispersivité, respectivement longitudinale et transversale (L). La dispersivité est une propriété caractéristique du milieu poreux mais également du champ de vitesse.

I.5/ Diffusion moléculaire

Contrairement à la dispersion cinématique, la diffusion moléculaire peut se dérouler indépendamment de la convection. C'est un phénomène physique lié à l'agitation moléculaire. Dans un fluide au repos, le mouvement brownien envoie des particules dans toutes les directions de l'espace. Si la concentration n'est pas homogène, c'est-à-dire qu'il existe un gradient de concentration entre deux points voisins, le point ayant la concentration la plus élevée enverra en moyenne plus de particules dans toutes les directions que l'autre point. La résultante sera donc un transfert de particules des zones à concentration élevée vers les zones à concentration faible selon la loi de Fick classique où le coefficient, scalaire, de diffusion moléculaire (L^2T^{-1}) traduit la proportionnalité du flux massique au gradient de concentration.

Dans les milieux poreux, la présence de grains ralentit la diffusion car les ions doivent alors suivre des chemins plus longs que dans l'eau libre. Le coefficient de diffusion moléculaire, dit effectif, D^* (L^2T^{-1}) tient compte de ce phénomène et est associé au coefficient en eau libre D_d (L^2T^{-1}). En outre le coefficient dépend de la nature de l'ion, de la température, de la pression et de la composition du fluide.

I.6/ Dispersion hydrodynamique et opérateur de transport

Dans la pratique, la diffusion moléculaire et la dispersion cinématique ne peuvent pas être dissociées. C'est pourquoi elles sont généralement décrites par une équation unique, loi de diffusion de Fick, avec un coefficient de diffusion commun, le tenseur $\overline{\overline{D}}$ appelé

coefficient de dispersion hydrodynamique (L^2T^{-1}), regroupant le coefficient de diffusion moléculaire et la dispersion cinématique :

$$\overline{\overline{D}} = \begin{vmatrix} D_L & 0 & 0 \\ 0 & D_T & 0 \\ 0 & 0 & D_T \end{vmatrix} \text{ avec } \begin{cases} D_L = \alpha_L |\vec{V}| + D^* \\ D_T = \alpha_T |\vec{V}| + D^* \end{cases} \quad (I.11)$$

Ce qui s'écrit encore :

$$\overline{\overline{D}} = D^* \overline{\overline{I}} + |\vec{V}| \left[\alpha_L \overline{\overline{E}}(\vec{V}) + \alpha_T \left(\overline{\overline{I}} - \overline{\overline{E}}(\vec{V}) \right) \right] \quad (I.12)$$

avec

$$E_{ij}(\vec{V}) = \frac{V_i V_j}{|\vec{V}|^2} \quad (I.13)$$

La variation de la concentration dans le temps et l'espace due uniquement à la dispersion hydrodynamique dans un milieu poreux s'écrit alors :

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t} \right)_{dispersion} = \text{div} \left(\overline{\overline{D}} \cdot \overrightarrow{\text{grad} C} \right) \quad (I.14)$$

On peut ainsi écrire l'équation générale du transport d'une espèce par convection-diffusion dans un milieu poreux avec un terme source Q ($ML^{-3}T^{-1}$):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{div} \left(\overline{\overline{D}} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}(C) - \vec{V} \cdot C \right) + Q \quad (I.15)$$

On réduira cette écriture en introduisant l'opérateur de transport $L(C)$:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + L(C) = Q \quad (I.16)$$

avec

$$L(C) = -\text{div} \left(\overline{\overline{D}} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}(C) - \vec{V} \cdot C \right) \quad (I.17)$$

I.7/ Sorption et transport

Le cas idéal de la convection-diffusion pure est rarement rencontré en pratique, il est par exemple fréquent que le soluté interagisse avec la matrice du milieu poreux, on parle alors de sorption. Il existe différents phénomènes de sorption, on peut citer pour exemple l'adsorption, qui consiste en l'accumulation d'éléments sur l'interface entre la solution et le solide, ou encore la chimisorption dans laquelle le soluté est incorporé sur un sédiment par une réaction chimique. La modélisation de ces phénomènes peut mener à des équations assez complexes, cependant, lorsque les concentrations de soluté sont très faibles, comme c'est le cas dans la

problématique de l'enfouissement des déchets radioactifs, des modèles simples peuvent être formulés.

De manière générale, le phénomène de sorption induit un terme source dans l'équation de transport :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + L(C) = Q_{sorption}(C). \quad (I.18)$$

Sous les hypothèses de très faible concentration et d'une cinétique quasi instantanée de la réaction de sorption, ce terme source prend la forme suivante :

$$Q_{sorption}(C) = -\frac{\rho_s}{\omega} K_d \frac{\partial C}{\partial t} \quad (I.19)$$

avec ρ_s la masse volumique du milieu poreux, ω sa porosité et K_d le coefficient de sorption ($M^{-1}L^3$) qui est caractéristique de la réaction de sorption, ce coefficient est nul en l'absence de tout phénomène de sorption, positif sinon. L'équation peut donc s'écrire comme une équation de convection-diffusion sans terme source, mais où apparaît un facteur de retard constant, R_0 :

$$R_0 \frac{\partial C}{\partial t} + L(C) = 0 \quad (I.20)$$

avec

$$R_0 = 1 + \frac{\rho_s}{\omega} K_d. \quad (I.21)$$

La sorption entraîne ainsi un phénomène de retard : il y a une réduction de la vitesse apparente du soluté.

I.8/ Dégradation spontanée des composés radioactifs

Un élément radioactif possède un noyau instable susceptible de se scinder en deux, ce qui produit deux nouveaux atomes, eux-mêmes potentiellement instables. La scission d'un noyau atomique est un phénomène aléatoire, plus précisément, la probabilité de désintégration d'un atome sur un temps donné est proportionnel à ce temps. Le coefficient de proportionnalité étant caractéristique de l'élément. A l'échelle macroscopique, l'évolution de la concentration d'un élément radioactif résulte d'une moyenne sur la désintégration aléatoire de chaque atome. Cette évolution suit donc une loi déterministe :

$$\frac{dC_{radioactif}}{dt} = -\lambda C_{radioactif} \quad (I.22)$$

avec λ la constante de dégradation de l'élément (T^{-1}). On définit aussi la période de l'élément (T), $T = \log 2 / \lambda$, qui correspond au temps nécessaire pour que la concentration soit réduite de moitié.

L'équation de transport pour un composé radioactif intègre donc ce phénomène de dégradation spontanée et se réécrit :

$$R_0 \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \lambda C \right) + L(C) = 0 \quad (I.23)$$

soit, en présence d'un terme source :

$$R_0 \frac{\partial C}{\partial t} + L(C) + R_0 \lambda C = Q. \quad (I.24)$$

Cette dernière équation caractérise donc l'évolution de la concentration d'une espèce radioactive dans un milieu poreux. Les hypothèses essentielles dans l'élaboration de ce modèle physique ont été : la saturation en liquide du milieu poreux ; une très faible concentration dans le milieu ; et une réaction de sorption quasi instantanée. C'est dans ce cadre que nous nous situerons désormais et nous utiliserons donc systématiquement l'équation (I. 24) pour modéliser la migration d'un radionucléide dans les sols.

II. Modélisation d'un problème type et résolution numérique.

Dans la première partie, nous avons présenté les équations physiques décrivant le phénomène de migration d'un radionucléide dans un milieu géologique. Nous allons maintenant préciser les caractéristiques physiques et la géométrie afin de formuler un modèle complet pour la simulation d'une fuite de radionucléide dans l'installation de stockage. Ce modèle constituera le problème type qui sera étudié dans toute la suite de ce travail ([10]).

Compte tenu de la structure stratifiée horizontalement du milieu et du stockage lui-même, on se limite ici à une description bidimensionnelle du problème dans un plan vertical coupant les alvéoles dans leur longueur. L'objectif étant de caractériser un comportement global et de valider une approche théorique sur ce comportement, la géométrie envisagée est simplifiée en négligeant certains détails de l'installation (galeries, puits,...) et du milieu géologique.

On décrira ensuite le logiciel et les techniques de résolution numérique employées ainsi que les résultats obtenus pour la simulation du pire cas où toutes les alvéoles relâchent simultanément le radionucléide dans le milieu.

II.1/ Modélisation du problème type

On considère un milieu poreux G saturé et le transport d'un radionucléide dans ce milieu durant un temps T régi par l'équation de transport suivante :

$$R \frac{\partial C}{\partial t} - \text{div}(\overline{\overline{D}} \cdot \text{grad}(C) - \vec{V} \cdot C) + R\lambda C = Q \quad \text{dans } G \times [0; T], \quad (II.1)$$

$$\overline{\overline{D}} = D^* \vec{I} + |\vec{V}| \left[\alpha_L \overline{\overline{E}}(\vec{V}) + \alpha_T (\vec{I} - \overline{\overline{E}}(\vec{V})) \right]$$

où

- C est la concentration du radionucléide en solution, (ML^{-3}) ,
- \vec{V} la vitesse de Darcy, (LT^{-1}) ,
- λ la constante de dégradation, (T^{-1}) ,
- R le facteur de retard,
- $\overline{\overline{D}}$ le tenseur de dispersion hydrodynamique, (L^2T^{-1}) ,
- D^* le coefficient de diffusion moléculaire effectif, (L^2T^{-1}) ,
- α_L la dispersivité longitudinale, (L) ,
- α_T la dispersivité transversale, (L) ,
- Q un terme source, $(ML^{-3}T^{-1})$.

Le domaine G correspond à une modélisation bidimensionnelle du milieu géologique et du stockage. Ce milieu se décompose en couches sédimentaires qui se sont déposées entre -250 millions et -135 millions d'années. Les principales couches sont, de la plus haute à la plus profonde :

- le Kimméridgien marneux, d'une centaine de mètres d'épaisseur, constitué de marne et de calcaire argileux ;
- la formation calcaire de l'Oxfordien moyen à supérieur, d'environ 300 mètres d'épaisseur ;
- la formation argileuse du Callovo-Oxfordien, d'une épaisseur d'environ 100 mètres ;
- la formation calcaire du Dogger épaisse de quelques centaines de mètres et qui repose sur une couche d'argile.

Pour simplifier la géométrie du domaine, on considérera uniquement la couche du Callovo-Oxfordien, dans laquelle s'insère l'installation de stockage, ainsi que ses deux couches voisines (Oxfordien et Dogger). On supposera de plus que ces couches sont d'une épaisseur constante et que leurs interfaces sont parfaitement horizontales.

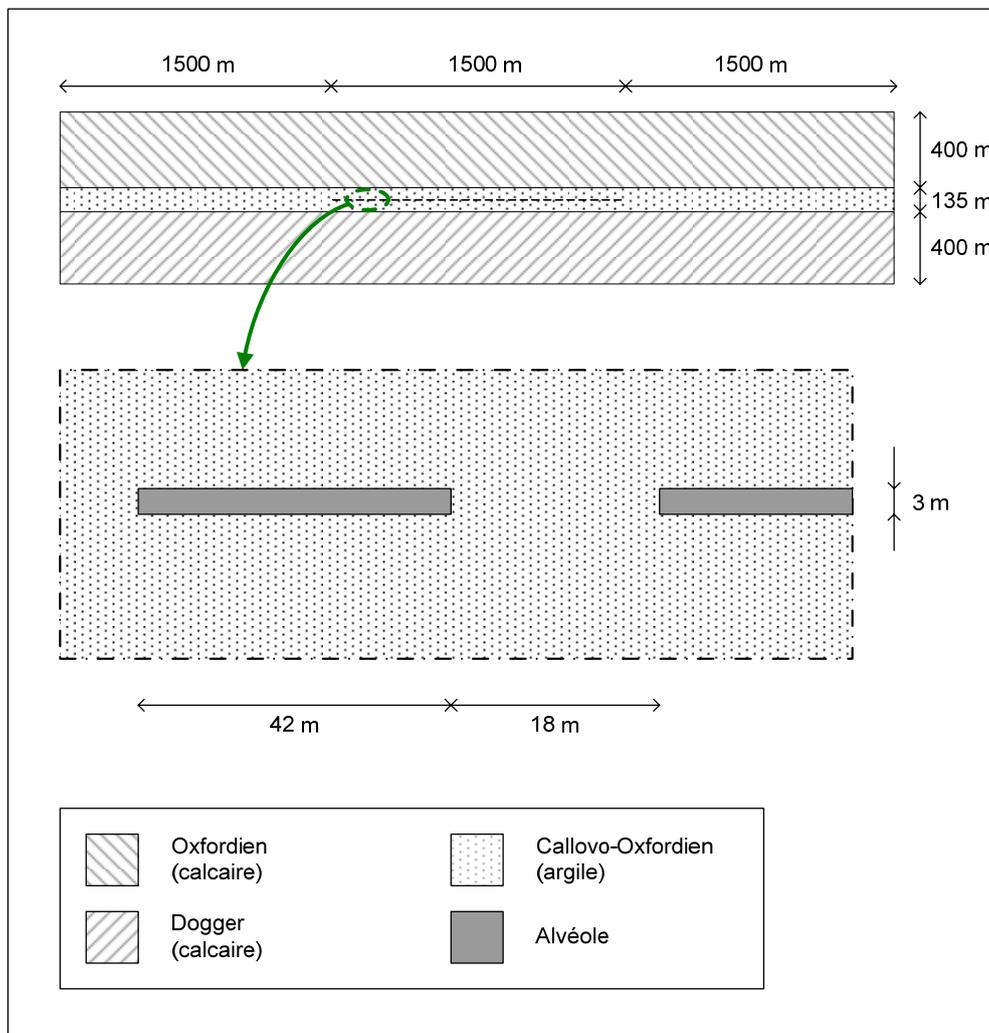


Fig. II.1 - Modélisation de la géométrie du domaine (dimensions données en mètres)

On simplifie de même le stockage en négligeant tout le réseau de galeries et l'on travaille dans un plan qui coupe une série d'alvéoles dans leur longueur. Ces alvéoles qui contiennent les colis de déchets sont considérées comme homogènes, directement insérées dans la formation argileuse, et présentant les mêmes caractéristiques physiques que cette formation argileuse. Le terme source Q est issu d'une moyenne de la quantité d'agents libérés par une alvéole à un instant donné sur le volume de l'alvéole.

Etant donné que le problème de transport et le problème de Darcy sont découplés, on se donnera directement un champ de vitesse pour l'écoulement plutôt que de résoudre l'équation de Darcy munie de conditions aux limites en charge hydraulique.

Les valeurs des différentes grandeurs physiques intervenant dans le modèle sont rassemblées dans le tableau II.1 et les dimensions du domaine sont précisées dans la figure II.1 ([10]).

	D^* (m ² /an)	α_L (m)	α_T (m)	R
Oxfordien	$5,0 \cdot 10^{-4}$	50	1	1
Callovo-Oxfordien (argile)	$9,48 \cdot 10^{-7}$	0	0	1
Dogger	$5,0 \cdot 10^{-4}$	50	1	1

Tab. II.1 – Coefficients de dispersion et de retard pour l'iode 129 dans les différentes couches géologiques

Le radionucléide considéré est l'iode 129 (I^{129}) dont la période radioactive est de 15,7 millions d'années ($\lambda = \log(2)/15,7 \times 10^6 \text{ an}^{-1}$). Les conditions initiales sont une concentration nulle sur tout le domaine à $t=0$. La manière dont cet isotope est relâché dans le milieu en cas de fuite est donnée en figure II.2. Le terme de source volumique, Q_i , correspond à la fuite de la $i^{\text{ème}}$ alvéole s'écrit alors :

$$Q_i(x, t) = \frac{1}{V_{\text{alvéole}}} 1_i(x) f(t) \quad (II.2)$$

avec x la variable d'espace, t la variable de temps, $V_{\text{alvéole}}$ le volume d'une alvéole, $f(t)$ l'évolution temporelle du relâchement par une alvéole du radionucléide et 1_i la fonction indicatrice de la $i^{\text{ème}}$ alvéole qui vaut 1 dans le domaine de l'alvéole et 0 ailleurs.

Pour la situation, dite du pire cas, où toutes les alvéoles relâchent simultanément le radionucléide, le terme source, Q , s'exprime donc :

$$Q(x, t) = \sum_i Q_i(x, t) \quad (II.3)$$

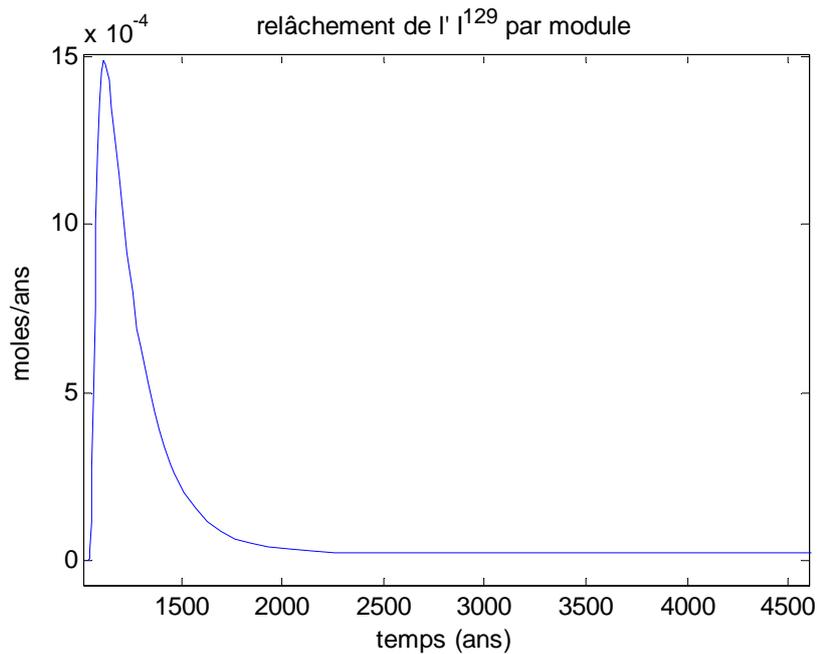


Fig. II.2 – Relâchement de I¹²⁹ par un module

II.2/ Résolution numérique du pire cas

Toutes les simulations effectuées dans cette étude sont faites avec le logiciel Castem ([15]). Ce programme développé par le Commissariat français à l’Energie Atomique (CEA) est un code de calcul pour la résolution des équations aux dérivés partielles par la technique des éléments finis et des volumes finis ([1],[2],[3]). C’est un code de calcul modulaire qui comprend un programme de maillage, un programme de calcul et un programme de visualisation. L’interface est assurée par le langage GIBIANE permet une certaine souplesse d’utilisation. Les calculs présentés dans ce travail ont été effectués au Centre pour le Développement de Calcul Scientifique Parallèle (CDCSP, <https://cdosp.univ-lyon1.fr>), sur un biprocesseur Intel Xeon 3.0 GHz disposant de 3 Go de RAM.

Etant donné la géométrie du problème, on peut construire un maillage structuré composé de mailles rectangulaires et entièrement défini par l’utilisateur (une description précise du maillage est donnée en annexe). Ceci nous assure de pouvoir produire un maillage de qualité dont on contrôle aisément le rapport d’anisotropie (ici, inférieur à 2 sur la quasi-totalité du maillage). La figure II.3 présente le maillage construit pour le problème type, on constate que ce maillage est très dense au niveau des sources ; ceci est inévitable si l’on souhaite saisir tous les détails de la géométrie tout en conservant des mailles élémentaires avec une anisotropie raisonnable. La technique d’homogénéisation, présentée dans la partie suivante, permet justement de contourner cette difficulté en proposant un problème possédant une géométrie plus simple, et donc d’utiliser un maillage plus grossier.

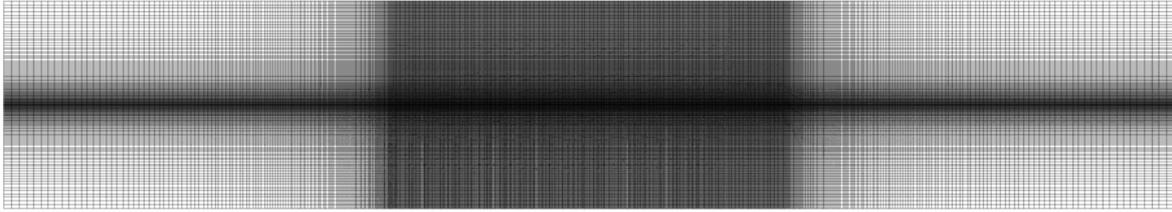


Fig. II.3 – Maillage du problème type

Le logiciel Cast3M permet d'utiliser différentes techniques d'éléments finis pour la résolution de l'équation du transport en milieu poreux. Notre choix s'est porté sur la méthode des éléments finis mixtes hybrides (EFMH), définie par les fonctions bases de l'espace de Raviart Thomas de plus bas degré (ordre 0). Cette technique présente plusieurs intérêts pour notre problème :

- le bilan de masse est conservé localement au niveau de chaque élément ;
- le calcul simultané des champs de concentration et du gradient avec le même ordre de convergence ;
- la continuité des flux à travers les facettes ;
- les tenseurs pleins de diffusion-dispersion sont facilement manipulés.

Cette méthode présente malgré tout aussi quelques inconvénients tels qu'un nombre d'inconnues relativement grand (une inconnue par facette) ou un schéma non monotone.

La méthode des EFMH ([2]) repose sur la formulation mixte du problème qui fait apparaître la concentration et son gradient (le flux) à travers deux équations couplées que l'on résout simultanément en considérant la concentration et le flux comme deux inconnues. Cette approche se distingue d'une approche plus directe où l'on chercherait directement à résoudre l'équation de degré supérieur uniquement en concentration, dans ce cas le flux se calculerait alors dans un deuxième temps comme le gradient de la concentration (ce qui conduit à une perte d'un degré de régularité sur le gradient). La technique des éléments finis mixtes hybrides permet de résoudre le problème issu de la formulation mixte en se ramenant à un système linéaire de taille plus petite. L'idée essentielle de la technique consiste à relâcher la contrainte de continuité de la composante du flux normale aux facettes et à réintroduire cette contrainte par le biais d'un multiplicateur de Lagrange sur chaque facette. On peut montrer que le nouveau problème est alors équivalent au premier et que, par exemple pour le cas bidimensionnel avec des éléments triangulaires, la taille du système linéaire à résoudre est réduite d'environ 40% par rapport au système issu directement de la formulation mixte.

La figure II.4 présente les résultats de la simulation du pire cas avec une vitesse de Darcy uniforme sur tout le domaine : $V_x = 2.10^{-9}$ m/an et $V_y = 3,75.10^{-6}$ m/an .

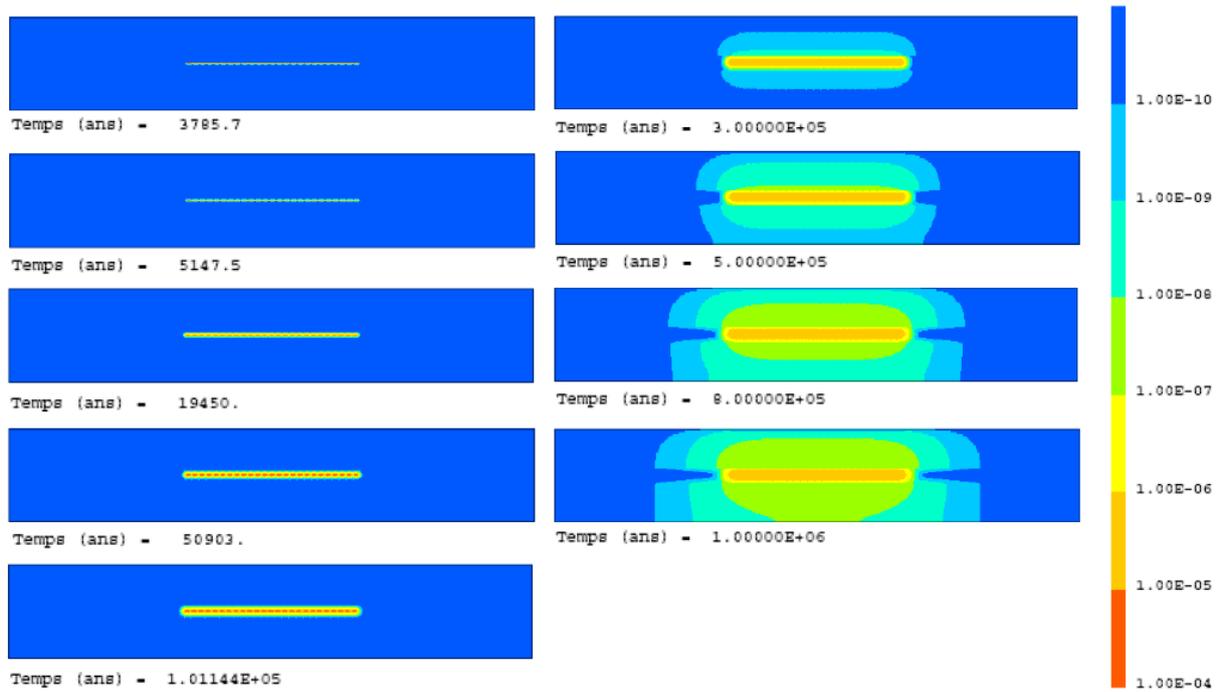


Fig. II.4 – Simulation du pire cas : champ de concentration (mol/m^3) en I^{129} en différents temps

Au temps $T=3785$ ans, les sources ont fini de relâcher le radionucléide qui se maintient à l'emplacement des alvéoles du fait de la très faible perméabilité de la couche d'argile. Jusqu'à $T=101144$ ans, on constate que le radionucléide est toujours confiné dans la couche d'argile, qui remplit donc sa fonction. Au-delà, le radionucléide commence à se propager dans les couches calcaires, on constate l'effet convectif qui favorise l'ascension de l'espèce. A $T=10^6$ ans, la concentration en I^{129} atteint une concentration de l'ordre de 10^{-6} mol/m^3 dans une large partie des couches calcaires au dessus et en dessous de l'installation de stockage, l'essentiel du radionucléide libéré reste malgré tout concentré dans la couche d'argile autour du stockage.

III. Homogénéisation du problème aléatoire : présentation et résultats théoriques.

On vient de voir comment il est possible d'aborder le problème déterministe du pire cas, où tous les conteneurs se mettraient à fuir simultanément. La simulation de ce pire cas fournit des informations essentielles pour l'évaluation des risques en cas de fuites dans l'installation de stockage. On est cependant loin du comportement réaliste de l'installation, or des informations sur un comportement de fuite plus typique sont tout aussi importantes pour la conception de l'installation de stockage.

Afin de s'approcher d'un comportement plus réaliste, il est nécessaire de prendre en compte les incertitudes qui existent dans les caractéristiques du modèle. On se restreint ici aux incertitudes liées au terme source, c'est-à-dire celles qui concernent le contenu des colis et la manière dont il est libéré au cours du temps dans le milieu en cas de fuite. Il s'agit donc d'introduire un aspect aléatoire dans le terme source. Si cette introduction d'aléas dans la modélisation la rend plus proche de la réalité, il faut cependant noter que le comportement ne se caractérise alors plus par une simple simulation du modèle puisque l'évolution de la concentration dans le domaine devient elle aussi aléatoire. Cette caractérisation passe désormais par le calcul des moments de la concentration en tant que variable aléatoire ; on s'intéressera plus particulièrement aux deux premiers moments, c'est-à-dire la moyenne et la covariance.

Un autre aspect du problème réside dans le coût de sa résolution numérique. On a vu que le maillage nécessaire à une bonne simulation comporte un grand nombre d'éléments, ceci à cause de la grande disparité des échelles de taille : d'un côté le domaine considéré qui s'étend sur plusieurs kilomètres, de l'autre les sources qui ont une taille de l'ordre du mètre. Cela entraîne de forts coûts en mémoire et en temps de calcul. S'il est évidemment nécessaire de conserver un maximum de détails quand on souhaite observer le comportement de la solution à proximité de ces détails (champ proche), on peut se demander si cela reste incontournable lorsqu'on s'intéresse à un comportement global sur l'ensemble du domaine (champ lointain). Dans le cadre de l'étude du champ lointain, l'homogénéisation permet précisément de formuler un problème approché où les détails à petite échelle sont lissés. La géométrie devient alors plus simple et la résolution du nouveau problème beaucoup moins coûteuse.

La première section de cette partie présente la méthode d'homogénéisation et comment elle peut être mise en œuvre pour traiter notre problème. La seconde section traite du caractère aléatoire du problème et en décrit les causes physiques ainsi que sa modélisation. Finalement, l'application des techniques d'homogénéisation au problème aléatoire et ses résultats théoriques sont présentés dans la troisième section.

III.1/ Introduction à l'homogénéisation

III.1.a/ Présentation générale de la méthode

L'homogénéisation ([4],[5],[6]) dite périodique est une méthode qui consiste à mettre en évidence dans un problème, où apparaît un petit paramètre caractérisant la période, un comportement "moyen" vers lequel on tend lorsque le petit paramètre tend vers zéro. On peut donc distinguer deux étapes dans le processus d'homogénéisation, d'une part rechercher le problème dit homogénéisé correspondant à ce comportement "moyen", par exemple à l'aide de techniques de développement asymptotique, et d'autre part établir la convergence de la solution du problème initiale vers celle du problème homogénéisé.

On est donc face à un problème, décrit par une équation aux dérivées partielles, de la forme

$$\begin{cases} \text{Trouver } u^\varepsilon \in H \text{ tel que} \\ A^\varepsilon u^\varepsilon = f^\varepsilon \text{ dans } \Omega \end{cases} \quad (III.1)$$

où $\varepsilon > 0$ est un petit paramètre caractérisant la période, εP , du problème, A^ε est un opérateur dont les coefficients sont εP -périodiques et le second membre f^ε est lui aussi εP -périodique. Notons que puisque la période est très petite, cela signifie que A^ε et f^ε ont des variations très rapides. Pour un problème bien posé, u^ε est unique et l'on peut donc écrire formellement

$$u^\varepsilon = (A^\varepsilon)^{-1} f^\varepsilon. \quad (III.2)$$

On cherche ainsi un modèle homogénéisé, plus simple, qui donne une description correcte du phénomène global (comportement macroscopique) tout en négligeant les détails plus fins qui peuvent l'être (comportement microscopique). Pour cela, il faut d'abord s'assurer que u^ε converge (dans un espace adéquat) lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, notons u^0 cette limite. La question est alors de savoir s'il existe un opérateur A^H tel que, pour f^0 la limite de f^ε (au sens des distributions), on ait

$$u^0 = (A^H)^{-1} f^0. \quad (III.3)$$

La difficulté réside ici dans le fait que A^H n'est pas forcément égale à ce que vaudrait A^ε si ε était nul.

Une méthode pour obtenir l'équation homogénéisée utilise les développements asymptotiques à double échelle. L'idée est ici de séparer les comportements microscopique et macroscopique en définissant deux variables d'espace l'une "lente" (échelle macroscopique) : x , et l'autre "rapide" (échelle microscopique) : $y = x/\varepsilon$ (ou de manière plus générale $y = g(x/\varepsilon)$). y mesure les variations à l'intérieur d'une période et x mesure les variations à l'intérieur de toute la région.

On cherche alors un développement asymptotique de u^ε de la forme :

$$u^\varepsilon = u^0(x, y) + \varepsilon u^1(x, y) + \varepsilon^2 u^2(x, y) + \dots, \quad (III.4)$$

où les u^i sont P -périodiques en y . La série du second membre n'est pas nécessairement convergente, le développement asymptotique est à comprendre au sens où, pour tout n , on a :

$$u^\varepsilon = \sum_{i=0}^n \varepsilon^i u^i(x, y) + o(\varepsilon^n). \quad (III.5)$$

L'idée est de considérer les variables lente et rapide comme deux variables indépendantes, ce qui amène à redéfinir l'opérateur de dérivation :

$$\frac{d \cdot}{dx_i} = \frac{\partial \cdot}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \cdot}{\partial y_i}, \quad (III.6)$$

ce qui donne donc en appliquant (III.6) à (III.5) :

$$\frac{du^\varepsilon}{dx_i} = \varepsilon^{-1} \frac{\partial u^0}{\partial y_i} + \left(\frac{\partial u^0}{\partial x_i} + \frac{\partial u^1}{\partial y_i} \right) + \varepsilon \left(\frac{\partial u^1}{\partial x_i} + \frac{\partial u^2}{\partial y_i} \right) + \dots \quad (III.7)$$

Il s'agit ensuite d'injecter le développement asymptotique de u^ε et de ses dérivées dans l'équation d'origine puis d'identifier les termes de même puissance pour obtenir un système d'équations aux dérivées partielles sur les u^i . Typiquement, l'équation d'ordre le plus faible concerne les $\partial u^0 / \partial y_i$ et, dans des cas classiques, on peut montrer avec des arguments de périodicité que $\partial u^0 / \partial y_i = 0$. En ce sens, u^0 décrit le comportement macroscopique de la solution selon la variable lente, les termes suivants apportant des corrections sur cette évolution globale (voir figure III.1). Il faut alors encore travailler avec le système d'équation pour en extraire l'équation homogénéisée caractérisant u^0 .

Une autre approche possible pour obtenir l'équation homogénéisée consiste à travailler sur la formulation variationnelle du problème d'origine. On considère encore le développement asymptotique de u^ε et l'aspect multi échelles du problème, la technique tient alors dans le choix de fonctions test de forme spéciale : les équations locales sont obtenus avec des fonctions test dépendant fortement de la variable rapide (y), tandis que l'équation homogène s'obtient en prenant des fonctions test dépendant uniquement de la variable lente (x).

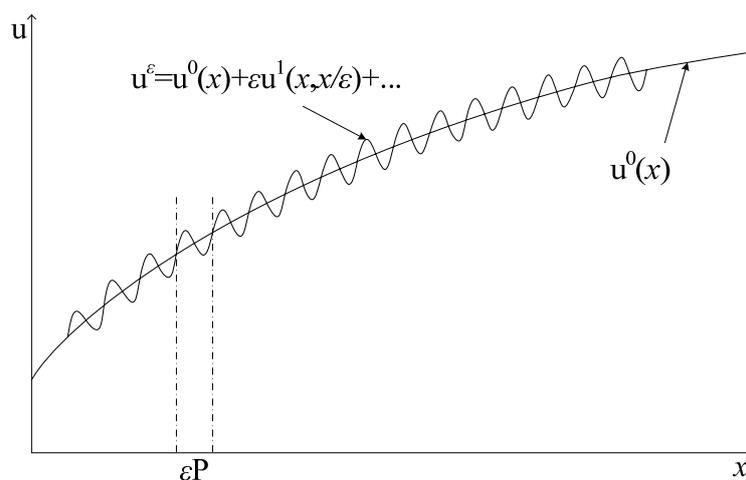


Fig. III.1 – Comportement de u^ε sur plusieurs échelles

Le développement asymptotique à double échelle permet ainsi de suggérer formellement la limite de u^ε et l'équation qu'elle vérifie, cependant ce résultat n'est pas encore démontré à ce stade. Pour le démontrer, une méthode habituelle, dite de l'énergie, utilise, pour le passage à la limite dans les fonctionnelles, la continuité faible et plus particulièrement les techniques de "compacité par compensation" [7] pour le passage à la limite de certains produits. Il arrive en effet que l'on doive étudier la limite d'un produit dont les deux membres ne convergent que faiblement, or dans ce cas, la limite du produit n'est pas a priori le produit des limites. Grâce à des renseignements supplémentaires sur les bornes de certaines combinaisons de dérivées, la compacité par compensation permet néanmoins le passage à la limite dans certains de ces produits.

La méthode d'homogénéisation permet de cette manière de proposer un problème macroscopique simple "équivalent" à un problème initial comportant de fortes hétérogénéités au niveau microscopique. La force de cette méthode réside dans l'idée de considérer le petit paramètre ε , qui en pratique est fixé, comme variable et de déterminer alors le comportement limite du problème pour un ε infiniment petit. Néanmoins le paramètre ε reste non nul dans les faits et la solution homogénéisée n'est qu'une approximation de la solution réelle. C'est pourquoi le résultat de convergence peut être complété par une estimation de la vitesse de convergence. Cette information supplémentaire apporte en effet une borne sur l'erreur commise lorsque l'on assimile la solution homogénéisée à la solution exacte ; sans cette information, il n'est pas possible d'affirmer a priori la validité de l'approximation faite. Si dans certains domaines, comme pour les matériaux composites où l'homogénéisation présente un grand intérêt, une vérification expérimentale de la loi de comportement globale est parfois possible, ce n'est pas toujours le cas et spécialement dans notre problématique sur le confinement de déchets en milieu géologique. Nous verrons par la suite que ce type d'estimation a pu être établi pour notre problème.

II.1.b/ Mise en œuvre de la méthode : paramétrage du problème de stockage

Pour revenir à notre problème de stockage ([8],[9]), la périodicité se situe dans la disposition très régulière des sources. Notons déjà que cette périodicité n'est pas présente dans toutes les directions de l'espace mais seulement dans les directions horizontales ; de plus la zone où se trouve l'hétérogénéité n'a qu'une faible extension verticale. Ceci n'empêche pas de mettre en œuvre la méthode de l'homogénéisation mais nécessite d'adapter la technique à cette anisotropie. Pour passer du problème type décrit dans la partie II à un problème paramétré par ε , nous allons considérer que le nombre de source, qui est de 25 dans le problème type, est un nombre variable n et le paramètre ε que l'on considère sera alors $\varepsilon = 1/n$. L'idée est de fixer les dimensions hors de l'installation de stockage et d'ajouter de plus en plus de sources. Cela implique que la taille d'une source varie avec ε : pour une longueur fixée L de l'installation, la période est donc εL et les n sources ont une longueur que l'on peut noter $\varepsilon L \times s_1$ avec $0 < s_1 < 1$. Pour plus de généralité, on considérera que le rapport entre la longueur et la hauteur d'une source peut lui aussi dépendre de ε et l'on écrira donc la hauteur d'une source sous la forme $\varepsilon L \times \varepsilon^{\gamma-1} s_2$, avec $\gamma > 0$.

Remarquons que si l'on fixe la quantité de matière relâchée par une source indépendamment de ε alors la solution diverge quand ε tend vers zéro puisque la quantité de matière introduite tend vers l'infini. Pour le cas déterministe, si l'on considère $Q_\varepsilon(t)$ la quantité de matière présente dans le milieu à un instant donnée et $f_\varepsilon(t)$ la variation de la densité de matière relâchée par une source, on a la relation :

$$\begin{aligned}
\frac{dQ_\varepsilon}{dt} &= (\text{nombre de sources}) \times [(\text{volume d'une source}) \times f_\varepsilon] \\
&= n \times (\varepsilon L s_1 \times \varepsilon^\gamma L s_2) \times f_\varepsilon \\
&= n \varepsilon \times L^2 s_1 s_2 \times \varepsilon^\gamma f_\varepsilon \\
&= L^2 s_1 s_2 \times \varepsilon^\gamma f_\varepsilon .
\end{aligned} \tag{III.8}$$

Or le plus naturel pour définir notre famille de problèmes indicée par ε est que la quantité de matière injectée dans le milieu au cours du temps soit indépendante de ε . Cela nous donne donc que $\varepsilon^\gamma f_\varepsilon$ doit être indépendant de ε . Or $f_\varepsilon(t)$ est aussi proportionnel à $f(t)$, la quantité de matière relâchée par une alvéole, au final, pour pouvoir rester cohérent avec le problème type de la partie II, on obtient f_ε de la forme :

$$f_\varepsilon(t) = \frac{1}{\varepsilon^\gamma} \times \frac{f(t)}{V_{\text{alvéole}}} . \tag{III.9}$$

Si l'on revient au formalisme de l'équation (III.2) du début de cette section, la solution du problème déterministe selon ε est donnée par

$$u^\varepsilon = (A^\varepsilon)^{-1} f^\varepsilon , \tag{III.2}$$

où l'on vient de spécifier un f_ε à partir duquel on peut définir f^ε . La dépendance effective de l'opérateur A^ε à ε dépend de la manière dont sont modélisées les sources. En effet, si les caractéristiques physiques de l'emplacement de la source sont différentes de celles du milieu, ou encore si, au lieu d'un terme de source volumique, le relâchement est modéliser comme un flux à travers les parois de la source, les emplacements des sources devenant des trous dans le domaine Ω , alors l'opérateur A^ε dépend effectivement de ε et il y a lieu de chercher un opérateur homogénéisé A^H . Ces modélisations ont été étudiées dans la situation déterministe du pire cas [8], cependant on cherche désormais à prendre en compte l'aspect aléatoire des sources. Ainsi, pour simplifier l'étude théorique de la solution aléatoire $u^\varepsilon(\omega)$, on considère que les sources présentent les mêmes caractéristiques physiques que le milieu environnant (cf la définition du problème type). C'est-à-dire qu'on ne travaille plus sur le cas général

$$u^\varepsilon(\omega) = (A^\varepsilon)^{-1} f^\varepsilon(\omega) , \tag{III.10}$$

mais sur un cas simplifié, avec un opérateur constant A :

$$u^\varepsilon(\omega) = A^{-1} f^\varepsilon(\omega) . \tag{III.11}$$

Le but étant cette fois de trouver une solution limite u^0 déterministe et qui corresponde à une source limite, elle aussi déterministe f^0 , via la relation :

$$u^0 = A^{-1} f^0 . \tag{III.12}$$

A proprement parler, il ne s'agit donc plus exactement d'homogénéisation puisqu'il n'y a plus d'équation homogénéisée à chercher, malgré cela nous continuerons à employer ce terme car c'est bien dans cette optique que nous travaillons, cette étude servant de base pour traiter l'introduction d'éléments aléatoires dans le modèle à homogénéiser.

III.2/ Introduction d'un terme source aléatoire

L'installation de stockage est prévue pour recevoir des déchets qui proviennent pour une grande part de combustibles nucléaires usagés et tous les déchets qu'elle est destinée à accueillir ne sont pas encore produits à l'heure actuelle. Or les techniques employées dans les centrales nucléaires et les combustibles utilisés sont en constante évolution, il n'est donc pas possible de prévoir de manière exacte la composition des déchets que le stockage contiendra une fois rempli. Cela signifie que le contenu des différents colis de déchets présente des variations dans la nature des composants et dans leurs concentrations.

Un autre facteur d'incertitude réside dans le relâchement des radionucléides par une alvéole. En effet, l'architecture d'un colis ou d'une alvéole est complexe et le relâchement résulte de plusieurs phénomènes tels que l'usure des joints, la corrosion des métaux ou la fissuration des bétons, tous ces éléments étant de nature probabiliste. Par exemple, la figure II.2 montre l'évolution temporelle du relâchement qui sert de référence pour le cas déterministe, cette évolution a été construite comme le comportement typique du relâchement et intègre les différents facteurs mentionnés. D'un point de vue général, on peut distinguer deux aspects essentiels qui présentent une variabilité : le moment de déclenchement du relâchement et la manière dont il s'effectue dans le temps.

Comme dans le cadre déterministe, on supposera que chaque source est homogène, bien qu'ayant désormais chacune un comportement propre. C'est-à-dire que pour une réalisation donnée, le comportement d'une source est entièrement déterminé par l'évolution du relâchement dans le temps.

III.2.a/ Définition d'un cadre probabiliste général

Afin de pouvoir traiter de manière rigoureuse le problème aléatoire, on formalise la variabilité du terme source de la manière suivante.

A partir d'un espace de probabilité standard $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{P})$, on définit les systèmes dynamiques ergodiques discrets $(T_z)_{z \in I}$ avec $I \subset \mathbb{Z}$. Par définition, chaque système dynamique ergodique sur Ω est une application $T_z : \Omega \rightarrow \Omega$ telle que :

- T_z préserve la mesure \mathbf{P} pour tout z , c'est-à-dire que, pour tout $A \in \mathcal{F}$, on a $\mathbf{P}(T_z^{-1}A) = \mathbf{P}(A)$;
- T_z est ergodique, c'est-à-dire que pour tout $A \in \mathcal{F}$ invariant par T_z , on a $\mathbf{P}(A)(1 - \mathbf{P}(A)) = 0$.

On suppose de plus que $(T_z)_z$ a la propriété de groupe : pour tout z_1 et z_2 , $T_{z_1+z_2} = T_{z_1} \circ T_{z_2}$, et $T_0 = Id$. Cette propriété traduit l'indépendance de $(T_z)_z$ par rapport à l'origine.

On définit le terme source aléatoire correspondant à la source i par :

$$Q_i(\omega, x, t) = 1_i(x) f(T_{i,1_i(x)}\omega, t) \quad (III.13)$$

où 1_i est l'indicatrice de la source i et $f(\omega, t)$ une variable aléatoire que l'on suppose uniformément bornée, c'est-à-dire qu'il existe $\Lambda > 0$ et $C > 0$ tels que pour tout ω et pour tout t :

$$|f(\omega, t)| \leq Ce^{-\Lambda t}, \quad (III.14)$$

le terme source totale s'écrit alors :

$$Q(\omega, x, t) = \sum_i Q_i(\omega, x, t). \quad (III.15)$$

On définit enfin la fonction de covariance de $\tilde{f}(\omega, x, t) = f(T_{x/\varepsilon}\omega, t)$ par

$$R(t, s, x, y) = E\left[\left(\tilde{f}(\cdot, x, t) - E\tilde{f}(\cdot, x, t)\right)\left(\tilde{f}(\cdot, y, s) - E\tilde{f}(\cdot, y, s)\right)\right], \quad (III.16)$$

sur laquelle on formule l'hypothèse suivante qui traduit l'absence de corrélation au-delà d'une certaine échelle :

R0 $R(t, s, x, y) \leq e^{-\Lambda \min(t, s)} \bar{R}(x - y), \quad \bar{R}(y) \geq 0$ pour tout y ,
et il existe R_0 tel que $\bar{R}(y) = 0$ si $|y| > R_0$.

L'hypothèse que $f(\omega, t)$ soit uniformément bornée n'est pas très contraignante sur le plan de la modélisation physique puisque la quantité totale de matière à relâcher par une alvéole est finie et que de plus les comportements exponentiellement décroissants sur les temps longs sont fréquents dans les phénomènes d'usures. De même, l'hypothèse **R0**, qui traduit l'absence de corrélations au-delà d'une certaine distance, est raisonnable si l'on considère la décroissance rapide de la concentration de radionucléide autour de leur lieu d'émission et si l'on suppose le milieu géologique stable dans le temps.

III.2.b/ Définition d'un cas particulier

On peut considérer un cas particulier de cette formulation générale dans lequel les sources sont indépendantes entre elles et où le terme $f(\omega, t)$ prend la forme :

$$f(\omega, t) = \alpha(\omega)f(t - \tau(\omega)), \quad (III.17)$$

c'est-à-dire que le comportement générique du relâchement est toujours le même et que l'aléa porte sur l'amplitude et le moment de déclenchement du relâchement. Etant donné que le temps nécessaire au relâchement total des radionucléides par une alvéole est de l'ordre 10^3 années (cf figure II.2), soit un temps très petit devant les temps considérés (jusqu'à 10^6 années), l'allure du relâchement sur ce laps de temps a très peu d'influence sur la migration des radionucléides à grande échelle. Considérer que le relâchement suit un comportement générique, invariant à une dilatation et une translation près, n'est donc pas une restriction très forte. Dans ce contexte, la variable aléatoire $\alpha(\omega)$ traduit l'incertitude sur la concentration initiale en radionucléide contenu dans une alvéole, et la variable aléatoire $\tau(\omega)$ correspond au temps de déclenchement de la fuite. On supposera de plus que $\alpha(\omega)$ et $\tau(\omega)$ sont indépendantes.

Afin de respecter l'hypothèse (III.14), on considérera que $\alpha(\omega)$ est borné. On verra de plus dans la partie suivante que seules l'espérance et la variance de $\alpha(\omega)$, qui sont donc bien définies, interviennent dans les calculs. Supposer $\alpha(\omega)$ borné n'est absolument pas une limitation étant donné qu'une alvéole est une enceinte finie qui ne peut contenir qu'une quantité finie de radionucléide. On se donnera par contre la densité de probabilité de la loi de $\tau(\omega)$, f_τ . Etant donné que $\tau(\omega)$ est un temps de déclenchement, il est à valeur positive, de

plus il doit aussi être borné pour respecter l'hypothèse (III.14). Le support de f_τ est donc borné et inclus dans \mathbb{R}_+ .

Une loi classique pour modéliser la durée de vie d'un objet est la loi de Weibull dont la densité s'écrit

$$f_w(s) = \frac{\beta}{k} \left(\frac{s}{k}\right)^{\beta-1} \exp\left[-\left(\frac{s}{k}\right)^\beta\right], s \geq 0, \quad (III.18)$$

où $\beta > 0$ est le paramètre de forme et $k > 0$ est le paramètre d'échelle. Pour $\beta < 1$, le taux de panne est décroissant dans le temps (phénomène de "mortalité infantile"); pour $\beta = 1$ le taux de panne est constant, ce qui suggère une cause totalement aléatoire; pour $\beta > 1$ le taux de panne est croissant, ce qui correspond à un phénomène d'usure. Pour notre problème, on sera contraint de fixer les paramètres β et k de manière arbitraire pour pouvoir effectuer les calculs numériques; en effet, on ne dispose actuellement pas d'études statistiques permettant d'estimer ces paramètres. Le paramètre de forme a été fixé à $\beta = 1,2$ pour modéliser une usure modérée, et le paramètre d'échelle a été pris de sorte que l'espérance de la durée de vie soit de $5 \cdot 10^5$, c'est à dire $k = 8,27 \cdot 10^{-4}$. Notons enfin que le support de la densité de la loi de Weibull n'est pas borné à droite, afin de respecter effectivement l'hypothèse (III.2) on peut considérer une densité de même forme mais qui soit identiquement nulle après un temps donné. On prendra par exemple

$$f_\tau = \frac{1}{1-\delta} \mathbb{1}_{[0, T(\delta)]} f_w \quad (III.19)$$

avec $T(\delta)$ définit par la relation

$$\int_{T(\delta)}^{+\infty} f_w = \delta. \quad (III.20)$$

Pour nos calculs, on prendra $\delta = 10^{-3}$.

On fixera aussi les paramètres sur $\alpha(\omega)$ de manière arbitraire à $E[\alpha] = 1$ et $\text{Var}[\alpha] = 0,1$. C'est-à-dire que l'on considère que la courbe de relâchement de la figure II.2 est un comportement moyen et que l'incertitude sur le contenu de l'alvéole est faible.

Remarquons que la modélisation de l'aléa proposée par ce cas particulier est relativement approximative, cependant l'objectif visé en définissant ce cas n'est pas pour l'instant de fournir des résultats quantitatifs précis mais de valider une démarche et de fournir des indications qualitatives exploitables.

III.3/ Homogénéisation du problème aléatoire

Les résultats mentionnés dans cette section sont issus d'un article de A. Bourgeat et A.L. Piatnitski en cours de rédaction [9].

Considérons un domaine régulier $G \subset \mathbb{R}^2$ tel que $G^+ = \{(x_1, x_2) \in G : x_2 > 0\}$ et $G^- = \{(x_1, x_2) \in G : x_2 < 0\}$ soient des domaines de Lipschitz non vides. On décrit la géométrie du support des sources dans ce domaine de la manière suivante. On note ε un petit paramètre positif qui mesure la taille caractéristique du support d'une source ; en variable locale, le support K_ε d'une source est un ensemble parallélépipédique

$$K_\varepsilon = [0, s_1] \times [-\varepsilon^{\gamma-1} s_2, \varepsilon^{\gamma-1} s_2] \quad (III.21)$$

avec $0 < s_{1,2} < 1$ et $\gamma > 0$. Le support complet des sources B_ε est alors défini en répétant périodiquement le support d'une seule source :

$$B_\varepsilon = \bigcup_{i \in \mathbb{Z}} \varepsilon(K_\varepsilon + (i, 0)). \quad (III.22)$$

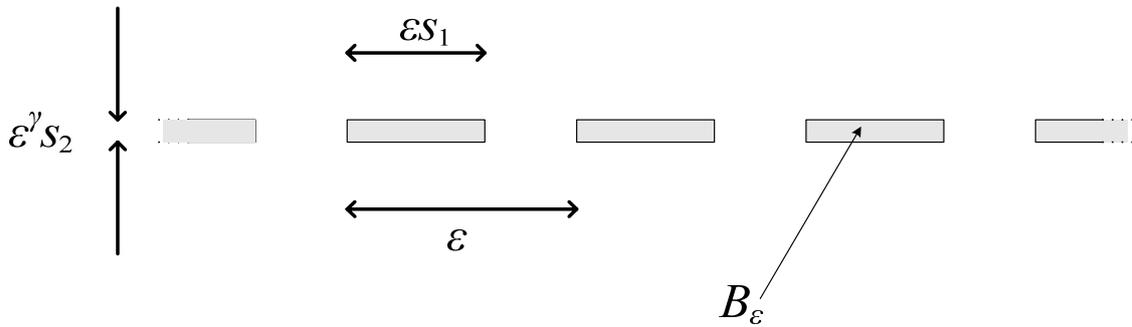


Fig. III. 2 – Disposition des sources (B_ε)

On considère maintenant le problème avec second membre aléatoire suivant :

$$\partial_t u^\varepsilon - \operatorname{div}(a(x) \nabla u^\varepsilon) + \operatorname{div}(b(x) u^\varepsilon) = f^\varepsilon, \text{ dans } G \times (0, \infty); \quad (III.23)$$

$$u^\varepsilon|_{t=0} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial n_a} u^\varepsilon - b(x) \cdot n(x) u^\varepsilon + \lambda u^\varepsilon = 0 \text{ sur } \partial G \times (0, \infty), \quad (III.24)$$

où $a(x)$, le tenseur de dispersion, est une matrice régulière uniformément définie positive ; $b(x)$, la vitesse de Darcy, est un champ vectoriel régulier ; et n_a et n sont respectivement les vecteurs co-normal et normal sortants. Le terme source aléatoire s'exprime

$$f^\varepsilon(\omega, x, t) = 1_{B_\varepsilon} \frac{1}{\varepsilon^\gamma} f(T_{x'/\varepsilon} \omega, t) \quad (III.25)$$

avec $x' = \varepsilon[x_1 / \varepsilon]$, $[\cdot]$ désignant la partie entière ; $(T_z)_z$ systèmes dynamiques ergodiques discrets définis comme précédemment ; et $f(\omega, t)$ vérifiant (III.2).

Un résultat classique énonce que pour chaque $\varepsilon > 0$ et chaque $\omega \in \Omega$ le problème (III.23)- (III.24) admet une unique solution $u^\varepsilon \in L^2(0, T; H^1(G)) \cap C(0, T; L^2(G))$.

Notons par $F(t)$ la moyenne $F(t) = s_1 E[f(\cdot, t)]$ et $\delta_\Sigma(x)$ la mesure de Lebesgue de support $\Sigma = \{(x_1, x_2) \in G : x_2 = 0\}$. On peut montrer (théorème III.1) que le problème homogène moyen prend la forme

$$\partial_t u^0 - \operatorname{div}(a(x)\nabla u^0) + \operatorname{div}(b(x)u^0) = F(t)\delta_\Sigma(x), \text{ dans } G \times (0, \infty); \quad (\text{III.26})$$

$$u^0|_{t=0} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial n_a} u^0 - b(x) \cdot n(x)u^0 + \lambda u^0 = 0 \text{ sur } \partial G \times (0, \infty). \quad (\text{III.27})$$

au sens où u^ε converge vers u^0 en norme $L^2(0, T; H^1(G))$.



Fig. III. 3 – Géométrie du problème homogénéisé

Théorème III.1 Sous les hypothèses précédentes, on a

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|u^\varepsilon - u^0\|_{L^2(0, \infty; H^1(G))} = 0 \text{ presque sûrement.}$$

où u^ε est la solution du problème original (III.23)-(III.24) et u^0 est la solution du problème homogénéisé (III.26)-(III.27).

Si ce théorème apporte une information qualitative intéressante, il ne permet cependant pas de se rendre compte de la manière dont se fait la convergence et l'on ignore donc l'erreur qui est commise lorsqu'on assimile u^ε à u^0 , ou, dit autrement, à partir de quelle valeur de ε il devient acceptable de calculer u^ε à la place u^0 . Ce résultat peut ainsi être complété par une estimation de la vitesse de convergence. Comme u^ε est une grandeur aléatoire, c'est en fait l'espérance de la distance entre u^ε et u^0 que l'on estime. On peut alors montrer le résultat suivant :

Théorème III.2 Sous les hypothèses du théorème III.1 et en supposant que **R0** est vérifiée, on a

$$E \|u^\varepsilon - u^0\|_{L^2(0, \infty; H^1(G))}^2 \leq C(R_0, G) (\varepsilon^2 + \varepsilon^{2\gamma}).$$

où u^ε est la solution du problème original (III.23)-(III.24) ; u^0 est la solution du problème homogénéisé (III.26)-(III.27) ; et $C(R_0, G)$ une constante dépendant de R_0 et du domaine G .

IV. Validation numérique : développement du problème aléatoire sur un cas particulier.

On dispose donc de résultats théoriques sur l'homogénéisation du problème aléatoire et en particulier d'une majoration de la distance entre la solution du problème détaillé et celle du problème homogène. On cherche désormais à obtenir des résultats numériques, qui nous permettent d'apprécier la qualité de l'application de la majoration proposée par le théorème III.2. De plus la solution homogénéisée décrit le comportement moyen, au sens probabiliste, de la solution aléatoire, pourtant des informations sur les moments d'ordre supérieur comme la variance sont aussi intéressantes. On se propose donc ici d'étudier le problème aléatoire dans le cas particulier exposé en partie III.

La première section rappelle et précise les problèmes détaillé et homogène qui seront utilisés dans les calculs numériques suivants. La seconde section développe comment on peut dans ce cadre calculer les moyenne et variance du problème détaillé. La troisième section s'appuie sur ces résultats et expose une manière de vérifier numériquement le théorème III.2. Enfin, on revient sur la problématique du coût dans la quatrième section où l'on illustre le gain apporté par la méthode d'homogénéisation.

IV.1/ Définitions des problèmes détaillé et homogène

Les théorèmes de la partie III sont établis dans un cadre assez général. Pour pouvoir effectuer des simulations numériques, nous allons donc fixer une géométrie précise et rappeler les équations des modèles.

La géométrie retenue est tirée du problème type défini en partie II, la géométrie globale et les propriétés physiques du domaine sont conservées. Le nombre de sources est maintenant variable, on considère que les dimensions d'une source sont proportionnelles à celles décrites dans le problème type. C'est-à-dire que dans le formalisme des théorèmes III.1 et III.2, le paramètre γ (cf. figure III.2) est fixé à $\gamma = 1$. On note N le nombre de sources et donc $\varepsilon = 1/N$ est le paramètre du problème détaillé (cf. figure III.2). Le domaine Σ de la source homogénéisée (cf. figure III.3) est alors restreint à un segment coupant les sources en leur milieu de la longueur de l'installation. Ces données sont résumées dans la figure IV.1 qui spécifie sur un même schéma la géométrie des problèmes détaillé et homogène.

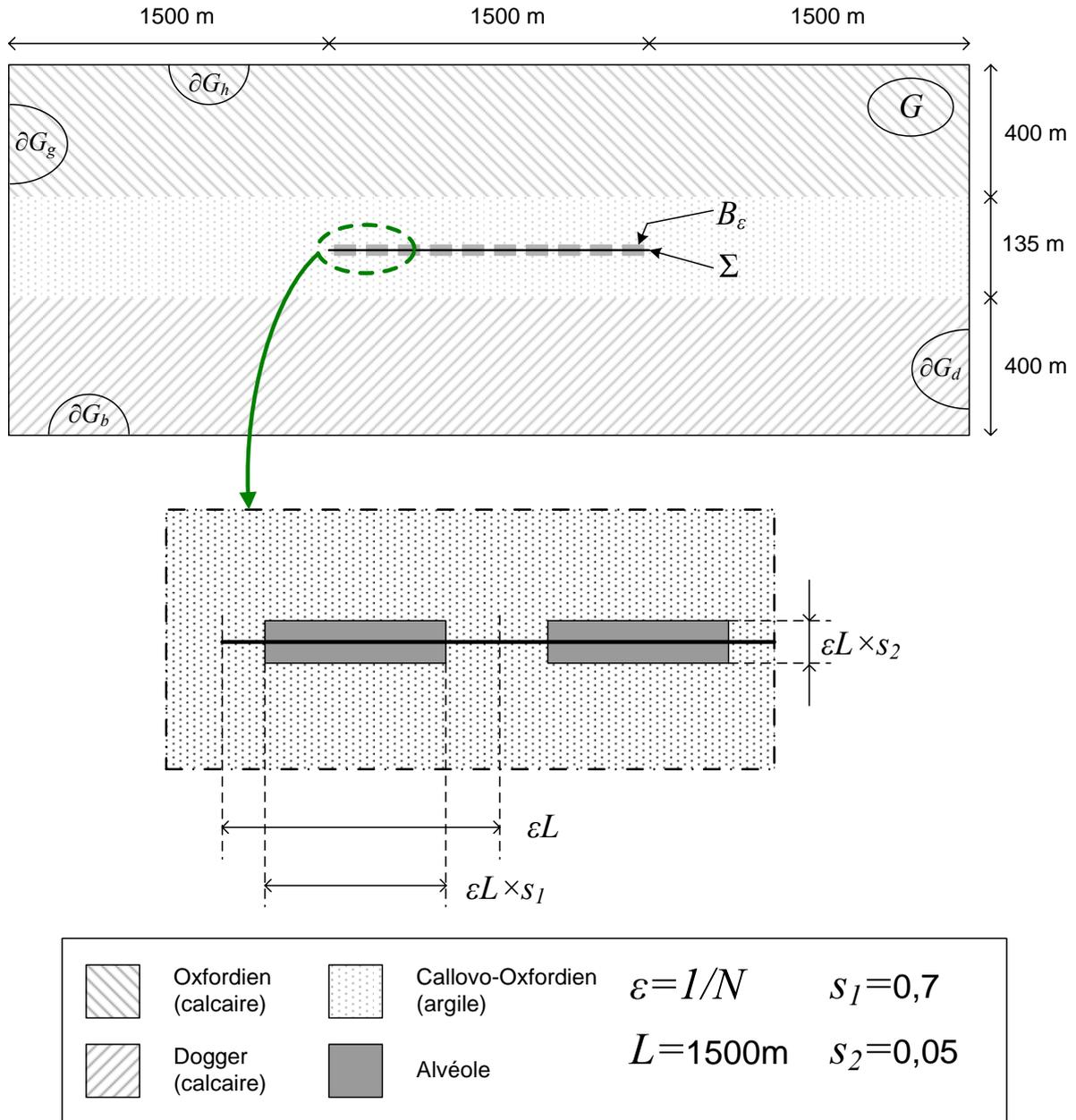


Fig. IV.1 – Géométrie des problèmes détaillé et homogène

Le comportement des sources du problème détaillé est celui du cas particulier présenté dans la section III.2.b (équations (III.17) et (III.19)). On note donc, pour $i = 1$ à N , $\alpha_i(\omega)$ et $\tau_i(\omega)$ des variables aléatoires indépendantes deux à deux et telles que

- les $\alpha_i(\omega)$ sont bornés, de même loi telle que $E[\alpha_i(\cdot)] = 1$ et $\text{Var}[\alpha_i(\cdot)] = 0,1$;
- les $\tau_i(\omega)$ sont de même loi de densité f_τ donnée par (III.19).

Le comportement aléatoire de la source i est alors donné par

$$\begin{aligned}
 Q_i^\varepsilon(\omega, x, t) &= \frac{1}{\varepsilon} \alpha_i(\omega) \frac{1}{V_{\text{alvéole}}} f(t - \tau_i(\omega)) 1_i(x) \\
 &= \alpha_i(\omega) \bar{Q}_i^\varepsilon(x, t - \tau_i(\omega)),
 \end{aligned}
 \tag{IV.1}$$

en respect avec le problème type de la partie II et l'équation (II.2). Le terme source global du problème détaillé s'écrit donc

$$Q^\varepsilon(\omega, x, t) = \sum_{i=1}^N Q_i^\varepsilon(\omega, t). \quad (IV.2)$$

L'équation du problème détaillé (III.7)-(III.8) étant alors, avec \vec{n} le vecteur normal unitaire sortant du domaine G :

$$(P^\varepsilon) \begin{cases} R \frac{\partial u^\varepsilon(\omega, ;, ;)}{\partial t} - \operatorname{div}(\overline{D} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(u^\varepsilon(\omega, ;, ;)) - \vec{V} \cdot u^\varepsilon(\omega, ;, ;)) + R\lambda u^\varepsilon(\omega, ;, ;) = Q^\varepsilon(\omega, ;, ;) \\ \hspace{15em} \text{dans } G \times [0; T], \\ u^\varepsilon(\omega, ;, ;) = 0 \quad \text{sur } \partial G_h \times [0; T], \\ \vec{n}(\overline{D} u^\varepsilon(\omega, ;, ;) - \vec{V} u^\varepsilon(\omega, ;, ;)) = 0 \quad \text{sur } (\partial G_b \cup \partial G_d \cup \partial G_g) \times [0; T]. \end{cases}$$

Le terme source du problème homogénéisé (III.10)-(III.11) s'écrit quand à lui :

$$\begin{aligned} Q^0(x, t) &= s_1 E [Q_i^\varepsilon(\cdot, t)] \delta_\Sigma(x) \\ &= \tilde{Q}^0(t) \delta_\Sigma(x). \end{aligned} \quad (IV.3)$$

L'utilisation directe de la mesure de Lebesgue n'est pas possible dans le code de calcul pour la simulation. Cependant, en passant par la formulation variationnelle du problème, ce terme source prend la même forme qu'une condition aux limites sur le flux. On écrira donc le problème homogénéisé (III.10)-(III.11) sous la forme :

$$(P^0) \begin{cases} R \frac{\partial u^0}{\partial t} - \operatorname{div}(\overline{D} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(u^0) - \vec{V} \cdot u^0) + R\lambda u^0 = 0 \quad \text{dans } G \times [0; T], \\ \vec{n}(\overline{D} u^0 - \vec{V} u^0) = \tilde{Q}^0(t) \quad \text{sur } \Sigma \times [0; T], \\ u^0 = 0 \quad \text{sur } \partial G_h \times [0; T], \\ \vec{n}(\overline{D} u^0 - \vec{V} u^0) = 0 \quad \text{sur } (\partial G_b \cup \partial G_d \cup \partial G_g) \times [0; T]. \end{cases}$$

On définit ainsi les problèmes détaillé, (P^ε) , et homogène, (P^0) , qui seront étudiés dans la suite de cette partie.

IV.2/ Calcul des premiers moments de $u^\varepsilon(\omega)$

On considère ici le problème (P^ε) dont, du fait de la linéarité de ce problème, on peut écrire la solution $u^\varepsilon(\omega)$ de la manière suivante :

$$u^\varepsilon(\omega, x, t) = \sum_{i=1}^N \alpha_i(\omega) c_i(t - \tau_i(\omega), x) \quad \text{pour tout } (x, t) \in G \times [0; T], \quad (IV.4)$$

où les $(c_i)_{i=1..N}$ sont les solutions de N problèmes déterministes (P_i^ε) définis par :

$$(P_i^\varepsilon) \begin{cases} R \frac{\partial c_i}{\partial t} - \operatorname{div}(\overline{\overline{D}} \cdot \operatorname{grad}(c_i) - \vec{V} \cdot c_i) + R \lambda c_i = \overline{Q}_i^\varepsilon & \text{dans } G \times [0; T], \\ c_i = 0 & \text{sur } \partial G_h \times [0; T], \\ \vec{n}(\overline{\overline{D}} c_i - \vec{V} c_i) = 0 & \text{sur } (\partial G_b \cup \partial G_d \cup \partial G_g) \times [0; T]. \end{cases}$$

Comme l'on suppose qu'il y a indépendance entre les différentes variables aléatoires $\alpha_i(\omega)$ et $\tau_i(\omega)$, on peut alors calculer simplement l'espérance et la variance de $u^\varepsilon(\omega)$:

$$E[u^\varepsilon(\cdot, x, t)] = \sum_{i=1}^N E[\alpha_i] E[c_i(t - \tau_i, x)], \quad (IV.5)$$

avec, la densité de probabilité f_τ de τ_i étant donnée,

$$\begin{aligned} E[c_i(t - \tau_i, x)] &= \int c_i(t - s, x) f_\tau(s) ds \\ &= \int c_i(s, x) f_\tau(t - s) ds. \end{aligned} \quad (IV.6)$$

Et pour la variance :

$$\begin{aligned} \operatorname{Var}[u^\varepsilon(\cdot, t, x)] &= \sum_{i=1}^N \operatorname{Var}[\alpha_i c_i(t - \tau_i, x)] \\ &= \sum_{i=1}^N E[\alpha_i^2 c_i(t - \tau_i, x)^2] - \sum_{i=1}^N E[\alpha_i c_i(t - \tau_i, x)]^2 \\ &= \sum_{i=1}^N E[\alpha_i^2] E[c_i(t - \tau_i, x)^2] - \sum_{i=1}^N E[\alpha_i]^2 E[c_i(t - \tau_i, x)]^2, \end{aligned} \quad (IV.7)$$

avec en plus

$$\begin{aligned} E[c_i(t - \tau_i, x)^2] &= \int c_i(t - s, x)^2 f_\tau(s) ds \\ &= \int c_i(s, x)^2 f_\tau(t - s) ds. \end{aligned} \quad (IV.8)$$

On constate donc que l'on peut calculer l'espérance et la variance de la solution aléatoire, $u^\varepsilon(\omega, x, t)$, de (P^ε) à partir des solutions déterministes de N problèmes similaires (P_i^ε) en calculant leur convolution en temps avec une fonction donnée.

IV.2.a/ Calcul du moment d'ordre 2

On peut procéder de même pour calculer la corrélation entre $u^\varepsilon(\omega, x_1, t_1)$ et $u^\varepsilon(\omega, x_2, t_2)$ toujours sur la base de l'indépendance des variables aléatoires $\alpha_i(\omega)$ et $\tau_i(\omega)$. On rappelle en effet que la corrélation $C(X, Y)$ entre deux variables aléatoires X et Y est donnée par $C(X, Y) = E[XY]$, or on peut calculer :

$$\begin{aligned}
E[u^\varepsilon(\omega, x_1, t_1)u^\varepsilon(\omega, x_2, t_2)] &= E\left[\left(\sum_{i=1}^N \alpha_i c_i(t_1 - \tau_i, x_1)\right)\left(\sum_{j=1}^N \alpha_j c_j(t_2 - \tau_j, x_2)\right)\right] \\
&= E\left[\left(\sum_{i=1}^N \alpha_i^2 c_i(t_1 - \tau_i, x_1)c_i(t_2 - \tau_i, x_2)\right) + \left(\sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \alpha_i \alpha_j c_i(t_1 - \tau_i, x_1)c_j(t_2 - \tau_j, x_2)\right)\right] \\
&= \sum_{i=1}^N E[\alpha_i^2]E[c_i(t_1 - \tau_i, x_1)c_i(t_2 - \tau_i, x_2)] + \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} E[\alpha_i]E[\alpha_j]E[c_i(t_1 - \tau_i, x_1)]E[c_j(t_2 - \tau_j, x_2)].
\end{aligned}$$

les termes $E[c_i(t_1 - \tau_i, x_1)]$ et $E[c_j(t_2 - \tau_j, x_2)]$ ont déjà été explicités par (IV.6), il ne reste que le terme $E[c_i(t_1 - \tau_i, x_1)c_i(t_2 - \tau_i, x_2)]$ qui se calcule de la même manière à partir de la densité de probabilité des τ_i, f_τ :

$$E[c_i(t_1 - \tau_i, x_1)c_i(t_2 - \tau_i, x_2)] = \int c_i(t_1 - s, x_1)c_i(t_2 - s, x_2)f_{\tau_i}(s)ds. \quad (IV.9)$$

Rappelons qu'à partir de la corrélation $C(X, Y)$, on calcule directement la covariance $Cov(X, Y)$ et le coefficient de corrélation $\rho(X, Y)$ de deux variables aléatoires X et Y qui sont définis par :

$$Cov(X, Y) = C(X, Y) - E[X]E[Y] \quad (IV.10)$$

et

$$\rho(X, Y) = \frac{Cov(X, Y)}{\sqrt{Var[X]Var[Y]}}, \quad (IV.11)$$

avec bien sûr

$$Var(X) = Cov(X, X). \quad (IV.12)$$

Le coefficient de corrélation ρ varie entre -1 et 1 et s'interprète ainsi : $\rho(X, Y) = 0$ lorsque X et Y sont décorrélés ; $|\rho(X, Y)| = 1$ lorsque X et Y sont liés par une relation linéaire ; $\rho(X, Y) < 0$ lorsque X et Y ont tendance à varier en sens inverse ; $\rho(X, Y) > 0$ lorsque X et Y ont tendance à varier dans le même sens.

On peut donc calculer, à partir des grandeurs calculées précédemment, la covariance de $u^\varepsilon(\omega)$ entre (t_1, x_1) et (t_2, x_2) :

$$\begin{aligned}
Cov(u^\varepsilon(\cdot, x_1, t_1), u^\varepsilon(\cdot, x_2, t_2)) &= E[u^\varepsilon(\cdot, x_1, t_1)u^\varepsilon(\cdot, x_2, t_2)] - E[u^\varepsilon(\cdot, x_1, t_1)]E[u^\varepsilon(\cdot, x_2, t_2)] \\
&= E[u^\varepsilon(\cdot, x_1, t_1)u^\varepsilon(\cdot, x_2, t_2)] - \sum_{i,j} E[\alpha_i]E[\alpha_j]E[c_i(t_1 - \tau_i, x_1)]E[c_j(t_2 - \tau_j, x_2)] \\
&= \sum_{i=1}^N E[\alpha_i^2]E[c_i(t_1 - \tau_i, x_1)c_i(t_2 - \tau_i, x_2)] \\
&\quad - \sum_{i=1}^N E[\alpha_i]^2 E[c_i(t_1 - \tau_i, x_1)]E[c_i(t_2 - \tau_i, x_2)],
\end{aligned} \quad (IV.13)$$

ainsi que le coefficient de corrélation de $u^\varepsilon(\omega)$ entre (t_1, x_1) et (t_2, x_2) :

$$\rho(u^\varepsilon(\cdot, x_1, t_1), u^\varepsilon(\cdot, x_2, t_2)) = \frac{\text{Cov}(u^\varepsilon(\cdot, x_1, t_1), u^\varepsilon(\cdot, x_2, t_2))}{\sqrt{\text{Var}[u^\varepsilon(\cdot, x_1, t_1)]\text{Var}[u^\varepsilon(\cdot, x_2, t_2)]}}. \quad (IV.14)$$

IV.2.b/ Mise en œuvre du calcul des moments d'ordre 1 et 2

Le calcul numérique des grandeurs comme la moyenne, la corrélation et le coefficient de corrélation nécessite donc de résoudre N problèmes similaires dont seul le second membre change, puis de calculer des intégrales à partir de ces solutions.

Le fait que seul le second membre varie dans les N problèmes permet de faire des économies de calcul dans la simulation, en effet les systèmes matriciels issus de la discrétisation sont de la forme $A.x_i=b_i$ avec une même matrice A pour les N problèmes. On peut donc économiser d'une part sur la construction de cette matrice et son préconditionnement et d'autre part sur la résolution des systèmes où l'on peut réutiliser certains calculs intermédiaires selon la technique de résolution. Cet aspect a été pris en compte dans le logiciel Castem qui, pour des problèmes de convection-diffusion linéaires, est capable de travailler dans un mode dit multi-composante. Dans ce cas, l'équation d'évolution est unique mais les conditions initiales, les conditions aux limites et les seconds membres peuvent être distincts, le calcul des solutions (ou composantes) est alors effectué en simultané à chaque pas de l'itération. On obtient ainsi une forte réduction sur le temps de calcul en comparaison à la situation où l'on effectuerait N simulations indépendantes.

Une fois les N solutions calculées, il faut encore calculer des intégrales où apparaissent des produits entre ces solutions et la densité de probabilité f_τ . Ces intégrales sont à priori définies sur R entier, cependant f_τ et les $c_i(\cdot, x)$ ont des supports bornés, ce qui réduit l'intégration à un ensemble borné. On peut ainsi calculer ces intégrales numériquement avec des techniques classiques comme la méthode des trapèzes.

IV.2.c/ Quelques résultats numériques et interprétations

Pour illustrer ces résultats sur les moments de $u^\varepsilon(\omega)$, on a calculé, pour des temps allant jusqu'à 10^9 ans, les moyennes, variances et coefficients de corrélation sur deux points d'observation, pour le cas $N=4$. Bien que ce cas ne soit pas réaliste tant du point de vue physique que théorique ($\varepsilon=1/4 \gg 0$), il permet de valider la méthode. En effet, ces résultats ne portent pas directement sur l'homogénéisation et de plus la phénoménologie du problème reste la même indépendamment de N . La figure IV.2 explicite la situation considérée et l'emplacement des deux points : le point 1 est proche de la surface et le point 2 est pris au milieu de l'installation de stockage.

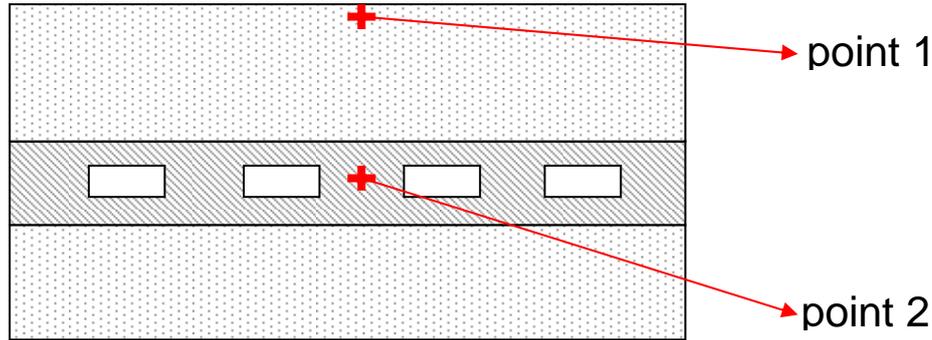


Fig. IV.2 – Emplacement des deux points d'observation

La figure IV.3 montre l'évolution de la moyenne de la concentration en ces points. Notons tout d'abord la différence dans les ordres de grandeurs qui rejoint ce qu'on observe dans le cas déterministe en figure II.4 : la concentration est bien plus faible à proximité de la surface qu'au niveau des sources. Rappelons ensuite que le temps moyen du déclenchement d'une source a été fixé à $5 \cdot 10^5$ ans et que la période radioactive de l' I^{129} est de $15 \cdot 10^6$ ans. Ce qu'on retrouve dans ces courbes : la concentration moyenne croît significativement à un temps de l'ordre de 10^5 ans ; puis la concentration moyenne retombe quand le phénomène de désintégration nucléaire devient prédominant, autour de $2 \cdot 10^6$ ans. Enfin, si les deux courbes ont une allure similaire, on peut malgré tout observer que le moment où la moyenne croît significativement et le temps de pic sont plus précoces pour le point 2, plus proche des sources, ce qui illustre la migration du radionucléide des sources vers la périphérie. Globalement, les variances des concentrations en ces points, qui sont présentées en figure IV.4, suivent les mêmes tendances que la moyenne.

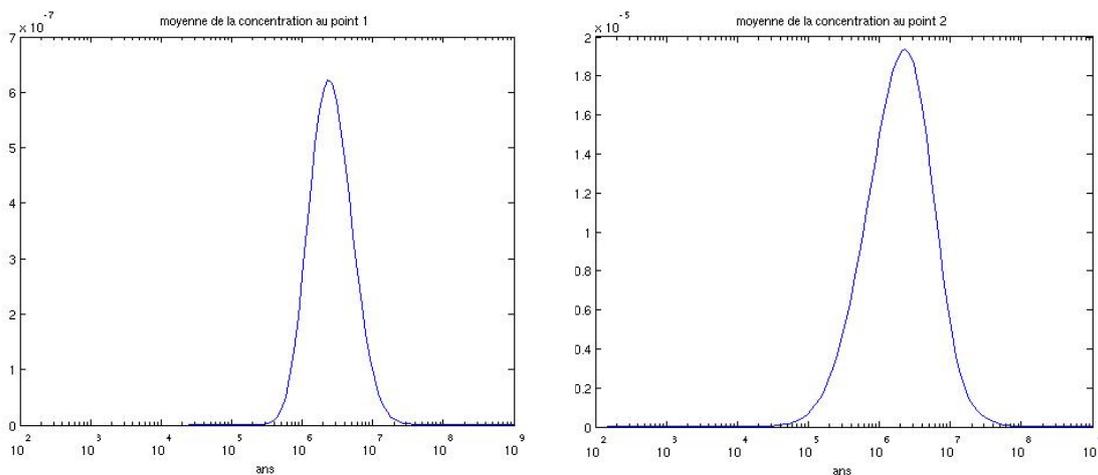


Fig. IV.3 – Evolution temporelle de la moyenne de la concentration (mol/m^3) aux deux points d'observation

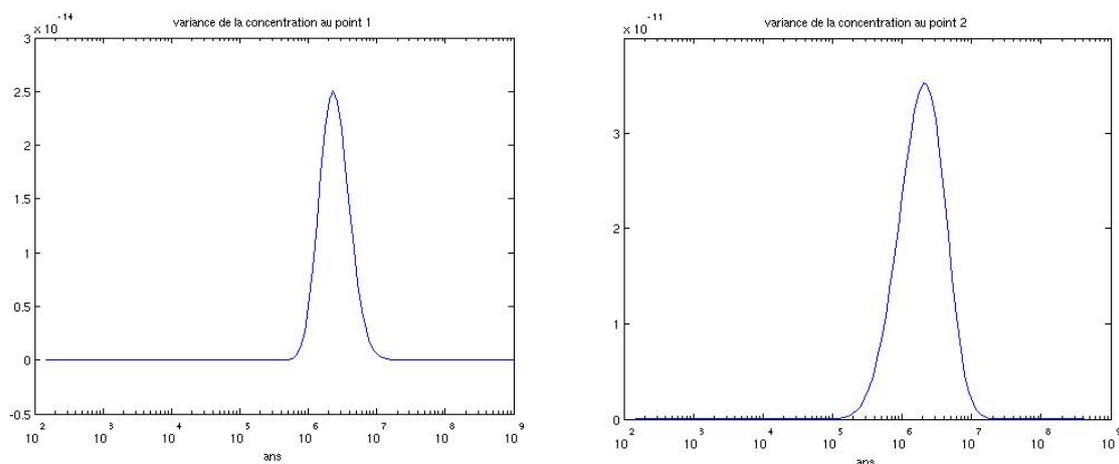


Fig. IV.4 – Evolution temporelle de la variance de la concentration (mol/m^3) aux deux points d'observation

Une autre donnée intéressante est celle du coefficient de corrélation qui permet d'évaluer comment les évolutions de ces grandeurs aléatoires que sont les concentrations aux points d'observation sont plus ou moins liées dans le temps. La figure IV.5 représente les valeurs des coefficients $\rho^{1,1}(t,s)$, $\rho^{2,2}(t,s)$ et $\rho^{2,1}(t,s)$ dans le plan (t,s) , où $\rho^{i,j}(t,s)$ est le coefficient de corrélation entre la concentration, prise au point i , au temps t et la concentration, prise au point j , au temps s . $\rho^{1,1}(t,s)$ et $\rho^{2,2}(t,s)$ sont par définition symétriques par rapport à la droite $t = s$ (droite D sur la figure d)) et prennent la valeur 1 sur cette droite. De manière générale, on constate que les trois coefficients de corrélation sont toujours positifs. Ceci se comprend du fait que le modèle ne comprend pas d'éléments pouvant entraîner des effets opposés ou de mécanismes de nature inhibitrice qui pourraient entraîner des évolutions opposées de la concentration en différents points ou en différents instants. On retrouve aussi le résultat assez intuitif que ce qui se passe "avant" le déclenchement des sources (t ou s de l'ordre ou inférieur à 10^3 années) n'est pas corrélé à ce qui se passe ensuite : la corrélation est quasiment nulle dans les régions R_2 et R_3 . Enfin, on retrouve la prédominance du phénomène de désintégration nucléaire pour les temps longs (au-delà de 10^7 ans), en effet, les concentrations dans les temps long ayant alors toutes le même comportement, elles sont fortement corrélées (corrélation proche de 1 dans la région R_4). Concernant $\rho^{2,1}(t,s)$, on retrouve le phénomène de propagation du radionucléide dans le fait que la corrélation est plus forte dans la zone $t > s$ (partie droite de la région R_1), c'est-à-dire qu'il y a une causalité temporelle entre la concentration au niveau des sources et celle à proximité de la surface.

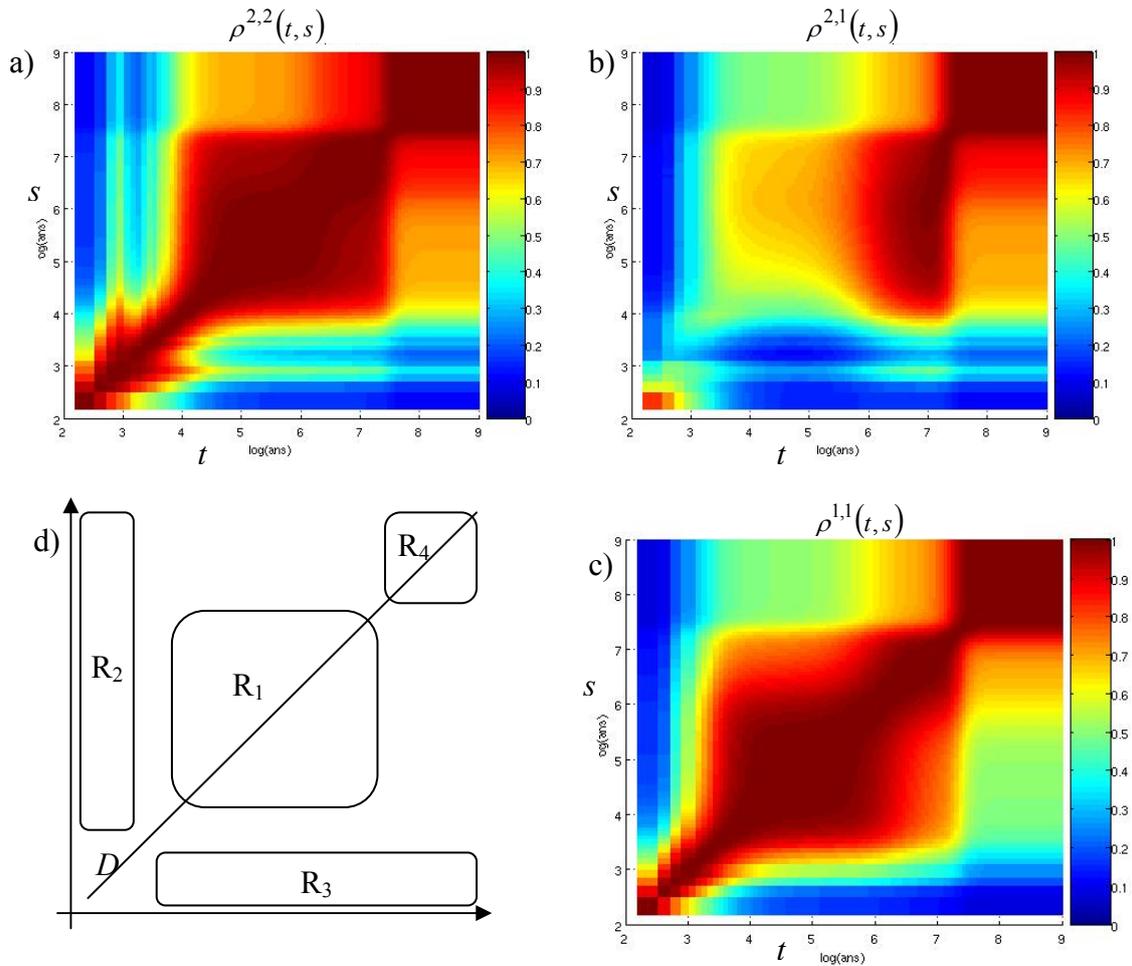


Fig. IV.5 – Evolution des coefficients de corrélation de la concentration aux deux points d'observation et en tout temps

L'indépendance des aléas dans le problème (P^ε) permet ainsi le calcul effectif des moments d'ordre un et deux de la solution aléatoire $u^\varepsilon(\omega, x, t)$; l'évaluation numérique de ces moments représentant un coût en calcul raisonnable de l'ordre du coût de la simulation du problème déterministe. Ces résultats apportent des informations sur le comportement de la solution aléatoire, et nous verrons dans la section suivante qu'ils peuvent aussi servir dans la validation de l'homogénéisation du problème (P^ε).

IV.3/ Calcul de l'erreur entre les solutions détaillée et homogénéisée

On s'intéresse désormais à mettre en place un calcul effectif de la moyenne de l'erreur qui apparaît dans le théorème III.2 dans le cadre de l'homogénéisation du problème (P^ε). On cherche donc à calculer la quantité $E\left[\|u^\varepsilon - u^0\|_{L^2(0,T;L^2(G))}^2\right]$ où $u^\varepsilon(\omega, x, t)$ et $u^0(x, t)$ sont respectivement les solutions de (P^ε) et de (P^0) et avec :

$$\|u^\varepsilon - u^0\|_{L^2(0,T;L^2(G))}^2 = \int_0^T \int_G (u^\varepsilon - u^0)^2 dxdt . \quad (IV.15)$$

On développera le calcul de manière formelle ; les quantités manipulées étant toutes bornées indépendamment de ω , x et t et définies sur des supports bornés, l'interversion des signes d'intégration n'est ici pas un problème.

Rappelons que u^ε peut s'écrire :

$$u^\varepsilon(\omega, x, t) = \sum_{i=1}^N \alpha_i(\omega) c_i(t - \tau_i(\omega), x) , \quad \forall(\omega, x, t) , \quad (IV.4)$$

où les α_i et les τ_i sont indépendants entre eux, ce qui permet d'exprimer la moyenne de u^ε et de $(u^\varepsilon)^2$ ainsi :

$$E[u^\varepsilon(t, x, \cdot)] = \sum_{i=1}^N E[\alpha_i] E[c_i(t - \tau_i, x)] \quad (IV.6)$$

$$\text{et } E[(u^\varepsilon(t, x, \cdot))^2] = \sum_{i=1}^N E[\alpha_i^2] E[c_i(t - \tau_i, x)^2]. \quad (IV.8)$$

IV.3.a/ Calcul de la moyenne de l'erreur

On considère donc :

$$\begin{aligned} E\left[\|u^\varepsilon - u^0\|_{L^2(0,T;L^2(G))}^2\right] &= \int_0^T \int_G E[(u^\varepsilon - u^0)^2] dxdt \\ &= \int_0^T \int_G (u^0)^2 dxdt - 2 \int_0^T \int_G E[u^\varepsilon u^0] dxdt + \int_0^T \int_G E[(u^\varepsilon)^2] dxdt. \end{aligned} \quad (IV.16)$$

Notons :

$$I_1 = \int_0^T \int_G (u^0)^2 dxdt ; \quad I_2 = \int_0^T \int_G E[u^\varepsilon u^0] dxdt ; \quad I_3 = \int_0^T \int_G E[(u^\varepsilon)^2] dxdt , \quad (IV.17)$$

il s'agit donc d'évaluer numériquement ces trois termes à partir de u^0 , des c_i et des données sur les α_i et les τ_i . I_1 ne nécessite pas plus de traitement pour son calcul. I_2 et I_3 nécessitent par contre quelques développements.

On a donc pour I_3 :

$$\begin{aligned}
I_3 &= \int_0^T \int_G E \left[(u^\varepsilon)^2 \right] dx dt \\
&= \int_0^T \int_G \sum_{i=1}^N E[\alpha_i^2] E \left[c_i(x, t - \tau_i)^2 \right] dx dt \\
&= \int_0^T \sum_{i=1}^N E[\alpha_i^2] E \left[\int_G c_i(x, t - \tau_i)^2 dx \right] dt \\
&= \int_0^T \sum_{i=1}^N E[\alpha_i^2] E[h_i(t - \tau_i)] dt, \quad \text{avec} \quad h_i(s) = \int_G c_i(x, s)^2 dx.
\end{aligned} \tag{IV.18}$$

Si l'on considère de plus que les τ_i sont tous de même loi de densité f_τ , alors :

$$\begin{aligned}
I_3 &= \int_0^T \sum_{i=1}^N E[\alpha_i^2] \left(\int_{\mathbb{R}} h_i(t-s) f_\tau(s) ds \right) dt \\
&= \int_0^T \sum_{i=1}^N E[\alpha_i^2] \left(\int_{\mathbb{R}} h_i(s) f_\tau(t-s) ds \right) dt \\
&= \int_{\mathbb{R}} \sum_{i=1}^N E[\alpha_i^2] h_i(s) \left(\int_0^T f_\tau(t-s) dt \right) ds \\
&= \int_{\mathbb{R}} h(s) \left(\int_0^T f_\tau(t-s) dt \right) ds, \quad \text{avec} \quad h(s) = \sum_{i=1}^N E[\alpha_i^2] h_i(s).
\end{aligned} \tag{IV.19}$$

Remarquons d'une part que, pour certains f_τ (par exemple celui de la loi de Weibull), on a accès à une expression explicite de $F_\tau(s) = \int_0^T f_\tau(t-s) dt$; d'autre part, si l'on suppose que le support de f_τ est dans $[0; +\infty[$ ($Supp(f_\tau) \subset [0; +\infty[$, physiquement cela correspond au fait qu'une source ne peut se déclencher qu'après le temps initial), alors $Supp(F_\tau) \subset]-\infty; T]$. Comme de plus on a $Supp(h) \subset [0; +\infty[$, il vient que $Supp(h.F_\tau) \subset [0; T]$, on obtient ainsi que

$$I_3 = \int_{\mathbb{R}} h(s) F_\tau(s) ds = \int_0^T h(s) F_\tau(s) ds. \tag{IV.20}$$

Pour I_2 , on a :

$$\begin{aligned}
I_2 &= \int_0^T \int_G E[u^\varepsilon u^0] dx dt \\
&= \int_0^T \int_G \sum_{i=1}^N E[\alpha_i] E[c_i(x, t - \tau_i) u^0(x, t)] dx dt \\
&= \int_0^T \sum_{i=1}^N E[\alpha_i] E \left[\int_G c_i(x, t - \tau_i) u^0(x, t) dx \right] dt \\
&= \int_0^T \sum_{i=1}^N E[\alpha_i] E[g_i(t - \tau_i, t)] dt \quad \text{avec} \quad g_i(s, t) = \int_G c_i(x, s) u^0(x, t) dx \\
&= \int_0^T \sum_{i=1}^N E[\alpha_i] \left(\int_{\mathbb{R}} g_i(t - s, t) f_\tau(s) ds \right) dt \\
&= \int_0^T \int_{\mathbb{R}} \sum_{i=1}^N E[\alpha_i] g_i(t - s, t) f_\tau(s) ds dt \\
&= \int_0^T \int_{\mathbb{R}} g(t - s, t) f_\tau(s) ds dt \quad \text{avec} \quad g(s, t) = \sum_{i=1}^N E[\alpha_i] g_i(s, t) \\
&= \int_0^T \int_{\mathbb{R}} g(s, t) f_\tau(t - s) ds dt \\
&= \int_{\mathbb{R}} \left(\int_0^T g(s, t) f_\tau(t - s) dt \right) ds.
\end{aligned} \tag{IV.21}$$

Notons $G(s) = \int_0^T g(s, t) f_\tau(t - s) dt$, de la même manière que précédemment, pour $Supp(f_\tau) \subset [0; +\infty[$ on a que $Supp(G) \subset]-\infty; T]$, de plus, comme pour tout s $Supp(g(s, \cdot)) \subset [0; +\infty[$, on en déduit que $Supp(G) \subset [0; T]$, de sorte que

$$I_2 = \int_{\mathbb{R}} \left(\int_0^T g(s, t) f_\tau(t - s) dt \right) ds. \tag{IV.22}$$

IV.3.b/ Mise en œuvre du calcul de l'erreur

On abouti ainsi au calcul effectif des termes I_1 , I_2 et I_3 qui composent $E \left[\|u^\varepsilon - u^0\|_{L^2(0, T; L^2(G))}^2 \right]$ à partir de u^0 , des c_i , des moments des α_i et de la densité de probabilité de la loi des τ_i . Dans ce calcul apparaissent des grandeurs auxiliaires, les h_i et les g_i , qui font intervenir des intégrales en espace de produits de u^0 et des c_i .

Notons tout d'abord que l'on compare ici les solutions u^0 et u^ε de deux problèmes de géométries différentes dont les discrétisations sont a priori distinctes. Il est donc nécessaire de définir un maillage commun aux deux géométries sur lequel seront calculés u^0 et les c_i , ceci afin de s'affranchir de l'erreur d'approximation qu'induirait l'interpolation d'une solution

d'un maillage à l'autre. Nous reviendront ultérieurement sur le calcul de u^0 sur une grille plus grossière adaptée au à la géométrie homogénéisée.

Pour optimiser le calcul de $h(s)$, et en particulier l'espace mémoire utilisé, les valeurs de $h(s)$ sont calculés à chaque pas de temps pendant le calcul des c_i . Rappelons que Castem permet le calcul simultané des c_i via un mode multi-composantes. Ceci permet de ne stocker ni les h_i , ni les c_i . De la même manière, le terme $g(s,t)$ est calculé à chaque pas de temps s du calcul des c_i . Cependant, il faut pour cela disposer à chaque étapes de l'ensemble des valeurs de $u^0(x,t)$ en tout temps t . Ceci est assez coûteux en mémoire et difficilement contournable, mais ne porte que sur une seule composante u^0 .

La figure IV.6 indique comment le calcul de l'erreur est mené : après avoir construit un maillage adapté, il faut calculer et stocker les valeurs de u^0 en tout temps ; puis, à chaque pas de temps s du calcul des c_i , calculer et stocker $h(s)$ et $g(s,t)$; et enfin calculer les intégrales I_1, I_2 et I_3 .

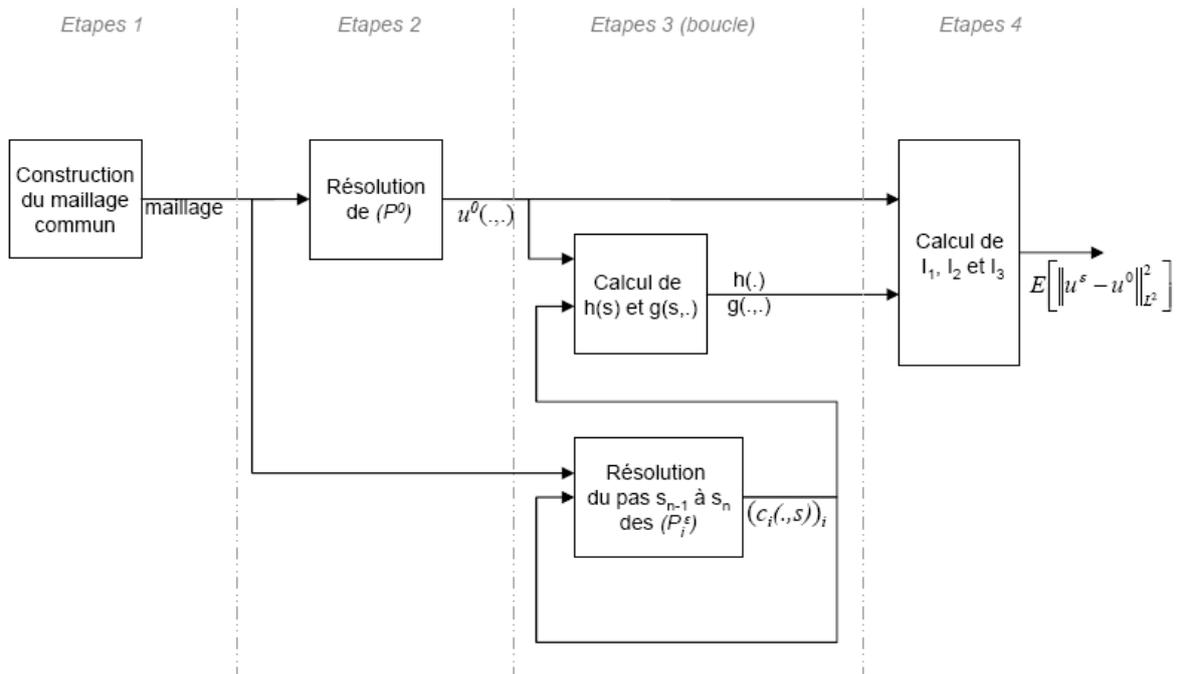


Fig. IV.6 – Schéma général du calcul de $E\left[\|u^\varepsilon - u^0\|_{L^2(0,T;L^2(G))}^2\right]$

IV.3.c/ Résultats numériques : validation de la convergence

Les résultats de ce calcul pour différents nombres N de sources sont recensés dans la figure IV.7. On retrouve une conséquence du résultat de convergence du théorème III.1 sur le graphique a) : la distance entre les solutions de (P^ε) et de (P^0) tend en moyenne vers zéro. Le graphique b) représente en échelle logarithmique l'évolution de $E\left[\|u^\varepsilon - u^0\|_{L^2(0,T;L^2(G))}^2\right]$ selon ε . Le théorème III.2 donne une majoration de cette quantité en $O(\varepsilon^2)$, on retrouve bien ce résultat pour les ε assez petits ($\varepsilon \leq 3 \cdot 10^{-2}$).

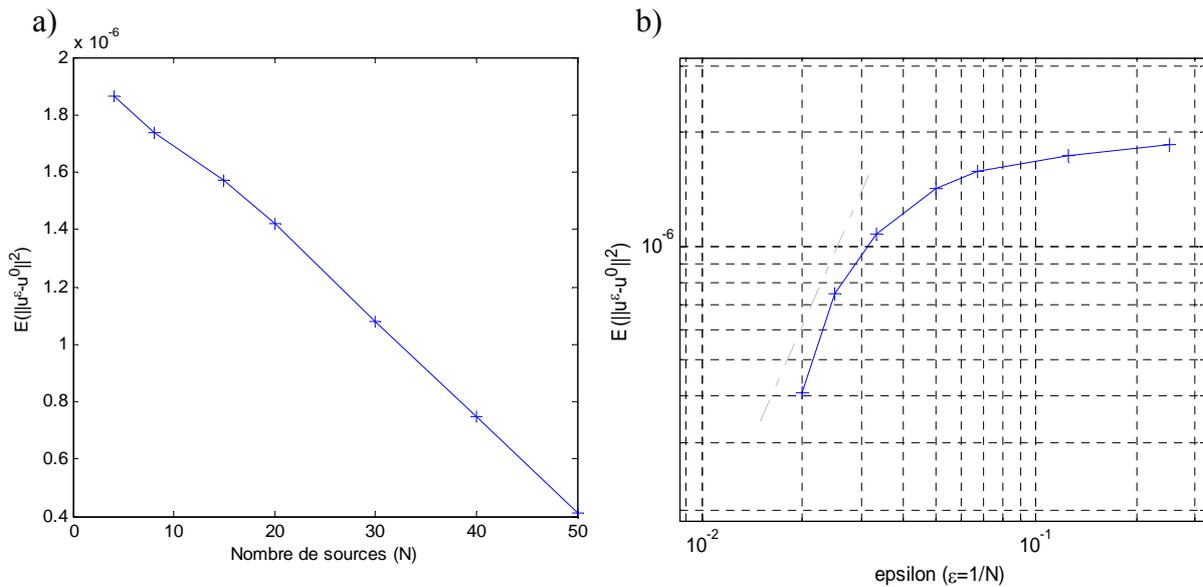


Fig. IV.6 – Evolution de la moyenne de l'erreur :
a) selon le nombre de sources ; b) selon ε (en pointillé, la courbe $y=Kx^2$)

IV.4/ Validation du gain apporté par l'homogénéisation

On a donc observé numériquement le résultat du théorème III.2 qui permet d'estimer l'erreur commise en assimilant la solution du problème homogénéisé à celle du problème d'origine, plus détaillé. Cependant, on a pour l'instant utilisé les mêmes maillages pour la résolution de ces deux problèmes, alors même que la motivation de l'homogénéisation est de pouvoir travailler sur des maillages plus légers. Dans cette section s'intéresse donc à la comparaison entre les simulations de u^0 sur un maillage fin et sur un maillage plus "grossier". Le maillage fin est celui correspondant au problème détaillé avec $N=25$, c'est-à-dire le problème type de la partie II. Le maillage grossier est un maillage conçu pour la géométrie particulière du problème (P^0) , une description précise de ces maillages est donnée en annexe.

En fait de maillage grossier, le maillage utilisé pour la résolution spécifique du problème homogène donne une solution tout aussi précise que celle obtenue avec le maillage dit fin.

Mais la géométrie homogénéisée est beaucoup plus simple et cela permet de réaliser un maillage beaucoup plus léger : le maillage doit désormais s'adapter à la source homogénéisée Σ , et non plus à 25 petites sources rectangulaires. Alors que dans le problème détaillé, il faut mailler finement horizontalement et verticalement chaque source, on peut ici se concentrer plus spécifiquement d'une part sur l'évolution verticale de la concentration à proximité de Σ , la source homogène engendrant une forte pente dans ce sens au niveau de Σ , et d'autre part autour des extrémités gauche et droite de Σ . On capte ainsi avec précision le comportement de la solution homogénéisée en minimisant le nombre d'éléments du maillage.

Pour $N=25$, le maillage fin présente une taille minimale pour ces éléments du même ordre que celle du maillage grossier, cependant la géométrie plus simple du problème homogène permet de plus relâcher les contraintes sur le maillage. On obtient ainsi un maillage grossier de 13432 éléments quand le maillage fin en comporte 229284. Ceci se ressent bien sûr sur le temps de calcul, on observe un facteur 10 sur le temps de résolution du problème homogénéisé selon qu'on utilise le maillage fin ou grossier.

La figure IV.7 présente une comparaison numérique des solutions obtenues sur chaque maillage (u_f^0 et u_g^0). On constate que la différence relative maximum entre les deux solutions calculées est toujours inférieure à 3% excepté pour les premiers pas de l'intégration où l'on dépasse 6%. On peut voir aussi en figure IV.8 comment cette erreur est répartie sur le domaine à différents instants : elle se concentre autour de Σ et le maximum de l'erreur se situe sur Σ . Il est intéressant de remarquer que, à proximité de Σ , le maillage "grossier" capte mieux le fort gradient de concentration et que c'est en fait la solution u_f^0 calculée sur le maillage fin qui commet une erreur. Ceci est illustré dans la figure IV.9 où est représentée l'évolution de u_f^0 et u_g^0 selon une coupe verticale au milieu du stockage pour un temps court et un temps long. L'erreur plus forte dans les premiers temps est précisément due aux forts gradients qui existent au début du relâchement.

On vérifie donc bien que les solutions u_f^0 et u_g^0 calculées sur ces deux maillages sont équivalentes, mais qu'on divise par 10 le temps de calcul en utilisant un maillage adapté au nouveau problème homogénéisé.

On valide ainsi la méthode d'homogénéisation du problème aléatoire : la convergence vers la solution homogène est bien observée et la vitesse de convergence (théorème III.2) est validée numériquement. Enfin, le gain sur le coût en temps de calcul et en mémoire a bien été vérifié, sans que cela n'engendre d'erreurs numériques préjudiciables dans les simulations. On dispose donc avec l'homogénéisation d'une approche économique qui offre la possibilité de multiplier les simulations pour l'étude de la migration de radionucléide en milieu poreux, en particulier dans l'étude du champ lointain, tout en garantissant un contrôle sur l'approximation faite.

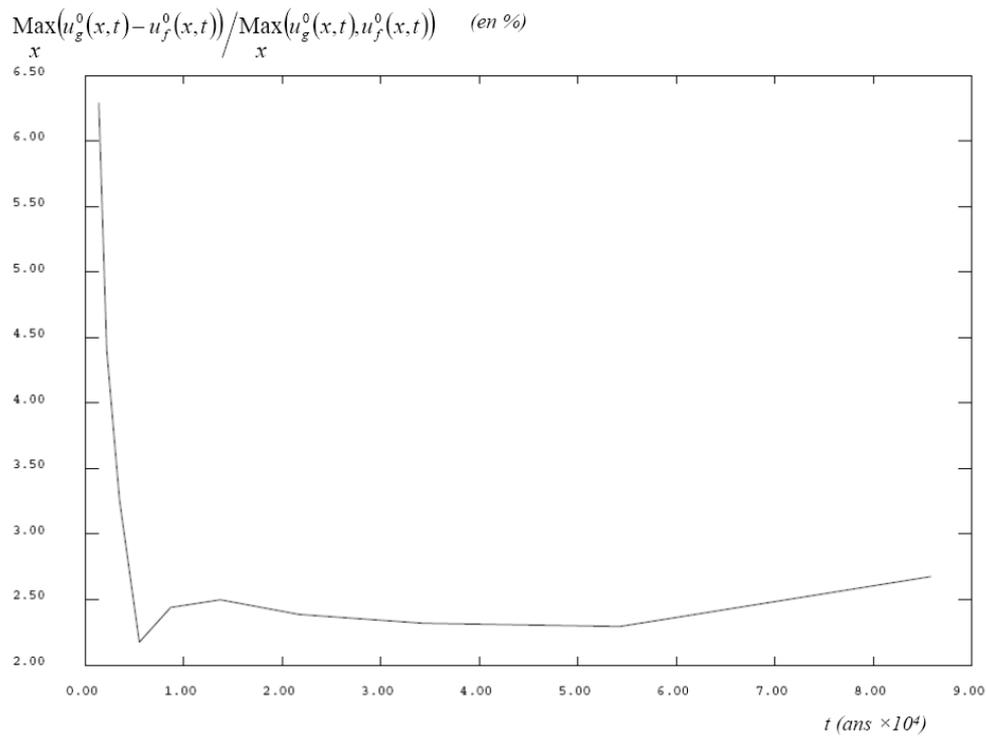


Fig. IV.7 – Evolution temporelle du maximum de la distance relative entre u_f^0 , solution de (P^0) calculée sur le maillage fin, et u_g^0 , solution de (P^0) calculée sur la maillage grossier.

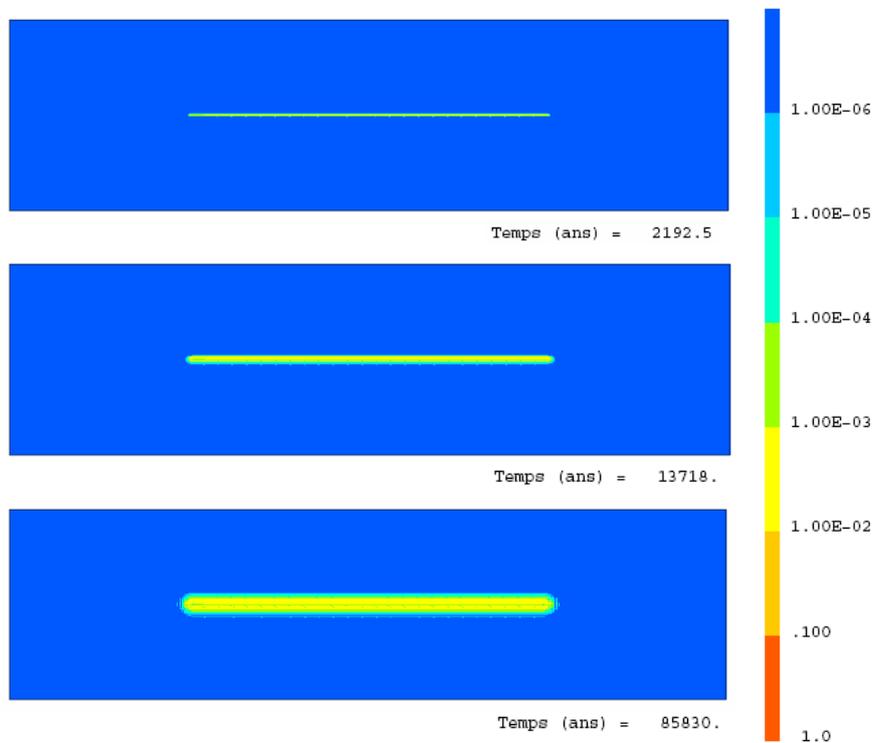


Fig. IV.8 – Evolution spatiale pour différents temps de la distance relative entre u_f^0 , solution de (P^0) calculée sur le maillage fin, et u_g^0 , solution de (P^0) calculée sur le maillage grossier.

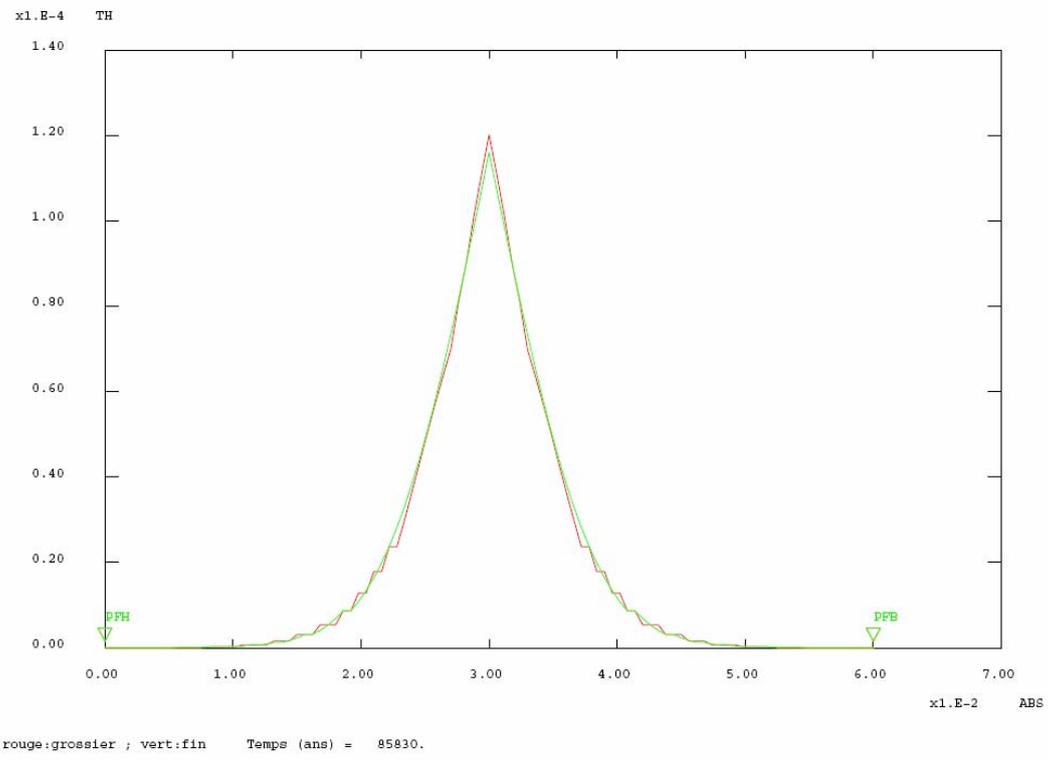
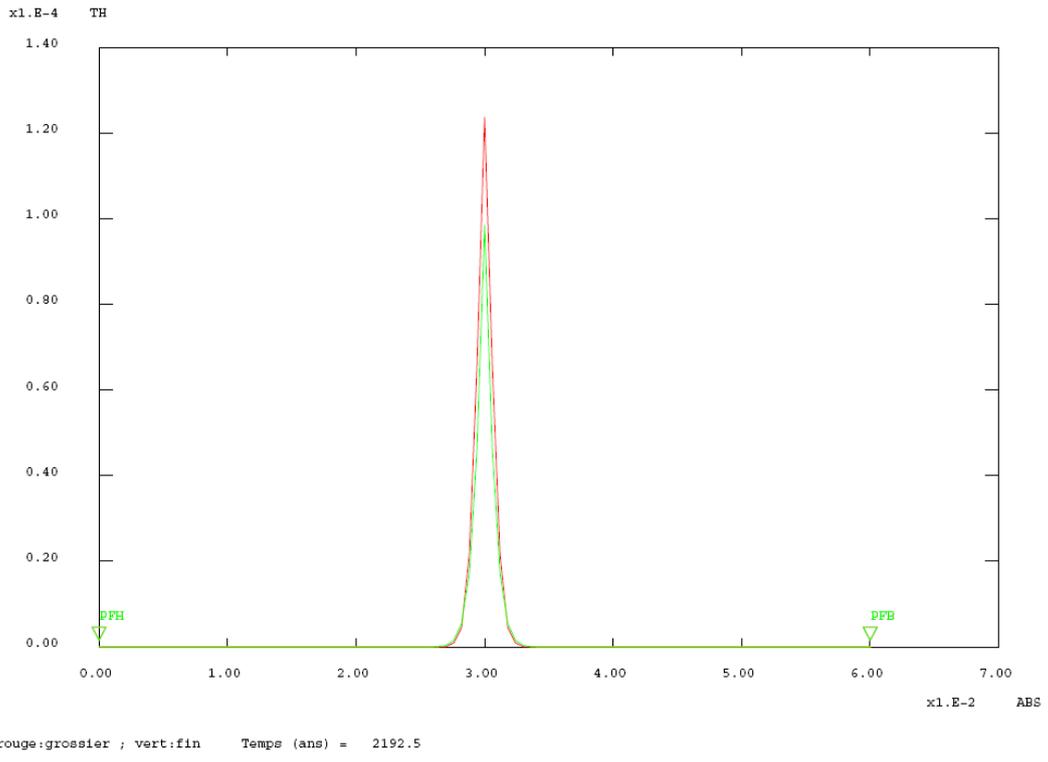


Fig. IV.9 – Evolution spatiale de u_f^0 (en vert) et u_g^0 (en rouge) (en mol/m³) selon une section verticale coupant Σ en son milieu, aux temps $T=2192,5$ et $T=85830$

Conclusion générale et perspectives

La gestion et le stockage des déchets nucléaires, et plus généralement des déchets chimiques, en milieu souterrain sont des problématiques essentielles de nos sociétés modernes. Les enjeux économiques mais aussi écologiques qui les sous-tendent nécessitent de maîtriser au mieux ces procédés et de garantir la sûreté des installations. En particulier, comprendre et anticiper les conséquences d'une fuite dans le stockage est impératif.

Le problème de la migration de radionucléide dans les milieux géologique fait intervenir des échelles de taille et de temps considérables qui font de la simulation numérique un outil incontournable en complément de l'expérimentation physique. Cependant les calculs numériques engendrés sont très coûteux en temps et en mémoire, ce qui rend l'expérimentation numérique fastidieuse et restreint la quantité de résultats susceptibles d'être produits.

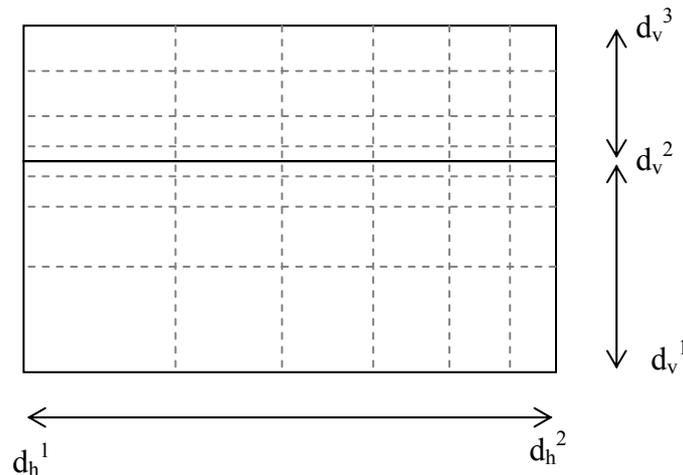
Afin de mieux prendre en compte les incertitudes inhérentes au problème, nous avons donc développé un cadre probabiliste général dans lequel les techniques d'homogénéisation peuvent être mises en œuvre. Ces résultats d'homogénéisation proposent une approximation du problème d'origine beaucoup moins coûteuse dans sa résolution tout en apportant un contrôle sur l'erreur commise. Nous avons aussi établi un calcul effectif des moments de la solution aléatoire dans un cadre plus restrictif. Le calcul de ces moments nous a de plus permis de valider numériquement les résultats de convergence sur l'homogénéisation du problème. La méthode d'homogénéisation représente ainsi une technique particulièrement intéressante pour l'étude de ce type de problème, qui engendrent des calculs très lourds, et plus précisément pour la simulation du champ lointain. De plus, les considérations probabilistes dans les questions de stockage souterrain sont récentes mais on montre ici que des résultats sont accessibles sous des hypothèses simples.

Ce travail serait avantageusement complété par une étude physique plus poussée d'un modèle probabiliste réaliste du comportement des sources. Ces données faisant actuellement défaut, il n'est pour l'instant pas possible de produire des résultats quantitatifs pertinents. Pour cette première étude, le problème a été restreint à la considération d'un aléa portant uniquement sur les sources et d'une équation de convection-diffusion linéaire. Il est donc possible d'approfondir la question en s'intéressant à des modèles incluant un aléa sur les coefficients physiques ou prenant en compte des éléments de non linéarité, comme par exemple un effet de retard non linéaire dans le phénomène de sorption. L'étude de ces questions nécessitent cependant d'autres techniques que celles mises en œuvre dans le cadre linéaire. Enfin, l'étude de la solution aléatoire que nous avons menée s'est concentrée sur la détermination des moments, tandis que la situation idéale, mais autrement plus difficile, serait de développer un modèle donnant accès directement à la loi de probabilité de la solution, ce qui permettrait de caractériser entièrement le problème.

Annexe : Détails des maillages pour les géométries détaillée et homogénéisée

Le logiciel Castem ([15]) permet de définir entièrement le maillage d'une géométrie. Nous présentons ici une description précise des maillages utilisés pour la résolution des problèmes traités. Les maillages construits sont composés de mailles rectangulaires et donc constitués uniquement de segments horizontaux et verticaux. Ce type de maillage se construit sous Castem en définissant tout d'abord des segments discrétisés par un certain nombre de nœuds, puis un rectangle à partir de 4 segments dont les discrétisations sont compatibles entre elles, il suffit alors de "daller" ce rectangle en s'appuyant sur les nœuds composant ses côtés. Dans cette construction, les segments et leur discrétisation déterminent donc entièrement le maillage, nous ne décrivons donc que ceux-ci.

Castem propose différentes manières de discrétiser un segment, dont une reposant sur la notion de "densité" d'un point et qui permet une discrétisation non homogène du segment. Dans ce cas, on affecte à chaque extrémité du segment une densité qui correspond au pas de discrétisation au niveau de ce point. Lorsque les densités des extrémités d'un segment sont différentes, le pas de discrétisation varie linéairement le long du segment. Cette notion de densité d'un point permet ainsi de définir facilement un maillage à pas variable mais présentant une certaine continuité. On peut cependant vouloir qu'un point ait une densité différente selon le segment que l'on considère (horizontal ou vertical par exemple) ; par contre, pour préserver une certaine continuité dans la discrétisation, on prendra systématiquement la même densité pour un point appartenant à deux segments alignés (segments horizontaux à gauche et à droite d'un point par exemple). Cela nous conduit à décrire un maillage de la manière suivante :

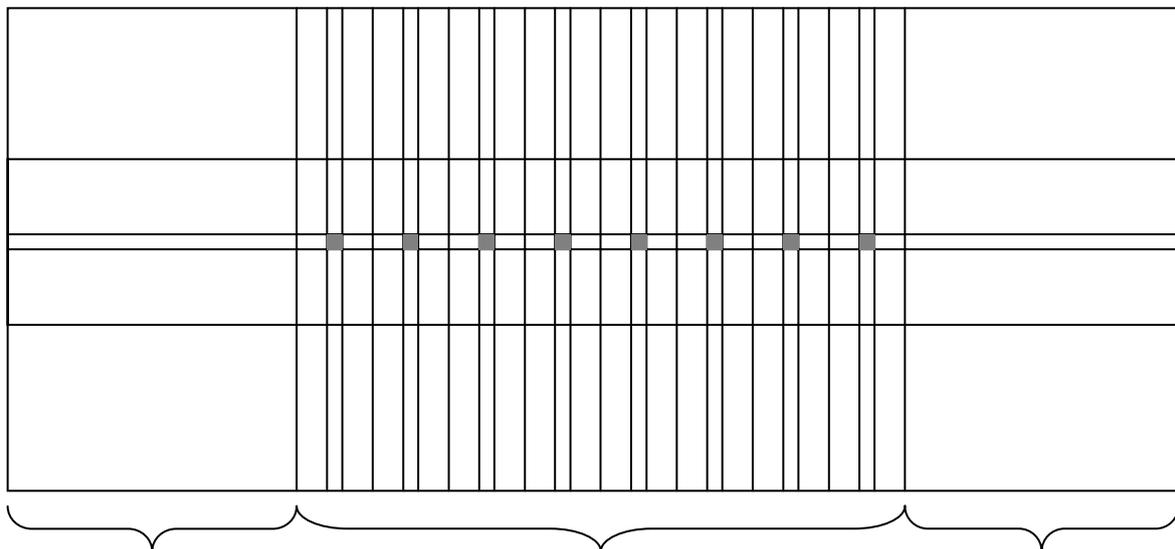


Avec la donnée de 5 paramètres, on peut ainsi définir un maillage non homogène dont le pas varie continuellement.

Les maillages présentés ici sont entièrement définis à partir de la densité de certains points. On adoptera donc cette représentation pour détailler leur architecture et on précisera plus le maillage engendré (indiquer en pointillés sur la figure)

B.1/ Maillage de la géométrie détaillée

On distingue trois grandes zones (figure B.1) qui sont des bandes verticales dans la géométrie détaillée : la zone centrale, où se trouve le stockage, et les extrémités gauche et droite qui sont symétriques l'une de l'autre. La partie centrale présente une périodicité dans la direction horizontale dont le détail d'une période est donné en figure B.2. La figure B.2 présente aussi le paramétrage de la zone de droite, la zone de gauche étant paramétrée de manière symétrique.



*Fig. B.1 – Structure du maillage de la géométrie détaillée
(en gris l'emplacement des sources)*

Dans le paramétrage présenté, d est la densité de base et les autres paramètres sont des coefficients qui viennent pondérer selon l'emplacement du point dans la géométrie. Le maillage est donc déterminé par un paramètre d'échelle (d) et des paramètres de forme (C_{\sim}). Le paramètre d est pris de sorte à contrôler le nombre n_y de mailles sur une arête verticale d'une source, c'est-à-dire $d = h_{source} / (2n_y)$ avec h_{source} la hauteur d'une source.

Après plusieurs essais pour trouver un équilibre entre la finesse du maillage et le temps de résolution qui en découle, les coefficients ont été fixés à : $C_x^{ext} = 20$; $C_x^{mot} = 2$; $C_y^{ext} = 20$; $C^{sigm} = 1$ et $C^{intc} = 1 + (C_y^{ext} \times h_{int}) / (a_{int} \times h_{cou})$, avec h_{int} et h_{cou} les hauteurs respectivement des couches intérieures (argile) et extérieures (calcaire). a_{int} est ainsi un facteur qui situe C^{intc} par rapport à 1 et à C_y^{ext} ; il a été fixé à 4. Le paramètre n_y a été fixé à 8 dans la majorité des simulations mais a dû être diminué jusqu'à 2 quand le nombre de source devenait trop grand ($N=50$).

On parvient ainsi à définir un maillage qui s'adapte à la géométrie en s'affinant là où les détails sont fins et qui est plus lâche là où une grande précision n'est pas nécessaire.

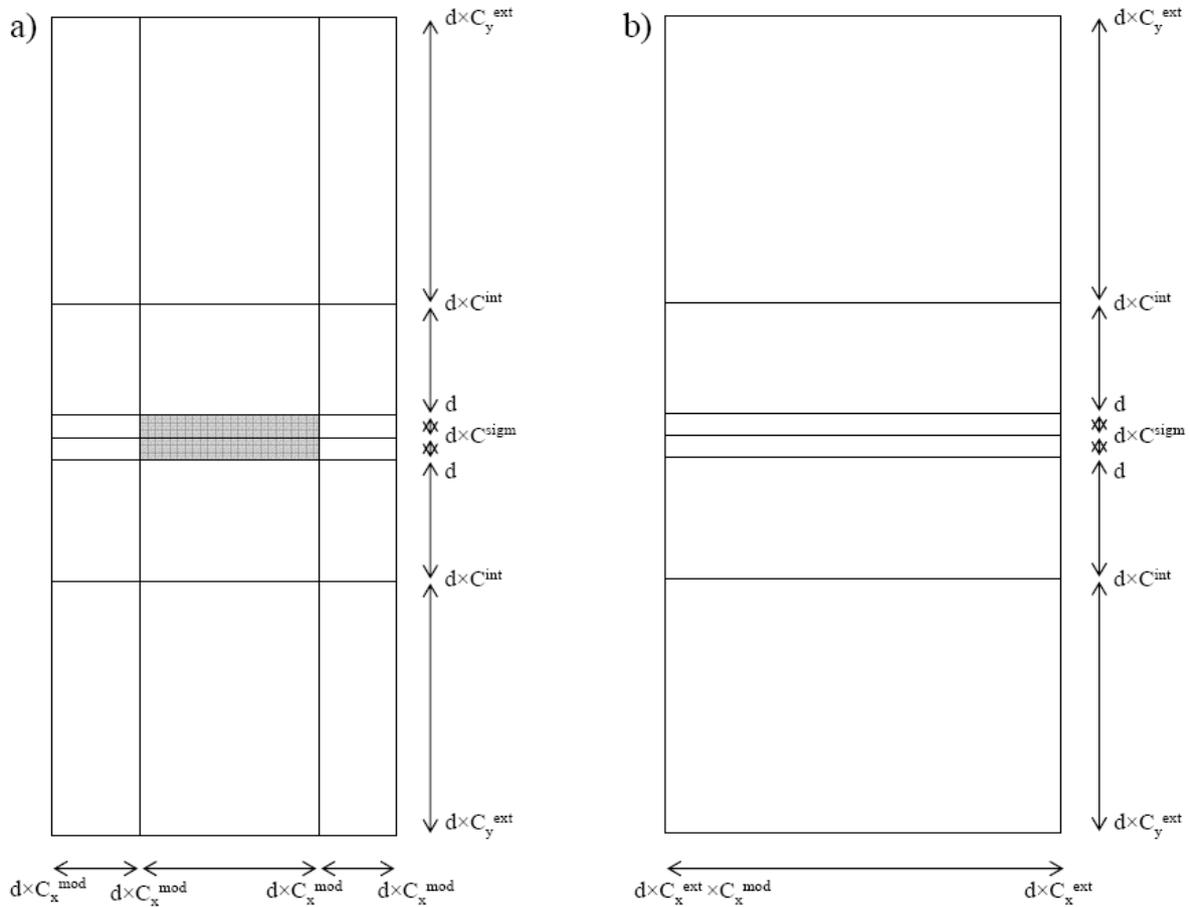


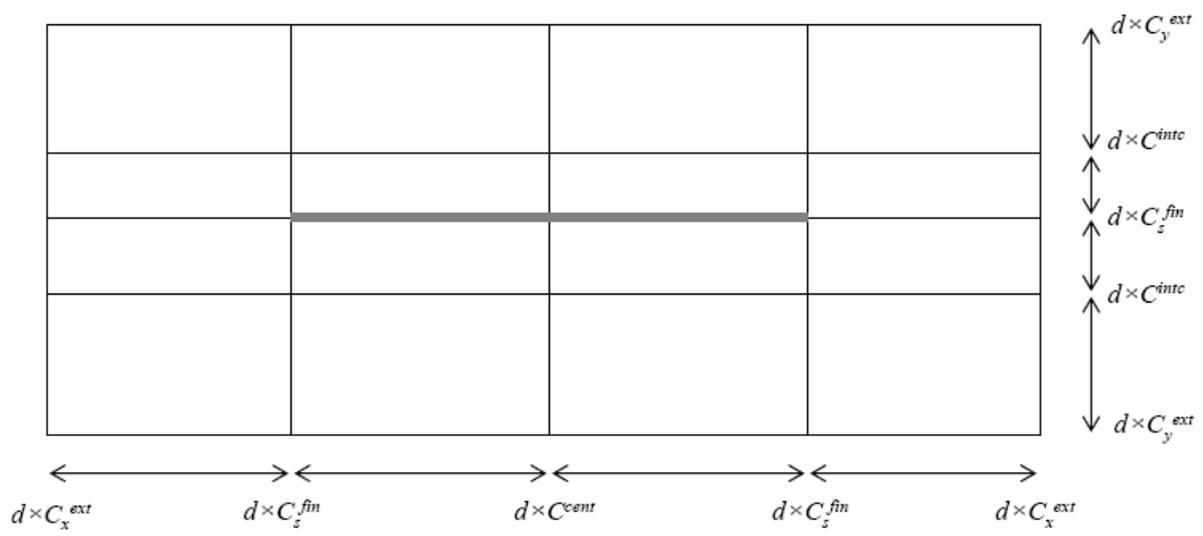
Fig. B.2 – Paramétrage des différentes zones :
a) une période de la zone centrale ; b) zone de droite

B.2/ Maillage de la géométrie homogénéisée

La géométrie du problème homogène est bien plus simple que celle du problème détaillé mais présente une forte anisotropie, la source homogénéisée, et des singularités aux extrémités de la source. Le maillage a donc été adapté à ces spécificités.

De la même manière que précédemment, d est la densité de référence et constitue un facteur d'échelle du maillage tandis que les C_{\sim} sont des paramètres de forme. Comme il n'y a plus d'objet avec une épaisseur dans la géométrie, d est fixé directement comme la taille d'une maille de référence. Le paramétrage retenu est le suivant : $C_x^{ext}=30$; $C^{cent}=20$; $C_s^{fin}=1/100$; $C_y^{ext}=30$ et $C^{intc}=C_s^{fin} + (C_y^{ext} \times h_{int}) / (a_{int} \times h_{cou})$, avec $a_{int}=10$; et $d=h_{cou}/100$.

Ce choix de paramètres permet d'une part d'affiner le maillage autour des extrémités de la source et d'autre part de mieux discrétiser le voisinage de la source dans la direction verticale.



*Fig. B.3 – Structure et paramétrage du maillage de la géométrie homogénéisée
(en gris l'emplacement de la source)*

Bibliographie

- [1] P.A. Raviart et J.M. Thomas - *Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles*, Dunod, (2004).
- [2] A. Ern - *Eléments finis*, Dunod, (2005).
- [3] H. Brézis - *Analyse fonctionnelle*, Dunod, (2005).
- [4] J. Sanchez-Hubert et E. Sanchez-Palencia - *Introduction aux méthodes asymptotiques et à l'homogénéisation*, Masson, (1992).
- [5] E. Sanchez-Palencia - *Non-homogeneous media and vibration theory*, Springer-Verlag, (1980).
- [6] D.Cioranescu and P. Donato - *An introduction to homogenization*, Oxford University Press, (1999).
- [7] F. Murat – *Compacité par compensation*, Ann. Sc. Normale Pisa, 5, (1978), pp489-508.
- [8] A. Bourgeat, O. Gipouloux et E. Marušić-Paloka – *Modelling of an underground waste disposal site by upscaling*, Math. Methods Appl. Sci. 27 (2004), no. 4, pp381-403.
- [9] A. Bourgeat¹, A. L. Piatnitski² - *Modelling of an underground waste disposal site with randomness in source terms by upscaling*, notes internes.
- [10] *Simulation of transport around a nuclear waste disposal site - the complex test cases*, Computational geosciences Vol. 8 No.2, (2004).
- [11] Andra - *Dossier 2005 argile – Tome architecture et gestion du stockage géologique*, Rapport Andra, (2005).
- [12] K.Besnard - *Modélisation du transport réactif dans les milieux poreux hétérogènes ; application aux processus d'adsorption cinétique non linéaire*, Thèse 2003, Université Rennes 1, N° d'ordre 2957. (www.caren.univ-rennes1.fr/doc/memoires/mem5/KB_these.pdf)
- [13] www.andra.fr (site web de l'agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs).
- [14] www.irsn.fr (site web de l'institut de radioprotection et de sûreté nucléaire).
- [15] www-cast3m.cea.fr (site web du logiciel Castem).

¹ Université Lyon 1, MCS – Bât ISTIL 15 Bld Latarjet, 69622 Villeurbanne Cedex France
bourgeat@mcs.univ-lyon1.fr

² Narvik University College – Postboks 385, 8505 Narvik, Norway
and P.N. Lebedev Physical Institute of RAS – Leninski pr. 53, Moscow 117924, Russia
andrey@sci.lebedev.ru