

Université Lyon1

Thèse

par M<sup>lle</sup> **Isabelle BOURSIER**

pour obtenir le grade de docteur de l'université Lyon1

spécialité : mathématiques appliquées

soutenue le 24 novembre 2005 à l'université Lyon1

**Deux approches de la simulation champ lointain d'un  
transport de soluté en milieu poreux : modélisation  
par la technique d'homogénéisation de termes source  
et méthode de décomposition de domaine adaptée à  
une équation de convection-diffusion**

Jury :

Amaziane	Brahim	Rapporteur
Erhel	Jocelyne	Rapporteur
Bourgeat	Alain	Directeur de thèse
Gipouloux	Olivier	Examineur
Tromeur-Dervout	Damien	Directeur de thèse
Vialay	Bernard	Examineur



## Remerciements

Tout d'abord, je souhaite remercier Jocelyne Erhel, directrice de recherche INRIA et directrice du projet ALADIN, et Brahim Amaziane, Maître de Conférences de l'université de Pau, qui m'ont fait l'honneur d'accepter d'être les rapporteurs de ma thèse et de participer au jury.

Je remercie naturellement Bernard Vialay d'avoir suivi et encadré mes recherches depuis l'Andra de manière efficace. L'Andra elle-même ne doit pas être oubliée pour permettre à certaines thèses d'exister en les finançant pendant trois ans.

Je tiens à exprimer ma vive reconnaissance à mes deux directeurs de thèse, les Professeurs Alain Bourgeat et Damien Tromeur-Dervout de l'université Lyon1. Ils m'ont suivie et se sont montrés disponibles tout au long de la thèse. Leur expérience m'a été indispensable jusqu'à la fin.

Je tiens également à remercier tout particulièrement Michel Kern, sans qui je n'aurais sans doute pas terminé cette thèse, et Jérôme Jaffré, directeur du projet ESTIME, qui m'ont accueillie au sein de ce projet à l'INRIA pendant quelques temps, ainsi que l'ensemble des personnes de ce projet. J'y ai trouvé des conseils avisés et une ambiance chaleureuse.

Mes remerciements vont au Professeur Yuri Vassilevski, de l'université de Moscou, pour ses compétences numériques et pédagogiques, dont j'ai pu bénéficier.

Toute ma gratitude va à Olivier Gipouloux, Maître de Conférences à l'université de Saint-Etienne, pour son aide dans la partie modélisation et la patience dont il a fait preuve à mon égard.

Je n'oublierai certainement pas enfin de remercier tout le personnel du laboratoire CDCSP de l'université Lyon1 avec qui j'ai eu grand plaisir à travailler ces trois dernières années.

Enfin, je remercie ma famille qui m'a soutenue et encouragée durant ces trois années.

## Résumé

Nous nous plaçons d'une part dans le cadre d'un stockage de déchets radioactifs en milieu géologique profond. L'une des caractéristiques principale de cet éventuel stockage est l'enfouir au sein d'une couche géologique de faible perméabilité. Nous étudions un modèle de transport en champ lointain par homogénéisation des termes sources. Deux modèles, par développement asymptotique d'ordre 0 et un, sont présentés. Des tests numériques sont effectués pour valider cette approche et de nouvelles études de modèles par homogénéisation des termes sources sont suggérées.

D'autre part, nous développons une méthodologie numérique qui consiste à accélérer une méthode de décomposition de domaine, en l'occurrence celle de Schwarz, par la technique d'Aitken. Cette accélération repose sur le constat du comportement purement linéaire de l'erreur sur les interfaces artificielles. Nous appliquons cette méthodologie à un couplage entre éléments finis et méthodes spectrales dans le cadre d'un problème de convection-diffusion hétérogène. Nous développons un algorithme parallèle à deux niveaux, celui de la décomposition de domaine et celui des solveurs locaux. De plus, nous testons deux façons d'accélérer la convergence de méthodes de Krylov dont nous nous servons pour résoudre les problèmes locaux : d'un côté nous utilisons un préconditionnement par grille grossière, de l'autre, nous effectuons une projection dans l'espace de Krylov avant de résoudre le problème local. Enfin, nous résolvons un problème elliptique non convexe par des méthodes spectrales par collocation grâce à cette méthodologie.

**Mots clés** : Environnement, Pollution, Géohydrologie, Homogénéisation, méthodes asymptotiques, méthodes de décomposition de domaine, méthodes spectrales, algorithmes parallèles.

On the one part, our topic deals with a radioactive waste storage in a deep geological medium. A macroscopic transport model obtained by homogenization of the source terms is studied. This approach is checked with an engineering tool. On the other part, a numerical methodology is developed, which consists in speeding up a domain decomposition method thanks to Aitken technique. This methodology is applied to a coupling between finite element method and a spectral method. A parallel version of the algorithm is implemented on the domain decomposition method stage and on the local solver stage. At last, an elliptic non convex problem is solved by collocation spectral methods with this methodology.

**Keywords** : Environment, Pollution, Geohydrology, Homogenization, Asymptotic methods, Domain decomposition methods, Spectral Element Method, Parallel Algorithms.

**AMS classification** : 62P12,91B76,20B40,76M50,76M45, 65M70,65M55,65F10,68W10.

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>11</b>
1.1	Physique du problème . . . . .	12
1.1.1	Caractéristiques et modèles d'un milieu poreux . . . . .	12
1.1.2	Quelques mots sur le stockage souterrain de déchets radioactifs . . . . .	14
1.2	Thématiques étudiées . . . . .	18
<b>2</b>	<b>Homogénéisation des termes source du transport de contaminants</b>	<b>22</b>
2.1	Introduction . . . . .	22
2.2	Cadre simplifié pour l'étude mathématique du modèle de transport par homogénéisation . . . . .	22
2.3	Modèle global du comportement du site de stockage des déchets nucléaires obtenu par homogénéisation des termes source . . . . .	24
2.3.1	Renormalisation du modèle de convection-diffusion . . . . .	24
2.3.2	Modèle homogénéisé valable sur des temps longs . . . . .	26
2.4	La technique du développement asymptotique . . . . .	28
2.4.1	Les problèmes auxiliaires . . . . .	28
2.4.2	Solution du problème extérieur . . . . .	31
2.4.3	Estimations d'erreurs du développement . . . . .	32
2.4.4	Premières conclusions sur le développement asymptotique . . . . .	33
2.5	Validation numérique de la technique de changement d'échelle décrite dans les sections précédentes . . . . .	34
2.5.1	Un modèle de diffusion monocouche . . . . .	35
2.5.2	Un cas de diffusion multicouches . . . . .	46
2.6	Adaptation des modèles au cas hétérogène . . . . .	57
2.6.1	Les modèles . . . . .	57
2.6.2	Validation numérique . . . . .	60
2.7	Conclusion . . . . .	63
<b>3</b>	<b>Description de la méthodologie développée</b>	<b>69</b>
3.1	Introduction . . . . .	69
3.2	La correspondance de Dirichlet-Neumann . . . . .	69
3.3	Décomposition de domaine de Schwarz . . . . .	73

3.3.1	Quelques rappels sur l'algorithme de Neumann-Dirichlet sans recouvrement . . . . .	74
3.3.2	L'algorithme de Schwarz généralisé . . . . .	77
3.3.3	Décomposition de domaine en maillage non conforme . . . . .	80
3.4	Accélération de la convergence de l'algorithme de Schwarz par la technique d'Aitken . . . . .	81
3.4.1	Accélération de la convergence d'une suite par la technique d'Aitken	81
3.4.2	Illustration pour l'algorithme de Schwarz dans le cas 1D . . . . .	82
3.4.3	Illustration pour l'algorithme de Schwarz dans le cas 2D . . . . .	86
3.5	Exemple en 2D dans le cas d'un maillage conforme . . . . .	89
3.5.1	L'algorithme de Schwarz appliqué à (2.28)–(2.33) . . . . .	89
3.5.2	La technique d'Aitken appliquée à l'algorithme de Schwarz (3.75)–(3.83) . . . . .	91
3.6	Traitement d'une décomposition de domaine en maillage non conforme . .	93
3.6.1	Cas d'un transfert d'un maillage régulier vers un maillage structuré non régulier ou un maillage non structuré . . . . .	96
3.6.2	Cas d'un transfert structuré non régulier vers un maillage structuré régulier . . . . .	97
3.6.3	Calcul des modes de la trace itérée sur l'interface . . . . .	98
3.7	Conclusion . . . . .	99
<b>4</b>	<b>Application d'Aitken-Schwarz sur des domaines non conformes pour la résolution d'une EDP de convection-diffusion</b>	<b>103</b>
4.1	Introduction . . . . .	103
4.2	Formulation et discrétisations du modèle . . . . .	104
4.2.1	Formulation variationnelle du modèle mathématique . . . . .	104
4.2.2	Maillages utilisés pour les discrétisations . . . . .	105
4.2.3	Méthodes éléments finis mixtes et éléments finis mixtes hybrides . .	105
4.2.4	Discrétisation spectrale par des polynômes de Chebychev . . . . .	108
4.3	Couplage éléments finis mixtes / éléments spectraux . . . . .	110
4.3.1	Solution itérative des systèmes couplés EFM / ES . . . . .	111
4.3.2	Solution du couplage EFM / ES par l'accélération par la technique d'Aitken . . . . .	112
4.4	Méthodes de résolution dans les sous-domaines . . . . .	112
4.4.1	Résolution des systèmes EFM . . . . .	113
4.4.2	Résolution des systèmes ES . . . . .	116
4.5	Résultats numériques et parallèles . . . . .	123
4.5.1	Résultats Numériques . . . . .	123
4.5.2	Résultats sur l'aspect parallélisation . . . . .	127
4.5.3	Couplage parallèle EFM/ES via Aitken-Schwarz . . . . .	130
4.6	Conclusion . . . . .	133

<b>5</b>	<b>Des problèmes non convexes résolus par méthodes spectrales</b>	<b>139</b>
5.1	Introduction . . . . .	139
5.2	Discretisations . . . . .	140
5.2.1	Méthode de Fourier . . . . .	140
5.2.2	Méthode de Chebychev . . . . .	141
5.2.3	Couplage sur les interfaces . . . . .	142
5.3	Solutions techniques . . . . .	144
5.3.1	Condition aux limites sur l'interface . . . . .	144
5.3.2	Couplage grâce à l'algorithme Aitken-Schwarz . . . . .	144
5.4	Premières applications . . . . .	146
5.4.1	Cas avec solutions analytiques . . . . .	146
5.4.2	Un cas avec des coefficients hétérogènes . . . . .	151
5.5	Problèmes auxiliaires . . . . .	154
5.5.1	Les problèmes spécifiques posés par les problèmes auxiliaires par rapport à notre méthodologie . . . . .	155
5.5.2	Condition de compatibilité de flux et algorithme de décomposition de domaine . . . . .	156
5.5.3	Application aux problèmes (2.21) et (2.23), $k=1$ . . . . .	157
5.5.4	Les problèmes auxiliaires (2.21) et (2.23), $k=2$ . . . . .	158
5.6	Conclusion . . . . .	161
<b>6</b>	<b>Conclusion</b>	<b>165</b>

# Liste des tableaux

2.1	Précision relative en $\ \cdot\ _{L^\infty}$ de la simulation d'ordre 1 par rapport à la référence en fonction de la valeur de $\epsilon$ . . . . .	46
2.2	Précision relative en $\ \cdot\ _{L^\infty}$ de la simulation d'ordre 0 par rapport à la référence en fonction de la valeur de $\epsilon$ . . . . .	46
4.1	Influence du nombre de directions de descente de GMRES pour converger .	119
4.2	Temps d'exécution pour résoudre un système linéaire de matrice de la forme représentée en Figure 4.2 en fonction de la taille des sous-blocs factorisés par PILUT . . . . .	119
4.3	Influence du seuil de tolérance de PILUT sur la convergence de GMRES .	120
4.4	Temps d'exécution pour résoudre un système linéaire de matrice de la forme (4.2) avec préconditionnement par PILUT . . . . .	120
4.5	Calcul sur quatre processeurs : divers temps de calcul et précision des approximations. . . . .	125
4.6	4 processeurs sur ordinateur A : robustesse du solveur EFM en fonction des coefficients de diffusion hétérogènes ( données par itération ND). . . .	126
4.7	exécution sur 12 processeurs : robustesse du solveur EFM vis à vis du champ de convection (données par itérations ND). . . . .	126
4.8	Speed-up du preconditionnement, de l'initialisation et des solutions itératives des problèmes EFM sur l'ordinateur A avec 100mbit/s de bande passante .	129
4.9	Temps de résolutions du solveur ES sur les machines A et B pour différents maillages $N_x \times N_y$ . . . . .	135
4.10	Temps d'exécution du solveur ES sur les machines A et B selon les dimensions de l'espace de Krylov . . . . .	136
4.11	Performances sur une itération en temps dans le cas hétérogène . . . . .	136
5.1	Précision (différence en $\ \cdot\ _{L^\infty}$ entre la solution analytique et la solution itérée) et vitesse de convergence de la méthode numérique si la solution est $u : x, y \rightarrow \sin(x)\sin(y)$ . . . . .	148
5.2	Précision (différence en $\ \cdot\ _{L^\infty}$ entre la solution analytique et la solution itérée) et vitesse de convergence de la méthode numérique si la solution est $u : (y_1, y_2) \rightarrow y_1^3(y_1 - \pi)^3 y_2$ . . . . .	151
5.3	Convergence des algorithmes de Schwarz et Aitken-Schwarz en fonction de la régularisation . . . . .	152

# Table des figures

1.1	Classification des déchets radioactifs en France . . . . .	14
1.2	Position d'un stockage des déchets nucléaires en milieu géologique profond	16
1.3	Structure d'un stockage des déchets nucléaires en milieu géologique profond	17
1.4	Quelques alvéoles qui font partie d'un module . . . . .	18
2.1	Coupe verticale 2D avec hypothèse de disposition périodique des modules . .	23
2.2	Dimensions du domaine d'étude après renormalisation . . . . .	25
2.3	Dimensions d'un module $M_\epsilon$ après renormalisation . . . . .	25
2.4	Dimensions d'un module à l'échelle $y$ . . . . .	25
2.5	Le domaine intérieur $G_\epsilon$ et les hyper-plans $\Sigma_\epsilon^+$ et $\Sigma_\epsilon^-$ qui le délimitent . . .	29
2.6	La bande infinie $H_\epsilon$ support des problèmes auxiliaires . . . . .	29
2.7	Caractéristiques du cas test défini avec l'Andra, nombre de modules = 15 .	36
2.8	Relachement en iode 129 au cours du temps . . . . .	36
2.9	Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 de la simulation détaillée pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps $t = 5000$ ans . . . . .	39
2.10	Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 de la simulation détaillée pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps $t = 50000$ ans . . . . .	39
2.11	Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 de la simulation détaillée pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps $t = 100000$ ans . . . . .	40
2.12	Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 de la simulation détaillée pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps $t = 200000$ ans . . . . .	40
2.13	Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 de la simulation détaillée pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps $t = 1000000$ ans . . . . .	41
2.14	Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 15 modules, diffusion ho- mogène, source iode (Fig. 2.8), au temps $t = 5000$ ans . . . . .	41
2.15	Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 15 modules, diffusion ho- mogène, source iode (Fig. 2.8), au temps $t = 50000$ ans . . . . .	42

2.16	Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps $t = 100000$ ans . . . . .	42
2.17	Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps $t = 200000$ ans . . . . .	43
2.18	Evolution d'une source de type créneau au cours du temps . . . . .	43
2.19	Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps $t = 1000000$ ans . . . . .	44
2.20	Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, source iode (Fig. 2.8), au temps $t = 5000$ ans . . . . .	44
2.21	Comparaison des coupes verticales des valeurs en base log10 des 3 simulations pour des distances de recollement respectivement de $\varepsilon \log(1/\varepsilon)$ (à gauche) et $\varepsilon$ (à droite) pour l'ordre 1 pour 60 modules, diffusion homogène, source de type créneau, au temps $t = 50000$ ans . . . . .	45
2.22	Comparaison des coupes verticales des valeurs en base log10 des 3 simulations pour des distances de recollement de $\varepsilon \log(1/\varepsilon)$ (à gauche) et $\varepsilon$ (à droite) pour 60 modules, diffusion homogène, source de type créneau, au temps $t = 100000$ ans . . . . .	47
2.23	Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 de la simulation détaillée pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps $t = 5000$ ans . . . . .	49
2.24	Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 de la simulation détaillée pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps $t = 50000$ ans . . . . .	49
2.25	Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 de la simulation détaillée pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps $t = 100000$ ans . . . . .	50
2.26	Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 de la simulation détaillée pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps $t = 200000$ ans . . . . .	50
2.27	Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 de la simulation détaillée pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps $t = 1000000$ ans . . . . .	51
2.28	Comparaison des coupes verticales des valeurs en base log10 des 3 simulations au temps $t = 5000$ ans (à gauche) et $t=50000$ ans (à droite) pour 60 modules, hauteur $G_\varepsilon = \varepsilon \log(1/\varepsilon)$ pour calcul ordre 1, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18) . . . . .	51
2.29	Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps $t = 5000$ ans . . . . .	52

2.30	Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps $t = 20000$ ans . . . . .	52
2.31	Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps $t = 50000$ ans . . . . .	53
2.32	Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps $t = 100000$ ans . . . . .	53
2.33	Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps $t = 1000000$ ans . . . . .	54
2.34	Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, $c_\varepsilon^0$ modifié, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps $t = 5000$ ans . . . . .	54
2.35	Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, $c_\varepsilon^0$ modifié, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps $t = 20000$ ans . . . . .	55
2.36	Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, $c_\varepsilon^0$ modifié, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps $t = 50000$ ans . . . . .	55
2.37	Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, $c_\varepsilon^0$ modifié, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps $t = 100000$ ans . . . . .	56
2.38	Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, $c_\varepsilon^0$ modifié, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps $t = 1000000$ ans . . . . .	56
2.39	Les trois couches du sol contenant les modules : nouvelle adimensionalisation . . . . .	57
2.40	Comparaison des coupes horizontale (gauche) et verticale (droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations, 30 modules, nouveau modèle, diffusion hétérogène, source iode, $t = 5.10^3$ ans . . . . .	61
2.41	Comparaison des coupes horizontale (gauche) et verticale (droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations, 30 modules, nouveau modèle, diffusion hétérogène, source iode, $t = 2.10^4$ ans . . . . .	61
2.42	Comparaison des coupes horizontale (gauche) et verticale (droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations, 30 modules, nouveau modèle, diffusion hétérogène, source iode, $t = 5.10^4$ ans . . . . .	62
2.43	Comparaison des coupes horizontale (gauche) et verticale (droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations, 30 modules, nouveau modèle, diffusion hétérogène, source iode, $t = 10^5$ ans (gauche), $t = 10^6$ (droite) . . . . .	62
3.1	Une décomposition de domaine en deux sous-domaines sans recouvrement . . . . .	75

3.2	Décomposition de domaine de niveau 2 utilisée pour la simulation du terme d'ordre 0 de l'expansion asymptotique . . . . .	90
3.3	Accélération de la convergence de Schwarz par Aitken appliquée au mode 0 pour le problème (2.28)–(2.33) . . . . .	92
3.4	Isovaleurs et représentation 3D de l'ordre 0 obtenues pour un pas de temps avec l'algorithme ES . . . . .	93
3.5	Isovaleurs et représentation 3D de l'ordre 0 obtenues pour 100 pas de temps avec l'algorithme ES . . . . .	94
4.1	<i>Le maillage EFM non structuré et la grille ES rectangulaire.</i> . . . . .	106
4.2	Structure de la matrice $\Sigma$ spectrale . . . . .	117
4.3	<i>La solution calculée du problème dont la solution analytique est <math>u : (x, y) \rightarrow (x + 3x^2 + 4x^3)(3y + 7y^2 + 7y^3)</math></i> . . . . .	124
4.4	<i>Partition du sous-domaine avec deux inclusions et un trou en 4 sous-domaines.</i> . . . . .	126
4.5	<i>Le domaines avec deux inclusions et un trou : le maillage et les solutions</i> .	128
4.6	Effet de l'accélération par Aitken sur l'erreur (différence entre deux itérées de la trace relaxée sur l'interface) en norme $\ \cdot\ _\infty$ . . . . .	131
4.7	Nombre d'itérations nouvelles de GCR selon l'utilisation ou pas de l'accélération par Aitken . . . . .	132
5.1	Décomposition de domaine sans recouvrement destinée à simuler un problème non convexe . . . . .	140
5.2	Un exemple de l'effet de la régularisation appliquée à la condition aux limites sur $\Gamma_1^+ \cup \text{Nord} \cup \Gamma_1^+$ lors de la résolution du problème dont la solution manufacturée est $u(x, y) = \sin(x) \sin(y)$ . . . . .	145
5.3	Erreur itérative modale sur l'interface en $\ \cdot\ _{L^\infty}$ pour le problème dont la solution est $u : x, y \rightarrow \sin(x) \sin(y)$ . . . . .	147
5.4	Erreur itérative modale sur l'interface en $\ \cdot\ _{L^\infty}$ accélérée par Aitken à la 18 <sup>ème</sup> itération pour le problème dont la solution est $u : x, y \rightarrow \sin(x) \sin(y)$ . . .	147
5.5	Erreur itérative sur l'interface physique en $\ \cdot\ _{L^\infty}$ accélérée par Aitken à la 18 <sup>ème</sup> itération pour le problème dont la solution est $u : x, y \rightarrow \sin(x) \sin(y)$ . . .	148
5.6	Erreur itérative modale sur l'interface en $\ \cdot\ _{L^\infty}$ pour le problème dont la solution est $u : x, y \rightarrow x^3(x - \pi)^3 y$ . . . . .	149
5.7	Erreur itérative modale sur l'interface en $\ \cdot\ _{L^\infty}$ accélérée par Aitken pour le problème dont la solution est $u : x, y \rightarrow x^3(x - \pi)^3 y$ . . . . .	150
5.8	Erreur itérative sur l'interface en $\ \cdot\ _{L^\infty}$ accélérée par Aitken pour le problème dont la solution est $u : x, y \rightarrow x^3(x - \pi)^3 y$ . . . . .	150
5.9	Zoom sur le maillage structuré non conforme utilisé lors de la résolution de problèmes non convexes . . . . .	152
5.10	Erreur itérative sur l'interface physique en $\ \cdot\ _{L^\infty}$ accélérée par Aitken pour le problème $P_H$ , $A^1 = 1$ , $A^2 = 0.1$ . . . . .	153

5.11	Comparaison entre les erreurs itératives sur l'interface physique en $\ \cdot\ _{L^\infty}$ des algorithmes de Schwarz et de Aitken-Schwarz pour le problème $P_H$ , $A^1 = 1$ , $A^2 = 0.1$ . . . . .	153
5.12	Isovaleurs autour de l'interface artificielle pour le problème $P_H$ , $A^1 = 1$ , $A^2 = 0.1$ . . . . .	154
5.13	Dans une coupe verticale 2D du domaine $\Omega$ avec disposition périodique des modules. Motif périodique . . . . .	155
5.14	Isovaleurs de la solution du problème (2.23), $k=1$ . . . . .	158
5.15	Accélération de la convergence itérative modale pour le problème (2.23) en $\ \cdot\ _\infty$ , $k=1$ . . . . .	159
5.16	Accélération de la convergence itérative pour le problème (2.23) en $\ \cdot\ _\infty$ , $k=1$ . . . . .	159
5.17	Isovaleurs de la solution du problème (2.23), $k=2$ , résolu par GMRES (à gauche) et résolu par le schéma . . . . .	160



# Chapitre 1

## Introduction

Ce mémoire est consacré à la question du transport de contaminants en milieux poreux. Plus généralement, les simulations de phénomènes en milieux poreux se sont considérablement développées ces dernières années notamment en raison d'un intérêt accru pour les questions environnementales. Notre cadre sera celui de la gestion des déchets radioactifs, accumulés depuis la fin des années 60 pour des raisons tant civiles que militaires. La question des déchets de haute activité et à vie longue (jusqu'à plusieurs millions d'années) est importante et représente un enjeu crucial pour l'avenir. En France, la loi de décembre 1991 définit trois pistes de recherche sur ce sujet : la transmutation des déchets radioactifs en isotopes moins dangereux, leur entreposage pendant plusieurs dizaines d'années en surface ou à faible profondeur et un stockage des déchets radioactifs en milieu géologique profond. L'Andra (Agence nationale des déchets radioactifs) est chargée de la mise en oeuvre de ce programme de recherche et doit rendre ses conclusions en 2006. Le groupe de recherche MoMas (Modélisation Mathématique et simulations numériques liées aux problèmes de gestion des déchets nucléaires) regroupe des compétences en modélisation mathématique et méthodes numériques. Il cherche à apporter des réponses aux questions de modélisation mathématique et numérique soulevées dans le cadre de cette loi.

De nombreux problèmes scientifiques posés par le stockage en milieu géologique profond mobilisent des compétences pluri-disciplinaires, dans lesquelles les mathématiques interviennent. Nous pouvons évoquer trois grandes familles de problèmes mathématiques :

- la modélisation : le stockage des déchets en milieu souterrain met en jeu des couplages de phénomènes physiques spécifiques. Les physiciens et les mathématiciens joignent leurs efforts pour modéliser des phénomènes ayant lieu à l'échelle microscopique, telle l'adsorption, ou à l'échelle macroscopique, tels les modèles de "champs lointains".
- le traitement des données physiques : les paramètres physiques qui caractérisent les modèles nécessitent l'acquisition de données physiques. Etant données les dimensions du domaine étudié pour un modèle global, par exemple, soit plusieurs kilomètres de longueur par plusieurs kilomètres de largeur par 800 mètres de profondeur, ces données sont nécessairement ponctuelles. Elles nécessitent un traitement afin d'ob-

tenir des paramètres sur tout le domaine. Cela s'effectue au moyen de problèmes inverses. Un autre champ de recherche consiste en la détermination de la sensibilité des modèles vis à vis des paramètres ou la détermination de l'influence de l'incertitude des mesures sur la détermination de ces paramètres.

- la simulation : étant donné la durée et l'emplacement des phénomènes, nous n'avons d'autre choix, en l'absence de possibilité d'observations et d'expériences à ces échelles et dans ces conditions, que de faire appel aux simulations numériques pour évaluer l'impact d'un site de déchets nucléaires en milieu géologique profond. De plus, nous nous trouvons confrontés à la limite des ressources informatiques actuelles pour modéliser des scénarii de "sûreté" sur des temps aussi longs de simulation. Il faut donc tenter d'optimiser les méthodes numériques dédiées à ce type de calcul, sans sacrifier aux impératifs de précision. Nous reviendrons plus en détail sur cet aspect dans la section suivante.

Nous nous cantonnerons à deux aspects mathématiques du vaste "chantier" que constitue le stockage de déchets nucléaires en milieu géologique profond. D'une part, nous nous intéresserons à la modélisation du transport des contaminants en essayant de rendre compte, à l'échelle macroscopique, de l'effet d'un relâchement des conteneurs. D'autre part, nous essaierons de développer une méthodologie numérique susceptible d'améliorer la simulation du transport de contaminants pour un modèle de convection-diffusion classique.

## 1.1 Physique du problème

Le cadre physique de notre problème est celui d'un milieu poreux saturé. Nous allons d'abord définir quelques caractéristiques propres à ce milieu.

### 1.1.1 Caractéristiques et modèles d'un milieu poreux

Le modèle mathématique que nous considérons consiste a priori en un modèle de transport de contaminant (1.1) régi par un modèle d'écoulement défini en (1.4).

L'équation de transport de contaminant est :

$$\frac{\omega R \partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (-A \nabla C) + V \nabla C + \lambda \omega R C = Q \quad \text{dans } [0, T] \times \Omega \quad (1.1)$$

où

- $C$  est la concentration d'un radionucléide en solution, ( $\text{ML}^{-3}$ ),
- $V$  la vitesse de Darcy, ( $\text{LT}^{-1}$ ),
- $A$  le tenseur de dispersion-diffusion, ( $\text{L}^2\text{T}^{-1}$ ),
- $\omega$  la porosité totale,
- $\lambda$  la constante de dégradation, ( $\text{T}^{-1}$ ),
- $R$  le facteur de retard,

- $Q$  un terme source ( $\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$ ).

La **porosité totale** d'un matériau définit la densité des pores pouvant être occupée par un fluide. Elle s'exprime par :

$$\omega = \frac{\text{Volume des vides}}{\text{Volume total de l'échantillon}}$$

En milieu saturé, l'eau occupe tous les pores. Ainsi, la proportion en eau du matériau est égale à la porosité totale du matériau.

Le **tenseur de dispersion-diffusion** se décompose selon (1.2) :

$$A = A_c + A_m \tag{1.2}$$

où

- $A_c$  est le tenseur de dispersion cinématique :

$$A_c = \|V\|(\alpha_l E(V) + \alpha_t (I - E(V)))$$

où  $E_{i,j} = \frac{V_i V_j}{\|V\|^2}$   $i, j = 1, 2$ , la dispersivité longitudinale (L) est  $\alpha_l$ ,  $\alpha_t$  est la dispersivité transversale (L). La dispersion cinématique est un phénomène de mélange lié à l'hétérogénéité du champ de vitesse de l'écoulement à l'échelle microscopique [10].

- $A_m$  est le tenseur de diffusion moléculaire dans le milieu poreux ( $\text{L}^2\text{T}^{-1}$ ).

La vitesse  $V$  de l'écoulement en milieu poreux se modélise généralement par l'**équation de Darcy** [8]. Elle exprime la vitesse de filtration en régime transitoire ou permanent en une fonction linéaire du gradient de pression et de la gravité. Pour un fluide incompressible, la loi de Darcy s'écrit sous la forme générale (1.3) :

$$V = -\frac{k}{\mu}(\nabla p + \rho g \nabla z) \text{ dans } \Omega \tag{1.3}$$

où

- $p$  est la pression, ( $\text{ML}^{-1}\text{T}^{-2}$ ),
- $k$  la perméabilité intrinsèque du milieu, ( $\text{L}^2$ ),
- $\mu$  la viscosité du fluide, ( $\text{ML}^{-1}\text{T}^{-1}$ ),
- $\rho$  la masse volumique, ( $\text{ML}^{-3}$ ),
- $g$  l'accélération de la pesanteur, ( $\text{LT}^{-2}$ ),
- $z$  est la profondeur, (L),

L'équation d'écoulement est :

$$\nabla \cdot \left( -\frac{k}{\mu}(\nabla p + \rho g \nabla z) \right) = q, \text{ dans } \Omega \tag{1.4}$$

Si le milieu poreux est isotrope, les coefficients de la perméabilité intrinsèque sont des scalaires positifs.

	<b>Vie courte</b> <i>période &lt; 30 ans</i>	<b>Vie longue</b> <i>période &gt; 30 ans</i>
<b>Très faible activité (TFA)</b>	Centre de stockage TFA	
<b>Faible activité (FA)</b>	Centre de stockage de l'Aube	Etudes en cours pour les déchets graphites et les déchets radifères
<b>Moyenne activité (MA)</b>		
<b>Haute activité (HA)</b>	Etudes en cours (loi du 30 décembre 1991)	

FIG. 1.1 – Classification des déchets radioactifs en France

Si le milieu poreux dans l'espace à trois dimensions est anisotrope, la perméabilité est décrite par un tenseur symétrique défini positif. Si l'écoulement est parallèle au gradient de charge, et si on se place dans le repère de coordonnées dont les axes sont formés par les directions de l'écoulement, le tenseur de perméabilité se réduit à ses composantes diagonales.

### 1.1.2 Quelques mots sur le stockage souterrain de déchets radioactifs

L'utilisation des éléments radioactifs pour des applications de santé, nucléaires ou pour la production d'énergie, génère des déchets radioactifs. Ils sont classés selon deux critères :  
– l'intensité de leur radioactivité. Elle conditionne naturellement l'importance des protections à mettre en oeuvre pour bien les gérer.  
– la période radioactive des isotopes radioactifs présents. Elle définit leur durée de radioactivité et donc de nuisance potentielle.

Les déchets sont alors classés selon la figure 1.1 :

Les deux premiers types de déchets (très faible activité et faible activité) bénéficient actuellement de centres de confinement opérationnels. Aucune solution sur le long terme n'est actuellement opérationnelle en ce qui concerne les déchets à vie longue (moyenne et haute activité). La possibilité d'un stockage des déchets à vie longue, de moyenne ou haute activité, en milieu géologique profond est actuellement à l'étude, comme l'a prévu la loi du 30 décembre 1991.

Commençons par caractériser le domaine d'étude, envisagé pour ce type de stockage. Il représente toute la région dans laquelle on doit étudier les effets du stockage. Il a une longueur et une largeur de quelques kilomètres et une profondeur d'environ 800 mètres. Le milieu géologique se compose de plusieurs couches qui peuvent être très hétérogènes. Le stockage des déchets nucléaires est supposé être enfoui dans une couche, dite hôte, très homogène et de faible perméabilité. Le site français retenu pour implanter un laboratoire d'étude et répondant à ce critère est situé à une profondeur d'environ 500 mètres au sein d'une couche d'argilites dont l'épaisseur est d'environ 150 mètres, plus précisément la couche du **callovo-oxfordien** (composée d'environ 45 pourcents de minéraux argileux,

de 25 pourcents de silicates et de 30 pourcents de carbonates). Il y a donc une forte diversité des échelles spatiales de la géométrie. Diverses études sur le comportement de l'argile en terme de processus de diffusion et de convection ont été menées dans par exemple [1].

Les couches adjacentes, aquifères, hétérogènes, ont une perméabilité bien plus importante. Le modèle de transport dans ces couches est un modèle de convection-diffusion. Le modèle de transport dans la couche hôte, se caractérise lui par un comportement diffusif dominant. L'étude des problèmes posés par la présence de couches différentes sera le sujet de la première partie de ce travail.

Le site de stockage des déchets nucléaires est réparti sur une aire plane d'environ  $1500 \times 1500$  mètres carré et a une épaisseur de l'ordre de 10 mètres. De manière très générale, il s'agit d'un ensemble d'*alvéoles* contenant des *colis* de déchets. Ces *alvéoles* sont elles-même regroupées dans des *modules*. Quelques alvéoles et colis sont représentés sur la figure 1.4. Un ensemble de modules constitue une *zone de stockage*. Ces divers éléments sont reliés entre eux par un réseau de galeries souterraines. Un accès extérieur est aménagé via des puits verticaux traversant les couches géologiques. Les colis de déchets doivent être isolés. Les galeries doivent également être remblayées et les alvéoles scellées dès lors qu'il a été décidé de fermer le site de stockage. Ceci a naturellement pour but de restaurer les capacités initiales de confinement du milieu géologique.

Le seul moyen de prédire le comportement d'un site de stockage en milieu souterrain sur plusieurs millions d'années consiste à réaliser des simulations numériques. Nous voyons bien les difficultés auxquelles sont confrontés les numériciens lorsqu'il s'agit de simuler le comportement d'un site de stockage de déchets radioactifs en milieu géologique profond :

- diversité des échelles spatiales mises en jeu,
- couplages des phénomènes,
- la durée du phénomène de migration, très importante, alors que des phénomènes de plus courte durée ont lieu au niveau des colis.

La diversité des échelles spatiales mises en jeu peut suivre, par exemple, le classement suivant :

- le domaine entier qui constitue l'échelle **champ lointain**,
- le site de stockage, l'échelle **mésoscopique**,
- l'alvéole, l'échelle **champ proche**.

Toutefois, nous allons introduire dans notre étude d'autres échelles, dont nous allons nous servir en pratique. Ainsi, nous parlerons d'échelle du module, et de l'échelle de la zone de stockage. Ces deux échelles sont représentées au sein du stockage sur la figure 1.3.

Il existe des couplages de plusieurs phénomènes se produisant dans un même milieu, le couplage chimie-transport ou le couplage thermo-hydro-mécanique. Mais il existe également des couplages de phénomènes ayant lieu dans des milieux différents comme le couplage entre des roches et les fractures qui les traversent ou le couplage entre le milieu géologique et le site de stockage.

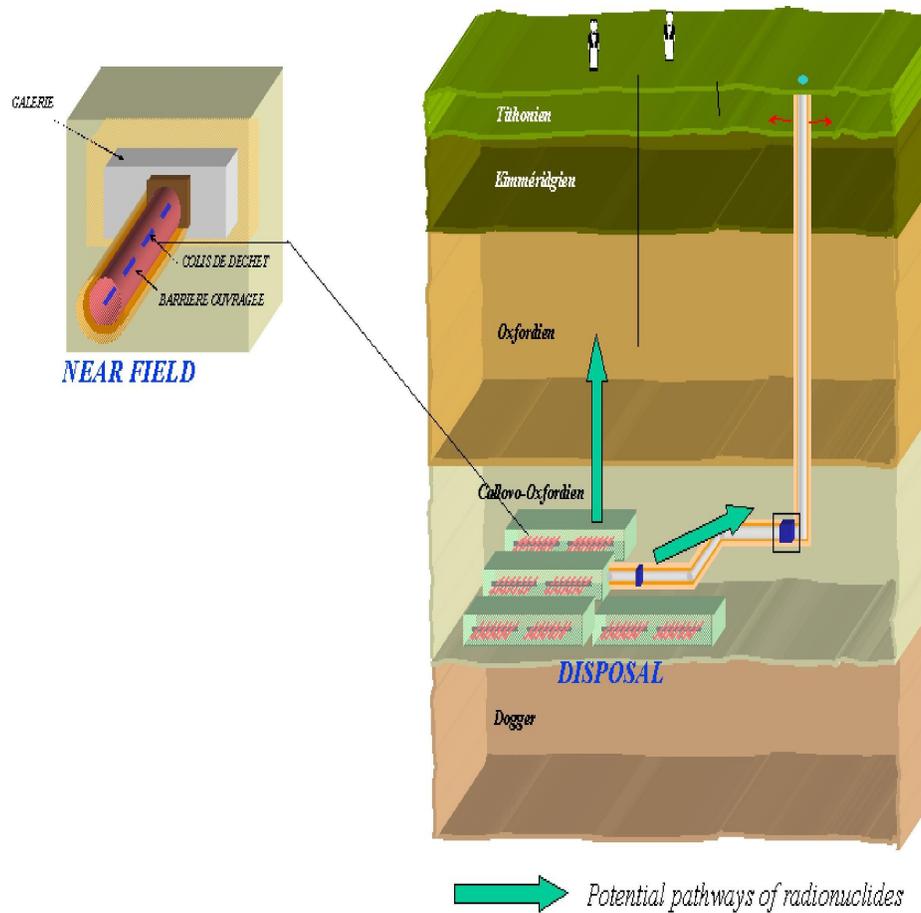


FIG. 1.2 – Position d'un stockage des déchets nucléaires en milieu géologique profond

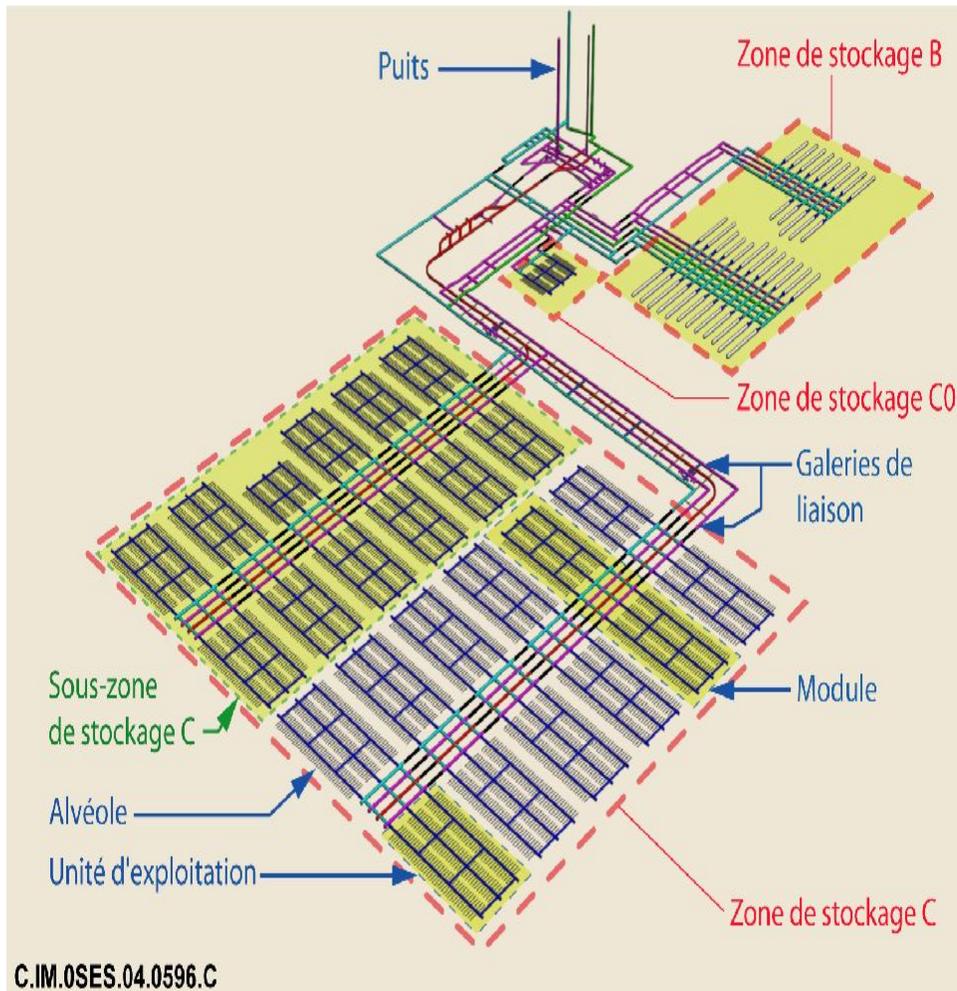


FIG. 1.3 – Structure d'un stockage des déchets nucléaires en milieu géologique profond

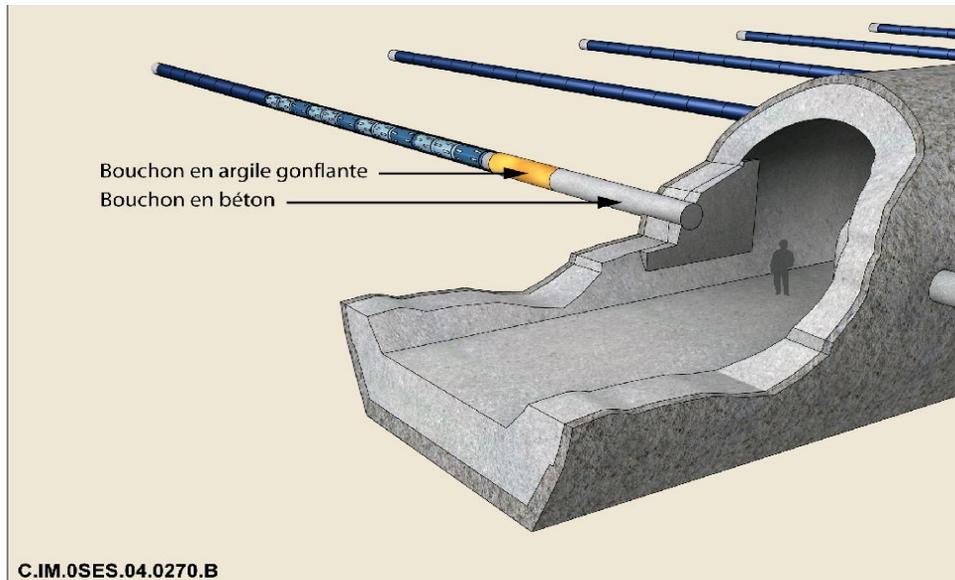


FIG. 1.4 – Quelques alvéoles qui font partie d'un module

La diversité des échelles de temps du phénomène rend difficile la prise en compte du relâchement des conteneurs dans une simulation champ lointain. La plupart du temps, une première simulation est effectuée au niveau de l'alvéole ou au niveau du module. Elle sert à calculer numériquement le flux volumique d'une alvéole ou d'un module, qui est alors incorporé dans un modèle champ lointain sous forme d'une densité localisée. L'ensemble de ces calculs nécessitent un temps CPU très important alors que plusieurs scénarii de sûreté sont à étudier.

## 1.2 Thématiques étudiées

Nous allons nous intéresser dans ce mémoire au phénomène du transport de radionucléides dans le milieu poreux. Actuellement, la prise en compte des divers aspects rendent les calculs coûteux et conduisent assez rapidement aux limites des calculateurs, surtout lorsqu'il s'agit de simuler en 3D. Nous allons donc aborder le phénomène du transport sous deux angles principaux :

- **La modélisation du transport de contaminants par homogénéisation des termes source** Il s'agit de développer un modèle mathématique qui tienne compte de la diversité des échelles spatiales et permette de prendre en compte les termes source dans une simulation avec un maillage de taille raisonnable. Nous effectuerons également une vérification numérique des résultats théoriques par les logiciels éléments finis standard dans ce domaine.
- **Le développement d'une méthodologie numérique** est une décomposition de domaine sans recouvrement en maillage non conforme dont la convergence est

accélérée grâce à ses propriétés comportementales. Nous rappelons que l'algorithme de Neumann-Dirichlet repose sur la correspondance de Dirichlet-Neumann, qui, à une donnée de Dirichlet sur l'interface associe une seule dérivée sur cette même interface. De manière classique, on peut montrer que l'on peut se ramener à une résolution sur les interfaces grâce au problème de Steklov-Poincaré. Surtout, nous rappelons que la convergence de cet algorithme est linéaire dans le cas de problèmes elliptiques linéaires, qu'ils soient symétriques ou non. Ainsi, nous pouvons appliquer la technique d'Aitken pour accélérer la convergence de l'algorithme de Neumann-Dirichlet. Cette technique d'accélération repose, comme nous le verrons, non pas sur une approximation de l'opérateur du problème de Steklov-Poincaré lui-même comme cela s'effectue souvent, mais sur un calcul ou une approximation de la matrice de transfert d'erreur entre les divers sous-domaines. Nous appliquerons cette méthode itérative d'Aitken-Schwarz aux deux cas suivants :

- (a) La prise en compte des couplages de processus de transport qui évoluent d'une part dans les couches aquifères, caractérisées par l'hétérogénéité de leur perméabilité, et la couche hôte, où le phénomène de diffusion est très prépondérant et homogène. Nous proposons d'utiliser dans cette couche homogène une méthode spectrale, qui convient parfaitement à la régularité de la solution dans cette couche. L'intérêt des méthodes spectrales réside dans le fait qu'un maillage de taille relativement faible suffit pour simuler de façon précise. Une telle méthode n'est plus adaptée dans les régions aquifères. C'est pourquoi nous proposons de coupler cette méthode spectrale avec une méthode éléments finis mixtes, adaptée aux régions aquifères hétérogènes et à la convection plus marquée. Le couplage s'effectuera via une méthode de décomposition de domaine sans recouvrement en maillage non conformes. Ceci ouvre la voie à la parallélisation du code que nous effectuerons à deux niveaux :
  - au niveau du couplage des deux méthodes,
  - au niveau de la résolution parallèle pour chaque méthode.
- (b) La résolution par méthode spectrale de certains problèmes définis sur un domaine à trous. Il s'agit en l'occurrence de problèmes elliptiques et périodiques induits par la modélisation du transport par homogénéisation des termes source. Nous souhaitons de plus réaliser une simulation précise de ces problèmes qui vont décrire les oscillations dues au relâchement en temps court. Tous ces éléments (régularité et périodicité de la solution de ces problèmes elliptiques, précision requise) nous conduisent à vouloir les résoudre par méthodes spectrales.



# **Partie 1** : Modélisation par homogénéisation des termes source

# Chapitre 2

## Homogénéisation des termes source du transport de contaminants

### 2.1 Introduction

Dans le cadre de scénarii de sûreté, il serait souhaitable de pouvoir travailler sur des modèles précis donnant le comportement à long terme d'un site de stockage de déchets nucléaires pour une durée de calcul jugée acceptable. C'est dans cette optique qu'une approche fondée sur la technique mathématique de l'homogénéisation a été développée dans [6] et [7].

La section 2.2 est consacrée au cadre mathématique de notre modélisation. Nous exposons l'adimensionnalisation du problème et le modèle homogénéisé qui en découle dans la section 2.3. Le modèle homogénéisé donne le comportement "moyen" du stockage sur des temps longs. Mais si nous voulons plus de précisions sur les oscillations de la concentration des radionucléides dues au relâchement des colis près de ceux-ci, alors un développement asymptotique d'ordre 1 au moins est nécessaire. Cela est exposé dans la section 2.4. Notre étude est complétée dans la section 2.5 par une validation numérique des modèles homogénéisés et d'ordre 1. Enfin, nous donnons quelques perspectives d'amélioration des modèles par homogénéisation des termes source de manière à ce qu'ils puissent être utilisés d'un point de vue ingénierie.

### 2.2 Cadre simplifié pour l'étude mathématique du modèle de transport par homogénéisation

Dans le cadre de l'homogénéisation, nous travaillerons dans une coupe transversale 2D du stockage. Précisons un peu nos notations.

Soit  $\Omega$  le domaine d'étude représenté Figure 2.1. Nous allons simplifier notre géométrie et supposer que le site de stockage est situé sur le plan médian  $\Sigma$ . Nous supposerons de plus que tous les modules de stockage ont les mêmes dimensions et sont disposés horizontalement de manière **périodique**, de période  $p$ . On suppose que le site géologique

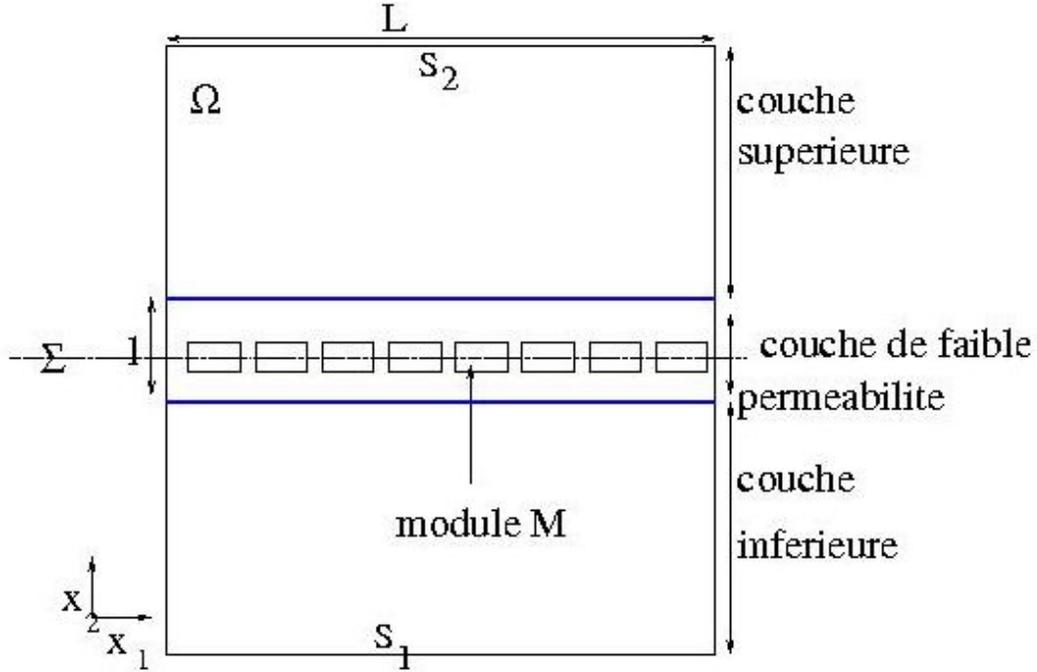


FIG. 2.1 – Coupe verticale 2D avec hypothèse de disposition périodique des modules

est de longueur  $L$  et que la couche d'argilites est d'épaisseur  $1$ ,  $1 \ll L$ . Soit  $M$  un seul module de stockage. L'ensemble du site de stockage est défini par  $B = \bigcup_{j \in J} M_j$ , où  $M_j = jp + M$  et  $J = \{j \in \mathbb{Z}, M_j \cap \Sigma \neq \emptyset\}$ . Soit également le bord d'un module  $\Gamma_j = \partial M_j$ . Nous supposons pour simplifier que la concentration en radionucléides est nulle à la surface  $S_2$  et qu'une condition de flux nul régit le fond du domaine  $S_1$ .

Nous pouvons modéliser mathématiquement le relâchement des conteneurs de deux façons. Soit, nous supposons que le milieu poreux  $\Omega$  a de nombreux trous correspondant aux modules. Le comportement du flux  $n \cdot \sigma$  est alors donné aux bords des modules, c'est à dire des trous. Soit, nous considérons les modules comme faisant partie intégrante du milieu poreux  $\Omega$ . Dans ce cas, chaque module est considéré comme un terme source  $q_j$  dont le support est le volume d'un module  $M_j$ . Pour ces deux formulations suivantes, nous utilisons alors la relation suivante :

$$\int_{M_j} q_j dx = \int_{\Gamma_j} (n \cdot \sigma) d\Gamma \quad (2.1)$$

Bien que ceci induise, comme nous le verrons plus loin, des difficultés numériques, nous avons choisi la première solution pour rester proche de la réalité des mesures physiques qui portent sur le flux émis par les colis.

## 2.3 Modèle global du comportement du site de stockage des déchets nucléaires obtenu par homogénéisation des termes source

Le terme homogénéisation a été utilisé pour la première fois en 1974 par I. Babuska dans le cadre numérique pour la simulation d'une distribution périodique de barres de réacteurs parallèles entre eux [3]. Depuis, l'homogénéisation caractérise généralement les changements d'échelle rigoureux du point de vue mathématique ou numérique. Elle s'est appliquée dans de nombreuses situations physiques, notamment les écoulements en milieu poreux. Nous avons caractérisé le domaine entier dans la section (1.1.2). Le domaine utilisé pour l'homogénéisation n'est qu'une partie du précédent. Il aura des conditions aux bords périodiques sur les faces latérales pour simplifier. Cette simplification produit une perturbation d'ordre  $\epsilon$  dans une zone proche de ces bords qui sera négligée car on s'intéresse principalement aux concentrations à la verticale des modules.

Nous allons nous intéresser au passage de l'échelle des modules, que l'on suppose disposés périodiquement, à l'échelle de la zone de stockage ou dans certains cas de l'échelle des différentes zones à l'échelle du site si celles-ci sont semblables et en nombre suffisamment important. Vu les dimensions horizontales des modules, nous pouvons ne considérer qu'une coupe 2D, transversale à la plus grande dimension de ceux-ci. Nous reprenons les notations introduites dans la section 1.1.1. Dans [7],  $\epsilon$  est l'ordre du rapport entre l'épaisseur de la couche d'argile et l'épaisseur du milieu géologique considéré. Ici, pour des raisons de facilité numérique, on sera conduit à prendre  $\epsilon$  comme étant l'inverse du nombre de modules disposés selon  $\Sigma$ . Soit  $x = (x_1, x_2)$  la variable en espace. Introduisons alors  $y = (y_1, y_2)$  où  $y = \frac{x}{\epsilon}$ , est appelée *variable rapide*. Elle peut être considérée comme la variable d'espace en "champ proche".

### 2.3.1 Renormalisation du modèle de convection-diffusion

Tous les paramètres sont renormalisés selon  $\epsilon$ , où  $\epsilon$  est exactement l'inverse du nombre de modules dans la direction  $x_1$  ainsi que l'indique la Figure (2.2). Soit donc  $M_\epsilon$ , un module renormalisé, cf. Figure (2.3). Le module est représenté à l'échelle  $y$  sur la Figure (2.4). Notons que l'épaisseur d'un module est d'ordre  $\epsilon^\beta$ ,  $\beta > 1$ . Posons alors  $B_\epsilon = \bigcup_{\alpha \in J} M_\epsilon^\alpha$ , où  $J = \{\alpha \in \mathbb{Z}, M_\epsilon^\alpha \cap \Sigma \neq \emptyset\}$  et  $M_\epsilon^\alpha = \epsilon\alpha + M_\epsilon$ .  $B_\epsilon$  représente l'ensemble des modules. L'ensemble des bords des modules sera noté  $\Gamma_\epsilon = \partial B_\epsilon$ . Soit  $\Omega_\epsilon = \Omega \setminus \bar{B}_\epsilon$  le domaine entourant les modules renormalisés. Le domaine lui-même dépend de  $\epsilon$  car la taille des trous change avec  $\epsilon$ .

Soit  $A$  le tenseur de diffusion décrit par deux matrices symétriques définies positives :

$$A(y_2) = \begin{cases} A^h & \text{si } y_2 \text{ se situe dans la couche hôte} \\ A^{nh} & \text{sinon} \end{cases}$$

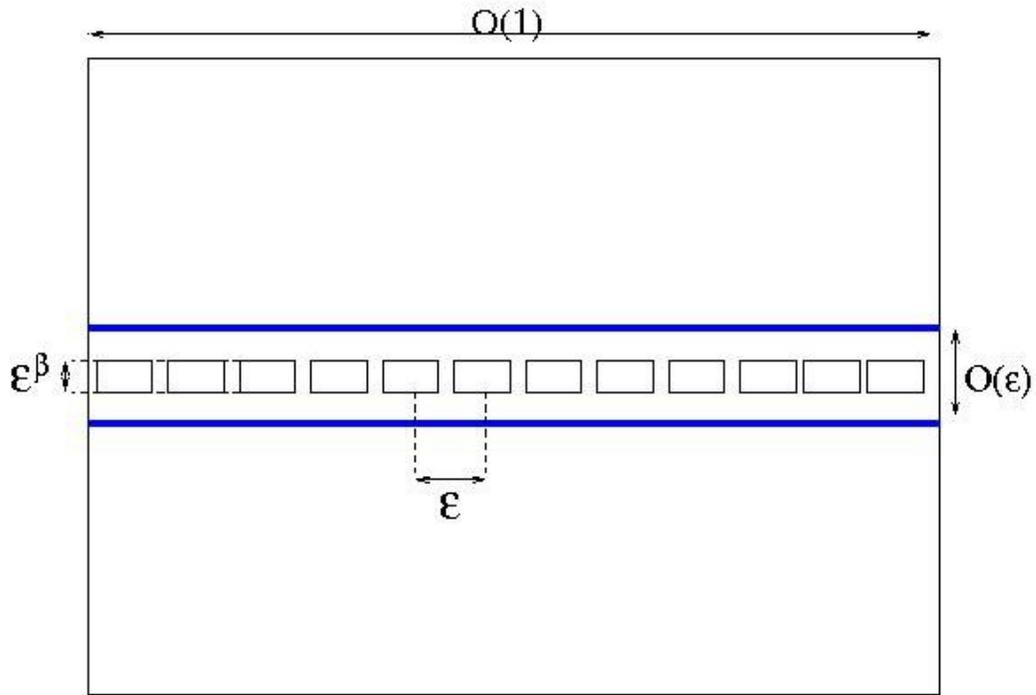


FIG. 2.2 – Dimensions du domaine d'étude après renormalisation

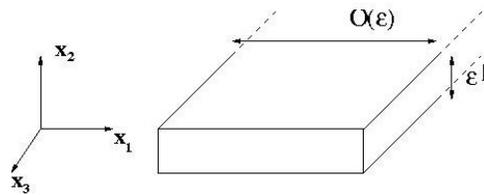


FIG. 2.3 – Dimensions d'un module  $M_\epsilon$  après renormalisation

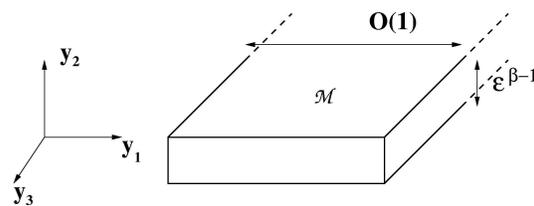


FIG. 2.4 – Dimensions d'un module à l'échelle  $y$

La matrice de diffusion est réécrite dans la variable d'espace initiale  $x$  sous la forme :  $A^\epsilon(x) = A(x_2/\epsilon)$ .

La vitesse de Darcy est décrite sous une forme similaire :

$$v(x, y_2, t) = \begin{cases} v^h(x, t) & \text{si } y_2 \text{ se situe dans la couche hôte} \\ v^{nh}(x, t) & \text{sinon} \end{cases}$$

Nous posons de même  $v^\epsilon(x, t) = v(x, x_2/\epsilon, t)$ . Naturellement, nous supposons la condition de divergence nulle de la vitesse de Darcy, id est  $div_x v^\epsilon = 0$ .

De même enfin, nous définissons la porosité du milieu par :

$$\omega(y_2) = \begin{cases} \omega^h & \text{si } y_2 \text{ se situe dans la couche hôte} \\ \omega^{nh} & \text{sinon} \end{cases}$$

et nous posons alors  $\omega^\epsilon(x) = \omega(x_2/\epsilon)$ .

Soit  $c_0$  la concentration initiale de l'espèce radioactive considérée (typiquement 0 avant le relâchement des colis). Notons enfin par  $\Phi$  la fonction décrivant le comportement du flux d'un module à travers le milieu poreux. Après la renormalisation effectuée ci-dessus, l'équation de convection-diffusion devient :

$$\omega^\epsilon \frac{\partial c_\epsilon}{\partial t} - \nabla \cdot (A^\epsilon \nabla c_\epsilon) + (v^\epsilon \cdot \nabla) c_\epsilon + \lambda \omega^\epsilon c_\epsilon = 0 \quad \text{dans } \hat{\Omega}^T = (\Omega_\epsilon) \times ]0, T[ \quad (2.2)$$

$$n \cdot \sigma = n \cdot (A^\epsilon \nabla c_\epsilon - v^\epsilon c_\epsilon) = \Phi(t), \quad \text{sur } \Gamma_\epsilon \times [0, T] \quad (2.3)$$

$$c_\epsilon(x, 0) = c_0(x), \quad x \in \hat{\Omega}^\epsilon = \Omega^\epsilon \quad (2.4)$$

$$c = 0 \quad \text{sur } S_1 \quad (2.5)$$

$$n \cdot (A^\epsilon \nabla c_\epsilon - v^\epsilon c_\epsilon) = 0 \quad \text{sur } S_2 \quad (2.6)$$

## 2.3.2 Modèle homogénéisé valable sur des temps longs

### Quelques estimations a priori

**Théorème 2.3.1** *Soit  $c_\epsilon$  la solution unique de (2.2-2.6),  $\Phi \in C^1([0, T])$ ,  $c_0 \in H^2(\Omega_\epsilon)$ ,  $A^\epsilon \in L^\infty(\Omega_\epsilon)$  et  $v^\epsilon \in L^\infty(\Omega_\epsilon)$ , alors il existe une constante  $C > 0$  telle que :*

$$\|c_\epsilon\|_{L^2([0, T]; L^\infty(\Omega))} \leq C \quad (2.7)$$

$$\|c_\epsilon\|_{L^2([0, T]; H^1(\Omega_\epsilon))} \leq C \quad (2.8)$$

La preuve est donnée dans [7] et repose sur une estimation de la condition de flux sur  $\Gamma_\epsilon$ . Dans le cadre de l'homogénéisation des termes source, nous devons considérer une extension de ces résultats au domaine sans trous  $\Omega$ . En effet, l'une des difficultés pour l'application de l'homogénéisation sur des domaines perforés reste l'impossibilité d'extraire directement une sous-suite convergente à l'aide de la compacité faible dans l'espace  $H^1(\Omega_\epsilon)$ , du fait que notre suite  $(c_\epsilon)$  est définie sur des espaces variant en fonction de  $\epsilon$ . En raison de l'échelle  $\epsilon^\beta$ ,  $\beta > 1$ , les résultats classiques obtenus dans [9] concernant les inégalités de Poincaré dans un domaine perforé, ne sont pas applicables directement. Ils

ont donc été adaptés dans [7] pour obtenir des extensions :

Pour tout  $\phi \in H^1(\Omega_\epsilon)$  défini sur l'ouvert à trous  $\Omega_\epsilon$ , il existe une extension  $\tilde{\phi} \in H^1(\Omega)$  définie sur tout l'ouvert  $\Omega$  telle que :

$$\|\tilde{\phi}\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \leq C\|\phi\|_{L^2(\Omega_\epsilon)} \quad (2.9)$$

$$\|\nabla\tilde{\phi}\|_{\mathbf{L}^{2/\beta}(\Omega)} \leq C\|\nabla\phi\|_{L^2(\Omega_\epsilon)} \quad (2.10)$$

Les estimations a priori portent sur ces extensions.

### Limite faible

Nous supposons dorénavant que  $c_\epsilon$  représente l'extension de la concentration sur  $\Omega$  selon (2.9–2.10) et nous notons cette extension par le même symbole. Alors, il existe  $c \in L^2([0, T], H^1(\Omega)) \cap L^\infty([0, T], L^2(\Omega))$  telle que :

$$c_\epsilon \rightharpoonup c \text{ faiblement } * \text{ dans } L^\infty([0, T]; L^2(\Omega)) \quad (2.11)$$

$$\nabla c_\epsilon \rightharpoonup \nabla c \text{ faiblement dans } L^2([0, T]; L^{2/\beta}(\Omega)) \text{ pour } \beta < 2 \quad (2.12)$$

$$\nabla c_\epsilon \rightharpoonup \nabla c \text{ faiblement } * \text{ dans } L^2([0, T]; M(\Omega)) \text{ pour } \beta = 2 \quad (2.13)$$

**Théorème 2.3.2** *La concentration  $c$  définie dans (2.11)–(2.13) est l'unique solution de :*

$$\omega_{nh} \frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div}(A^{nh} \nabla c) + (v^{nh} \cdot \nabla)c + \lambda \omega^{nh} c = 0 \quad \text{dans } \hat{\Omega}^T = (\Omega/\Sigma) \times ]0, T[ \quad (2.14)$$

$$c(x, 0) = c_0(x), \quad x \in \hat{\Omega} = \Omega/\Sigma \quad (2.15)$$

$$c = 0 \quad \text{sur } S_1 \quad (2.16)$$

$$n \cdot (A^{nh} \nabla c - v^{nh} c) = 0 \quad \text{sur } S_2 \quad (2.17)$$

$$[c] = 0 \quad \text{sur } \Sigma \quad (2.18)$$

$$[e_2 \cdot (A^{nh} \nabla c - v^{nh} c)] = -2|M|\Phi \quad \text{sur } \Sigma \quad (2.19)$$

où  $[w](x_1) = w(x_1, 0+) - w(x_1, 0-)$  représente le saut sur  $\Sigma$  et  $|M|$  est la largeur d'un module renormalisé  $M_\epsilon$  (cf. Figure 2.3). La preuve du théorème 2.3.2 se trouve dans [7]. Il convient de remarquer qu'en l'occurrence l'hypothèse de périodicité d'emplacement des modules n'est pas utilisée. La même démonstration est valable si les modules sont distribués de manière aléatoire à l'intérieur d'un réseau périodique de taille  $\epsilon$ . Par ailleurs, il n'est pas nécessaire que les modules aient tous la même taille, pourvu que leurs épaisseurs soient suffisamment petites, c'est à dire,  $\ll \epsilon$ . Enfin, de manière générale, le flux  $\Phi$  peut dépendre du temps. Dans ce cas, (2.19) devient :

$$[e_2 \cdot (A^{nh} \nabla c - v^{nh} c)] = -2 \lim_{\epsilon \rightarrow 0} |M_\epsilon(x)| \Phi(x, t) \quad \text{sur } \Sigma$$

A priori, la limite faible  $c$  décrit le comportement homogénéisé de la concentration ou encore le comportement "moyen" ou global. Néanmoins, cette limite ne prend pas en compte le comportement détaillé de la concentration, c'est à dire à l'échelle "champ proche", près de la zone de stockage. Si nous voulons décrire les oscillations caractéristiques près de la zone de stockage, nous devons alors chercher une approximation d'ordre supérieur. C'est ce que nous allons faire dans la section suivante, par une méthode asymptotique.

## 2.4 La technique du développement asymptotique

Nous voulons décrire en plus de la "concentration moyenne" définie par (2.14)–(2.19), les oscillations de la concentration près de la zone de stockage lors du relâchement du colis. Nous utilisons une approche classique dans ce type de problèmes, qui consiste à appliquer successivement la méthode des développements asymptotiques [4] pour trouver le problème homogénéisé et les problèmes locaux, puis de répondre à la question de la convergence par la méthode de l'énergie de L. Tartar [5]. Commençons par partager le domaine  $\Omega$  comme suit (cf. Figure 2.5) :

$$G_\epsilon = ] - 1/2, +1/2[\times ] - \epsilon \log(\frac{1}{\epsilon}); +\epsilon \log(\frac{1}{\epsilon})[, \text{ le domaine intérieur,}$$

$$\Omega \setminus \bar{G}_\epsilon \text{ le domaine extérieur.}$$

Nous approchons la concentration par une "concentration homogénéisée" issue de  $c$ , solution du théorème 2.3.2 dans le domaine extérieur. La solution est approchée par la formule suivante dans le domaine intérieur :

$$c_\epsilon \simeq c_\epsilon^0 + \epsilon(\chi_\epsilon^k(\frac{x}{\epsilon})\frac{\partial c_\epsilon^0}{\partial x_k} + w_\epsilon(\frac{x}{\epsilon})\Phi - c_\epsilon^0\rho_\epsilon^k(\frac{x}{\epsilon})v_k^1) \equiv c_\epsilon^1 \quad (2.20)$$

où l'on suppose la sommation de l'indice  $k$  de 1 à 2. Par ailleurs,  $c_\epsilon^0$  est choisi pour imiter le comportement de la concentration homogénéisée solution du problème (2.14)–(2.19) loin de la zone de stockage. Les termes  $w_\epsilon$ ,  $\rho_\epsilon^k$ ,  $k = 1, 2$ , et  $\chi_\epsilon^k$ ,  $k = 1, 2$  sont solutions de **problèmes auxiliaires** qui prennent en compte les répétitions des sources, le comportement de la vitesse de Darcy et les répétitions de la géométrie; ils seront définis dans la section suivante. Le principe est d'introduire l'approximation (2.20) dans le problème de convection-diffusion renormalisé (2.2)–(2.6). On considère alors l'expression obtenue en tant que polynôme en  $\epsilon$  et on identifie les coefficients de manière à déterminer les problèmes auxiliaires et le problème dont  $c_\epsilon^0$  est solution.

### 2.4.1 Les problèmes auxiliaires

Introduisons la variable d'espace rapide  $y = \frac{x}{\epsilon}$ . On peut montrer (cf. [7]) que les variables auxiliaires sont solutions de **problèmes auxiliaires** diffusifs posés dans la bande

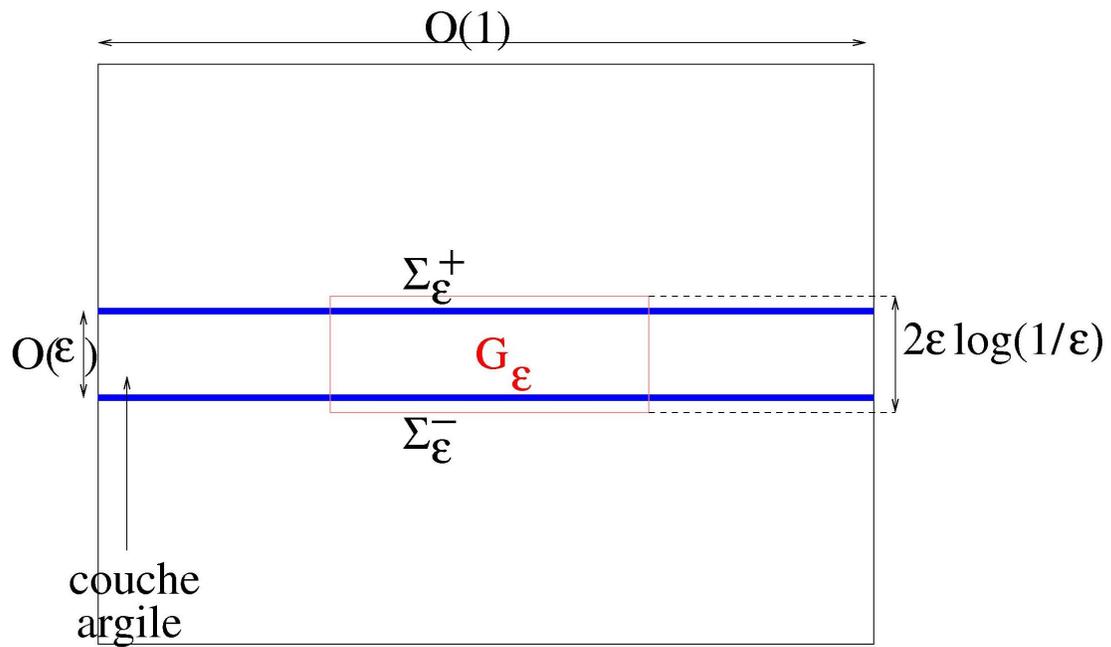


FIG. 2.5 – Le domaine intérieur  $G_\epsilon$  et les hyper-plans  $\Sigma_\epsilon^+$  et  $\Sigma_\epsilon^-$  qui le délimitent

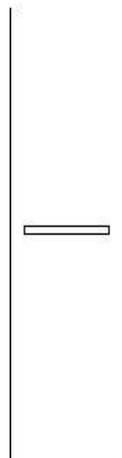


FIG. 2.6 – La bande infinie  $H_\epsilon$  support des problèmes auxiliaires

infinie  $H_\epsilon = ]-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}[ \times \mathbb{R} \setminus M_\epsilon$  (cf. Figure 2.6) :

$$I \quad \begin{cases} -\nabla \cdot (A^\epsilon \nabla (\chi_\epsilon^k + y_k)) = 0 & \text{dans } G_\epsilon \\ n \cdot (A^\epsilon \nabla (\chi_\epsilon^k + y_k)) = 0 & \text{sur } \partial M_\epsilon \\ \chi_\epsilon^k \text{ est 1-périodique en } y_1 \\ \lim_{y_2 \rightarrow \infty} \nabla \chi_\epsilon^k = 0 \end{cases} \quad (2.21)$$

$$II \quad \begin{cases} -\nabla \cdot (A^\epsilon \nabla w_\epsilon^k) = 0 & \text{dans } G_\epsilon \\ n \cdot (A^\epsilon \nabla w_\epsilon^k) = 1 & \text{sur } \partial M_\epsilon \\ w_\epsilon^k \text{ est 1-périodique en } y_1 \\ \lim_{y_2 \rightarrow \infty} A^\epsilon \nabla w_\epsilon^k = \pm 1/2 |\partial M_\epsilon| \end{cases} \quad (2.22)$$

$$III \quad \begin{cases} -\nabla \cdot (A^\epsilon \nabla \rho_\epsilon^k) = 0 & \text{dans } G_\epsilon \\ n \cdot (A^\epsilon \nabla \rho_\epsilon^k + e_k) = 0 & \text{sur } \partial M_\epsilon \\ \rho_\epsilon^k \text{ est 1-périodique en } y_1 \\ \lim_{y_2 \rightarrow \infty} \nabla \rho_\epsilon^k = 0 \end{cases} \quad (2.23)$$

L'existence de solutions dans  $H^1(H_\epsilon)$  pour les problèmes (2.21) et (2.23) est classique. On peut consulter à cet effet [11] ou [12]. Naturellement,  $\chi_\epsilon^k$ ,  $k = 1, 2$  et  $\rho_\epsilon^k$ ,  $k = 1, 2$  sont définis à une constante près. On peut également démontrer que leur comportement lorsque  $y_2$  tend vers l'infini est de type exponentiellement décroissant (cf. les références [11] et [12]). Ainsi, par exemple, il existe des constantes  $d_-^k(\epsilon)$  et  $d_+^k(\epsilon)$  telles que, pour  $s$  suffisamment grand,  $\tau > 0$ , on ait :

$$\|\chi_\epsilon^k - d_+^k(\epsilon)\|_{H^1(H_\epsilon \cap \{y_2 > s\})} \leq C e^{-\tau s} \quad (2.24)$$

$$\|\chi_\epsilon^k - d_-^k(\epsilon)\|_{H^1(H_\epsilon \cap \{y_2 < -s\})} \leq C e^{-\tau s} \quad (2.25)$$

La solution de (2.22) n'a quant à elle pas ce type de comportement en raison de la condition de flux (2.46), imposée pour conserver la condition de compatibilité de Fredholm. Pour obtenir le comportement de  $w_\epsilon$  lorsque  $y_2$  tend vers l'infini, on définit la fonction cut-off suivante :

$$\theta(y_2) = \begin{cases} 0 & \text{pour } -1/2 < y_2 < 1/2 \\ 1 & \text{pour } |y_2| > 1 \\ \text{continue} & \text{sinon} \end{cases}$$

Posons maintenant  $\pi(y_2) = -\theta(y_2) (\frac{1}{2} A_{22}^h)^{-1} |y_2| |\partial M_\epsilon|$ . Soit  $\tilde{w}_\epsilon$  telle que :

$$w_\epsilon = \pi + \tilde{w}_\epsilon$$

$\tilde{w}_\epsilon$  vérifie le problème

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (A^\varepsilon \nabla \tilde{w}_\varepsilon) = 0 & \text{dans } G_\varepsilon \\ n \cdot (A^\varepsilon \nabla \tilde{w}_\varepsilon) = 1 & \text{sur } \partial M_\varepsilon \\ \tilde{w}_\varepsilon \text{ est 1-périodique en } y_1 \\ \lim_{y_2 \rightarrow \infty} \nabla \tilde{w}_\varepsilon = 0 \end{cases} \quad (2.26)$$

Le problème (2.26) est du même type que les problèmes (2.23) et (2.21) et admet donc une solution, unique à une constante près. De même,  $\tilde{w}_\varepsilon$  a un comportement exponentiellement décroissant lorsque  $y_2$  tend vers l'infini. Ainsi, le comportement asymptotique de  $w_\varepsilon$ , lorsque  $y_2$  tend vers l'infini est :

$$w_\varepsilon(y) \approx -\frac{1}{2}(A_{22}^\varepsilon)^{-1}|y_2||\partial M_\varepsilon| + \text{partie exponentiellement décroissante} \quad (2.27)$$

Les problèmes auxiliaires sont invariants dans le temps et sont donc calculés une fois pour toutes. Arrêtons nous un instant sur le terme "correcteur" dans la théorie de l'homogénéisation. Si l'on considère que le développement asymptotique d'une fonction  $u$  est  $\sum_{k=0}^{+\infty} \varepsilon^k u^k(x/\varepsilon)$ , alors le correcteur d'ordre  $N$  est traditionnellement le reste d'ordre

$N$ , c'est à dire  $\sum_{k=N}^{+\infty} \varepsilon^k u^k(x/\varepsilon)$ . Ce n'est pas dans ce sens que nous utilisons ce terme dans

la suite de l'exposé. Ainsi  $\rho_\varepsilon^k$  peut être considéré comme un "correcteur" de la convection selon la direction  $k$ .  $\chi_\varepsilon^k$  peut quant à lui être considéré comme un "correcteur" de forme. Ce correcteur va s'avérer prépondérant pour obtenir le matching de flux sur  $\Sigma_\varepsilon^+ \cup \Sigma_\varepsilon^-$ . Enfin,  $w_\varepsilon$  est le "correcteur" de source.

## 2.4.2 Solution du problème extérieur

$c_\varepsilon^0$  est la solution unique de (preuve dans [7]) :

$$\omega^{nh} \frac{\partial c_\varepsilon^0}{\partial t} - \nabla_x \cdot (A^{nh} \nabla_x c_\varepsilon^0) + (v^{nh} \cdot \nabla_x) c_\varepsilon^0 + \lambda \omega^{nh} c_\varepsilon^0 = 0$$

dans  $\hat{\Omega}_\varepsilon^T = (\Omega / (\Sigma_\varepsilon^+ \cup \Sigma_\varepsilon^-)) \times ]0, T[$  (2.28)

$$c_\varepsilon^0(x, 0) = c_0(x), \quad x \in (\Omega / (\Sigma_\varepsilon^+ \cup \Sigma_\varepsilon^-)) \quad (2.29)$$

$$c_\varepsilon^0 \varepsilon = 0 \quad \text{sur } S_1 \quad (2.30)$$

$$n \cdot A^{nh} \nabla c_\varepsilon^0 - (v^{nh} \cdot n) c_\varepsilon^0 = 0 \quad \text{sur } S_2 \quad (2.31)$$

$$[c_\varepsilon^0] = 0 \quad \text{sur } \Sigma_\varepsilon^+ \cup \Sigma_\varepsilon^- \quad (2.32)$$

$$[e_2 \cdot A^{nh} \nabla c_\varepsilon^0 - v \cdot e_2 c_\varepsilon^0] = -1/2 \Phi |\partial M_\varepsilon| \quad \text{sur } \Sigma_\varepsilon^+ \cup \Sigma_\varepsilon^- \quad (2.33)$$

$$\Sigma_\varepsilon^+ = ] - \delta/2, \delta/2[ \times \varepsilon \log(\frac{1}{\varepsilon}), \Sigma_\varepsilon^- = ] - \delta/2, \delta/2[ \times -\varepsilon \log(\frac{1}{\varepsilon}).$$

Le saut est défini pour tout  $w$  par :

$$[w](x_1) = w(x_1, -\epsilon \log(\frac{1}{\epsilon})) + -w(x_1, -\epsilon \log(\frac{1}{\epsilon}))-, \quad x_1 \in \Sigma_\epsilon^-, \quad [w](x_1) = w(x_1, \epsilon \log(\frac{1}{\epsilon})) + -w(x_1, \epsilon \log(\frac{1}{\epsilon}))-, \quad x_1 \in \Sigma_\epsilon^+$$

En raison des sauts de flux à travers les surfaces  $\Sigma_\epsilon^+ \cup \Sigma_\epsilon^-$ , nous ne pouvons pas conclure que  $c_\epsilon^0 \in L^2(0, T; H^2(\Omega))$ . En revanche,  $c_\epsilon^0 \in L^2(0, T; H^3(\Omega_\epsilon))$ .

### 2.4.3 Estimations d'erreurs du développement

Nous utilisons les résultats (2.21–2.23) et (2.28–2.33) pour définir l'approximation dans les domaines intérieur et extérieur sous la forme :

$$F_\epsilon = \begin{cases} c_\epsilon^0 & \text{dans } \Omega \setminus \bar{G}_\epsilon \\ c_\epsilon^0 + \epsilon(\chi_\epsilon^k(\frac{x}{\epsilon}) \frac{\partial c_\epsilon^0}{\partial x_k} + w_\epsilon(\frac{x}{\epsilon}) \Phi - c_\epsilon^0 \rho_\epsilon^k(\frac{x}{\epsilon}) v_k^1) & \text{dans } G_\epsilon \end{cases} \quad (2.34)$$

Cette approximation a des sauts sur l'interface  $\partial G_\epsilon$  aussi bien de concentration que de flux. Nous devons évaluer les normes de ces sauts. La contribution principale du saut de la concentration sur  $\Sigma_\epsilon^+ \cup \Sigma_\epsilon^-$ , notée  $[F_\epsilon]$ , provient de la trace de  $w_\epsilon \phi$  sur  $\Sigma_\epsilon^+ \cup \Sigma_\epsilon^-$ . D'après le problème auxiliaire (2.22), elle vaut  $-(A_{22}^h)^{-1} \frac{\gamma_2}{2} |M_\epsilon| \phi$ . Cette estimation finit par induire d'après [7] :

$$\|F_\epsilon\|_{L^2(0, T; H^{1/2}(\Omega_\epsilon))} \leq C\epsilon \sqrt{\log \frac{1}{\epsilon}} \quad (2.35)$$

Regardons de plus près le comportement du saut de flux sur  $\partial G_\epsilon$ . Les termes majeurs du saut de flux sur  $\Sigma_\epsilon^+ \cup \Sigma_\epsilon^-$  sont  $\epsilon \chi_\epsilon^k(\frac{\partial^2 c_\epsilon^0}{\partial x_2 \partial x_k})$ ,  $k = 1, 2$ . On aboutit finalement à :

$$\|[e_2 \cdot (A^h \nabla F_\epsilon - v^h F_\epsilon)]\|_{L^2(0, T; H^{-1/2}(\Sigma_\epsilon^+ \cup \Sigma_\epsilon^-))} \leq C\epsilon \quad (2.36)$$

**Théorème 2.4.1** *Soit  $c_\epsilon$  solution du problème de transport renormalisé (2.2)–(2.6). Soit  $F_\epsilon$  le développement défini par (2.34). Alors pour tout  $0 < \tau < 1$ , il existe une constante  $C_\tau > 0$ , indépendante de  $\epsilon$ , telle que :*

$$\|c_\epsilon - F_\epsilon\|_{L^2(0, T; H^1(L_\epsilon))} \leq C_\tau \epsilon^\tau \quad (2.37)$$

où  $L_\epsilon = \Omega \setminus \partial G_\epsilon$

**Remarque 1** *La même estimation est valable dans l'espace  $L^\infty(0, T; L^2(\Omega_\epsilon))$ .*

Pour obtenir une meilleure qualité d'approximation c'est à dire à la fois un bon raccord des flux et des traces des concentrations, il faudrait effectuer un développement d'ordre 2 au lieu de notre développement d'ordre 1. Il faut bien comprendre que ce dernier modèle assure une continuité de flux et non pas de la concentration elle-même, d'où l'estimation du théorème 2.4.1. Mais il ne faut pas oublier l'un de nos buts : développer un modèle qui soit rapide à mettre en oeuvre. Dans la mesure où le développement

asymptotique d'ordre 1 permet de représenter les oscillations, nous nous "contenterons" de ce modèle.

Nous pouvons remarquer que les termes du développement  $F_\epsilon$  défini par (2.34) dépendent du terme  $\epsilon$  via le terme  $c_\epsilon^0$  du développement, qui présente des sauts de flux sur  $\Sigma_\epsilon^+ \cup \Sigma_\epsilon^-$ , et naturellement des termes d'ordre 1, dont le support dépend de  $\epsilon$ . Nous allons d'abord comparer l'ordre 0 du développement d'ordre 1 défini par (2.34) et la limite faible définie par (2.14)-(2.19).

**Lemme 2.4.1** *Il existe une constante  $C > 0$  telle que :*

$$\|c_\epsilon^0 - c\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} \leq C(\sqrt{\epsilon \log(1/\epsilon)} + (1 - \delta_{1\beta})\epsilon^{\beta-1})$$

où  $\delta_{1\beta}$  est le symbole de Kronecker.

Le théorème 2.4.1 implique les relations suivantes :

**Corollaire 2.4.1** *Il existe une constante  $C > 0$  telle que :*

$$\|c_\epsilon - c\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega_\epsilon))} \leq C(\sqrt{\epsilon \log(1/\epsilon)})$$

De plus pour tout  $s$  tel que  $0 < s < 1$ , il existe  $C_s > 0$  tel que :

$$\|c_\epsilon - c_\epsilon^0\|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega_\epsilon))} \leq C_s \epsilon^s$$

## 2.4.4 Premières conclusions sur le développement asymptotique

Dans des conditions réalistes, exposées par exemple dans [13], l'intensité du flux peut être très importante durant une période relativement brève et les oscillations induites du flux sont aussi très importantes. Dans ce cas, la limite homogénéisée donnée par (2.14)–(2.19) ne représente que la "moyenne" d'oscillations possiblement très importantes (limite faible) et non négligeables. Si on veut approcher les oscillations, un développement asymptotique au moins d'ordre 1 comme défini par (2.34) doit être étudié afin de répondre à ce type de situation. Les oscillations suscitées par le relâchement des modules sont prises en compte essentiellement par le terme  $\epsilon w \Phi$ , qui domine le comportement du développement d'ordre 1 tant que le flux relâché est suffisamment important (il peut même avoir un ordre de grandeur analogue au terme  $c_\epsilon^0$  défini par (2.28)–(2.33)). Passée cette période, le terme  $c_\epsilon^0$  devient le terme prépondérant du développement et la limite homogénéisée (2.14)–(2.19) fournit elle aussi une approximation suffisante.

Tout ce qui vient d'être dit est éminemment théorique et nécessite une validation numérique afin de pouvoir préciser les modalités d'utilisation pratique de ces modèles. C'est ce que nous allons nous attacher à faire dans la section suivante.

## 2.5 Validation numérique de la technique de changement d'échelle décrite dans les sections précédentes

Commençons par présenter le plan de cette validation numérique. Dans le paragraphe 2.5.1, nous présentons des comparaisons des simulations détaillée et homogénéisée ( $c$ ), ainsi que des comparaisons détaillés et d'ordre 1 ( $c^1$ ) dans un cas monocouche, c'est à dire dans un cas où la couche hôte n'a pas des propriétés très différentes des autres couches. Dans le paragraphe 2.5.2, nous présentons des comparaisons des simulations détaillée et homogénéisée ( $c$ ), ainsi que des comparaisons simulations détaillée et d'ordre 1 ( $c^1$ ) dans un cas multicouche.

On s'aperçoit, et c'est là l'intérêt des validations par simulations numériques, que le fait de négliger l'aspect multicouche avec une couche hôte très contrastée dans la modélisation ne permet pas d'utiliser la correction d'ordre 1  $c^1$  proposée dans [7], voir également la conclusion au paragraphe 2.7. En effet, les contraintes de la couche introduisent un petit paramètre qui n'apparaît pas dans l'étude [7]. Par manque de temps, nous n'avons pas pu explorer une modélisation plus adéquate, telle celle proposée dans la conclusion, paragraphe 2.7. Nous présentons ici seulement des simulations dans le cadre strict de [7], dans les cas monocouche et multicouche contrasté, en pointant les désaccords entre les simulations du modèle détaillé et du modèle asymptotique.

Nous avons décrit dans les sections précédentes deux modèles mathématiques fondés sur la technique de changement d'échelle. Le premier modèle (2.14–2.19), obtenu par homogénéisation, est valable sur des temps longs, c'est à dire lorsque le flux relâché est devenu faible, c'est à dire d'ordre  $O(1)$ . Le second, obtenu par un développement asymptotique d'ordre 1 peut prendre en compte des oscillations relativement importantes tant que le flux est important d'ordre  $O(\varepsilon^{-1})$ . Les oscillations dues au relâchement des modules sont représentées en champ proche grâce à la formule (2.34). Le comportement en temps long est décrit par la variable  $c_\varepsilon^0$  via l'équation (2.28)–(2.33) ou plus simplement par la limite homogénéisée (2.14)–(2.19). Nous avons choisi de valider ces modèles d'un point de vue ingénierie, c'est à dire en vérifiant par des simulations numériques leur applicabilité. Pour cela, il paraît logique d'utiliser un logiciel utilisé dans des études de stockage (CASTEM, développé au Commissariat à l'Energie Atomique (CEA)).

Le cas test a été défini par l'Andra. Les paramètres de ce cas sont représentés sur la Figure 2.7. La diffusion effective  $D_e$  est telle que :

$$D_e = \begin{cases} \omega^h A^h & \text{si } y_2 \text{ se situe dans la couche hôte} \\ \omega^{nh} A^{nh} & \text{sinon} \end{cases}$$

Le nombre de modules représentés est, dans ce cas, de 15 et on a donc  $\varepsilon = 1/15 \simeq 6.67e-2$ . Notre méthodologie a été de traiter des problèmes ayant la géométrie proposée, mais de difficulté croissante quant aux caractéristiques physiques. Les simulations sont effectuées par la méthode des éléments finis mixtes hybrides aussi bien pour la simulation détaillée

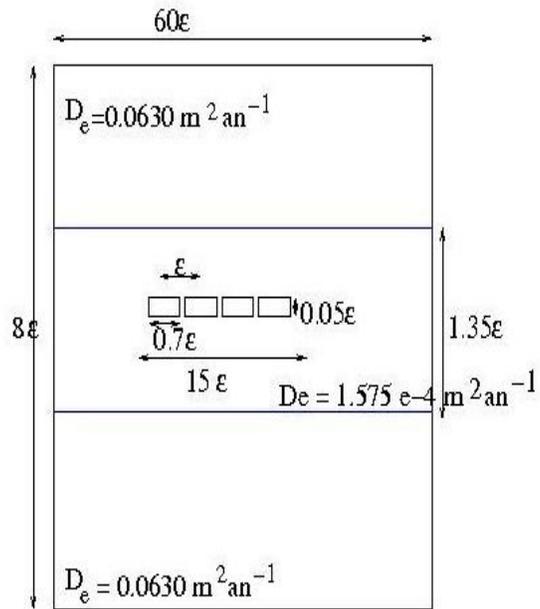
du problème (2.2)–(2.6) que pour la simulation du modèle homogénéisé (2.14)–(2.19). Dans ce dernier cas, cette méthode est particulièrement bien adaptée à la résolution du saut de flux.

Décrivons la procédure pour simuler l’ordre 1. D’une part, nous simulons le terme  $c_\varepsilon^0$  par éléments finis mixtes hybrides sur un maillage assez grossier  $Ma_e$  car nous n’avons pas à prendre en compte géométriquement les modules pour ce terme. Nous suivons les recommandations théoriques et espaçons les deux sauts de flux caractéristiques du terme  $c_\varepsilon^0$  d’une distance renormalisée  $\varepsilon \log(1./\varepsilon)$ . D’autre part, nous simulons une fois pour toutes les problèmes auxiliaires, (2.22), (2.21) et (2.23) sur une bande ”infinie” (cf. figure 2.6) de taille numériquement fixée à  $8\varepsilon$  et ce à l’échelle rapide. Cette taille est largement suffisante pour atteindre une ”stabilisation numérique” des solutions auxiliaires. Nous entendons par là que, pour cette taille, tous les problèmes auxiliaires que nous avons simulé ont numériquement atteint leurs limites à l’infini. La simulation s’effectue également par éléments finis mixtes hybrides sur un maillage  $Ma_a$ . Il faut ensuite en post-traitement, calculer l’approximation (2.20) dans le domaine intérieur  $G_\varepsilon$ . Divers éléments sont exprimés dans des grilles différentes. Nous avons choisi de tout interpoler a priori sur la grille  $Ma_e$  en raison du faible coût numérique que cela représente. Malheureusement, nous nous sommes aperçu en pratique qu’interpoler les problèmes auxiliaires sur une grille si grossière est insuffisant. La taille des modules est si petite que des erreurs numériques surviennent au niveau des trous. Un maillage suffisamment fin doit être utilisé. Pour faciliter les comparaisons de la simulation de  $c^1$  avec la simulation détaillée de  $c_\varepsilon$ , nous avons finalement choisi d’interpoler les problèmes auxiliaires sur le maillage  $Ma_d$ . Notons que le coût en terme de temps de calcul en post-traitement devient alors très important. Il reste enfin à reconstituer l’approximation d’ordre 1 sur tout le domaine de calcul. Le maillage utilisé est un maillage quadrangulaire de type régulier.

Pour comparer les simulations, nous représentons deux coupes, l’une verticale, l’autre horizontale, des trois simulations en base  $\log_{10}$ . Les courbes bleues représenteront toujours les simulations détaillées tandis que les courbes vertes représenteront les simulations de la limite homogénéisée  $c$  et les courbes rouges les simulations du modèle d’ordre 1  $c^1$ .

### 2.5.1 Un modèle de diffusion monocouche

Nous reprenons la géométrie proposée en Figure 2.7 avec 15 modules. La diffusion effective  $D_e$  est supposée constante et vaut  $0.062 \text{ m}^2.\text{an}^{-1}$  ce qui correspond à une diffusion effective que l’on pourrait trouver dans certaines couches géologiques adjacentes à la couche hôte. Cette situation correspond au cas où les couches hôte et adjacentes n’ont pas de sauts du terme de diffusion trop importants (hypothèse de l’étude de [7]), c’est à dire n’ont pas de rapport d’ordre plus petit ou plus grand que  $O(1)$ . Nous n’avons pas introduit de convection dans ce modèle. Nous allons voir en effet que le problème se situe déjà dans la diffusion. La source est celle proposée à l’exercice de qualification Couplex [13] pour l’iode 129 qui est représenté sur la Figure 2.8. Comme nous le voyons sur cette figure, il y a un comportement (intensité) de l’émission très important au début. Nous



15 modules

FIG. 2.7 – Caractéristiques du cas test défini avec l'Andra, nombre de modules = 15

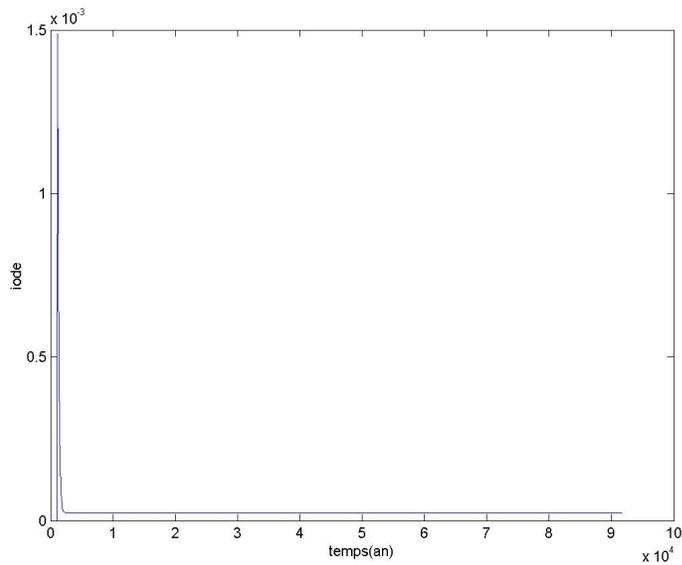


FIG. 2.8 – Relachement en iode 129 au cours du temps

avons simulé, en accord avec ce qui est fait dans les analyses de sûreté, sur une durée de  $10^6$  ans.

Le modèle détaillé est simulé sur un maillage  $Ma_d$  composé de 41584 quadrangles. Ce maillage est fin autour des modules, car il doit pouvoir prendre en compte les termes sources, très petits par rapport au domaine de calcul. Le comportement du modèle détaillé est représenté pour les temps  $t = 5000$  ans, 50000 ans,  $10^5$  ans,  $2 \cdot 10^5$  ans et  $10^6$  ans respectivement sur les figures 2.9, 2.10, 2.11, 2.12 et 2.13. Nous pouvons parler d'une simulation en temps court jusqu'à environ 50000 ans, c'est à dire tant que la source est active, puis nous parlerons d'une simulation temps long. Nous constatons que les oscillations diminuent petit à petit jusqu'à devenir négligeables à partir de 200000 ans sur les coupes horizontales. Sur ce cas, le contaminant se répand rapidement jusqu'à atteindre les couches adjacentes dès 50000 ans. Nous avons simulé le modèle homogénéisé sur un maillage  $Ma_h$  composé de 6160 quadrangles. Le maillage est grossier ici puisque nous prenons en compte le relâchement des modules via le saut de flux caractéristique du comportement de  $c$ .  $c_\varepsilon^0$  a été simulé sur un maillage  $Ma_e$  composé de 11403 quadrangles. De la même manière que pour  $c$ , le maillage est grossier puisque nous avons deux sauts de flux à la place de la représentation physique du module du modèle détaillé. Les problèmes auxiliaires sont simulés sur un maillage  $Ma_i$  de taille 11750. Ici, nous représentons un module mais n'oublions pas nous simulons sur un simple motif périodique, beaucoup plus fin que le domaine  $\Omega$  complet. Nous n'avons donc pas besoin d'autant de quadrangles que pour la simulation détaillée. Pour calculer l'approximation (2.34), nous interpolons les divers éléments qui composent (2.34) dans le maillage  $Ma_d$ . Nous avons superposé les trois courbes pour les temps  $t = 5000$  ans, 50000 ans,  $10^5$  ans,  $2 \cdot 10^5$  ans et  $10^6$  ans respectivement sur les figures 2.14, 2.15, 2.16, 2.17 et 2.19.

Commençons par commenter le comportement de la simulation homogénéisée. En temps court, elle n'est pas apte à suivre les oscillations suscitées par le relâchement des modules (cf. figure 2.14). Toutefois, le comportement moyen est très proche du comportement global de la solution détaillée et donne des résultats honorables même en norme infinie, comme l'atteste le tableau 2.2. Cette situation est encore plus nette en temps long car le comportement de la solution détaillée perd progressivement des oscillations pour tendre vers le comportement moyen.

Passons au comportement de la solution d'ordre 1. En temps court, l'ordre 1 a, comme prévu, des oscillations, mais cette approximation n'est pas bonne en norme infinie, cf. tableau 2.1. Une autre source d'erreur provient du mauvais recollement du flux au niveau de la jonction des domaines intérieur et extérieur qui est visible sur les coupes verticales représentées sur les figures 2.14 et 2.15.

Considérons à présent les temps longs représentés sur les figures 2.16 à 2.19. Nous savons qu'en temps long  $|c_\varepsilon - c| < O(\varepsilon)$  et  $|\varepsilon w \phi| < O(\varepsilon)$  d'après la section 2.4. Alors, en temps long, le terme  $c_\varepsilon^0$  "domine" le comportement de  $c^1$ . Nous allons distinguer deux cas selon le temps de diffusion :

- temps de diffusion court correspondant aux figures 2.16 et 2.17. Nous constatons que dans ce cas, le comportement de  $c^1$  est inadéquat. En temps de diffusion court,

nous pouvons raisonnablement émettre l'hypothèse que  $c_\varepsilon^0$  et  $c$  sont relativement éloignés. D'après le lemme 5 de [7], on a  $\|c - c_\varepsilon^0\|_{L^2([0,T],H^1(\Omega))} \leq 0(\sqrt{\varepsilon \log(1/\varepsilon)} + \varepsilon^2)$ . Ceci, associé à la remarque que  $c_\varepsilon^0$  "domine" le comportement de  $c^1$  peut expliquer le mauvais comportement de  $c^1$  pour les temps longs en terme de source mais courts en terme de diffusion.

- temps de diffusion court correspondant aux figures 2.19. Emettons l'hypothèse selon laquelle  $c_\varepsilon^0$  converge dans ce cas en un sens vers  $c$  dans ce cas et que à partir d'un temps suffisamment long, dans le cas d'un transport uniquement par diffusion,  $|c - c_\varepsilon^0| < O(\varepsilon)$ . Le comportement de la solution détaillée perd progressivement des oscillations pour tendre vers le comportement moyen  $c$  en temps long. Alors ceci peut justifier que  $c^1$  devienne une bonne approximation de  $c_\varepsilon$  pour les temps longs en terme de source et de diffusion.

Nous allons tester deux facteurs influençant les simulations : la valeur du paramètre  $\varepsilon$  et la taille du domaine intérieur  $G_\varepsilon$  délimitant notamment notamment le recollement des flux.

Pour tester l'influence du paramètre  $\varepsilon$  numériquement, nous allons simplement effectuer ces simulations avec les mêmes paramètres en diminuant la taille de  $\varepsilon$ , autrement dit en augmentant le nombre de modules. Nous avons calculé l'erreur en norme infinie entre les approximations  $c^1$  et  $c_\varepsilon$  et  $c$  et  $c_\varepsilon$  respectivement dans les tableaux 2.1 et 2.2. On constate numériquement une amélioration de la qualité de l'approximation  $c^1$  vis à vis de  $c_\varepsilon$  lorsque  $\varepsilon$  tend vers 0 et ce pour tous les temps de simulation. Le temps de transition  $t = 100000$  ans reste moins bon pour les raisons structurelles décrites plus haut. Nous réussissons à atteindre une approximation de 5 pourcents pour 60 modules en temps court. De même, on constate numériquement une amélioration de la qualité de l'approximation  $c$  vis à vis de  $c_\varepsilon$  lorsque  $\varepsilon$  tend vers 0 et ce pour tous les temps de simulation. Enfin, nous constatons que la précision de  $c$  en  $\|\cdot\|_\infty$  par rapport au modèle détaillé est meilleure que celle du développement d'ordre 1  $c^1$ .

Les coupes verticales montrent que la hauteur de  $G_\varepsilon$ , notée  $h_{G_\varepsilon}$ , qui a théoriquement une valeur de  $\varepsilon \log(1/\varepsilon)$  s'avère en pratique trop importante pour bien reconstituer le comportement du modèle détaillé. Testons numériquement une valeur de  $h_{G_\varepsilon}$  moins importante, par exemple,  $\varepsilon$ . Les figures 2.21 et 2.22 comparent les deux cas pour des temps respectifs de 50000 et 100000 ans. Très clairement, diminuer la hauteur du domaine intérieur améliore artificiellement le comportement général de la simulation d'ordre 1 dans ce cas.

## Premières conclusions

Nous pouvons dès à présent tirer quelques conclusions de ce premier cas test. Dans ce cas de couches relativement homogènes, le modèle d'ordre 0 offre un bon compromis : sa simulation est facile et rapide et le comportement "moyen" rend bien compte du phénomène de transport de radionucléides par diffusion calculé par une méthode classique. Certes, il n'est pas à même de représenter les oscillations, contrairement à l'ordre 1. Mais ces dernières ont un ordre de grandeur si faible (dans notre exemple de l'ordre  $10^{-4}$ ) que le paramètre  $\varepsilon$  que nous introduisons dans le modèle d'ordre 1, trop grand pour pouvoir

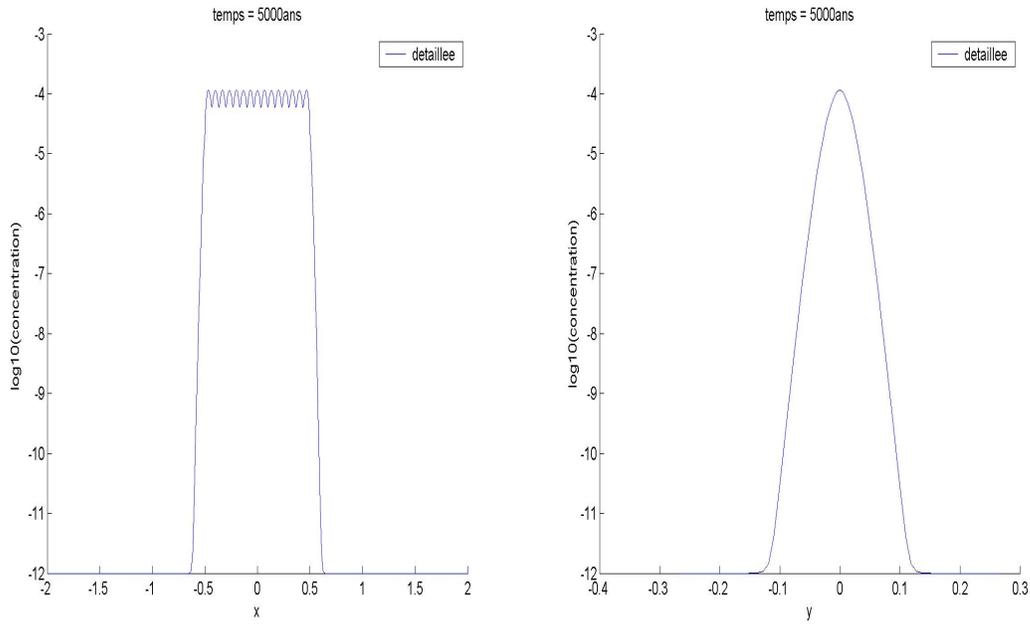


FIG. 2.9 – Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 de la simulation détaillée pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps  $t = 5000$  ans

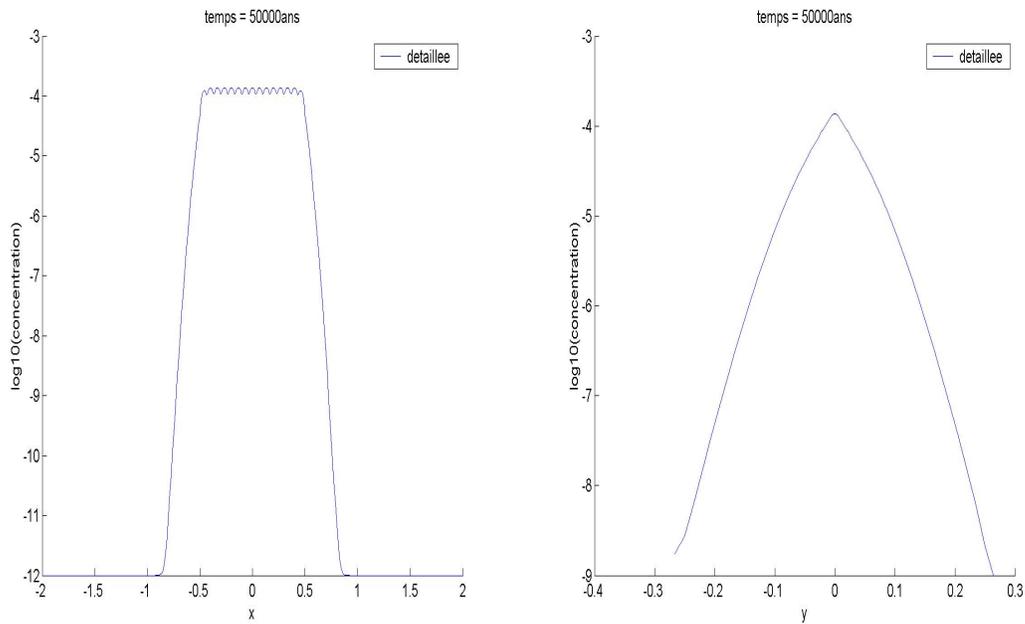


FIG. 2.10 – Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 de la simulation détaillée pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps  $t = 50000$  ans

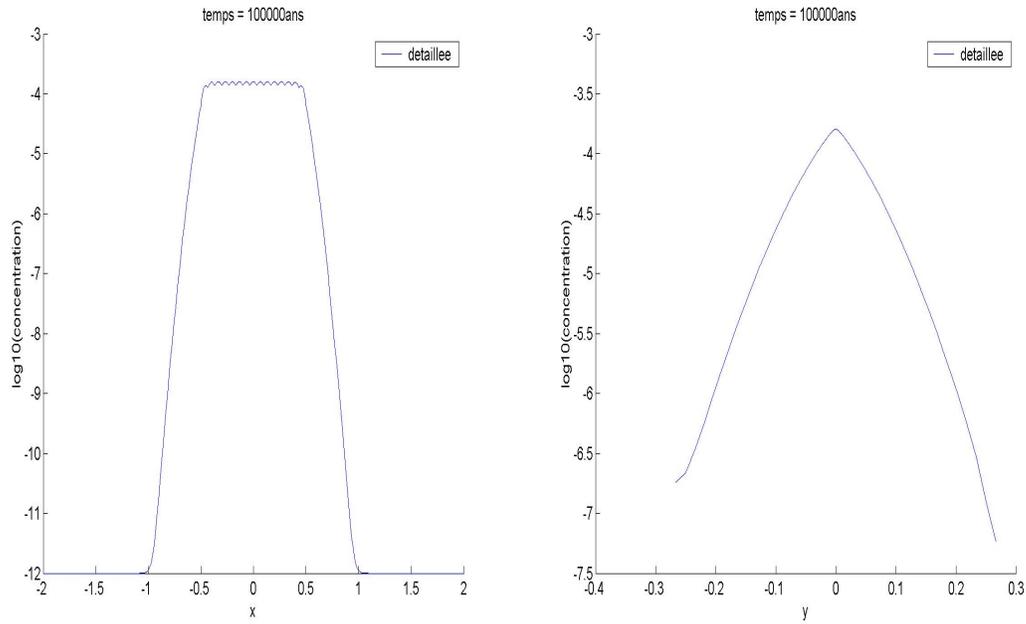


FIG. 2.11 – Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 de la simulation détaillée pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps  $t = 100000$  ans

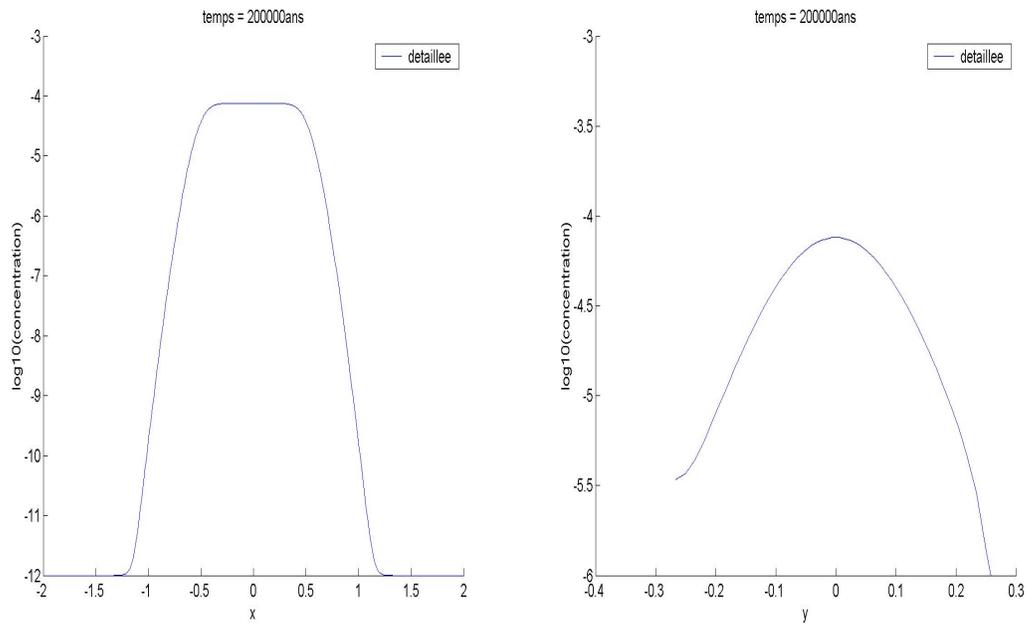


FIG. 2.12 – Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 de la simulation détaillée pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps  $t = 200000$  ans

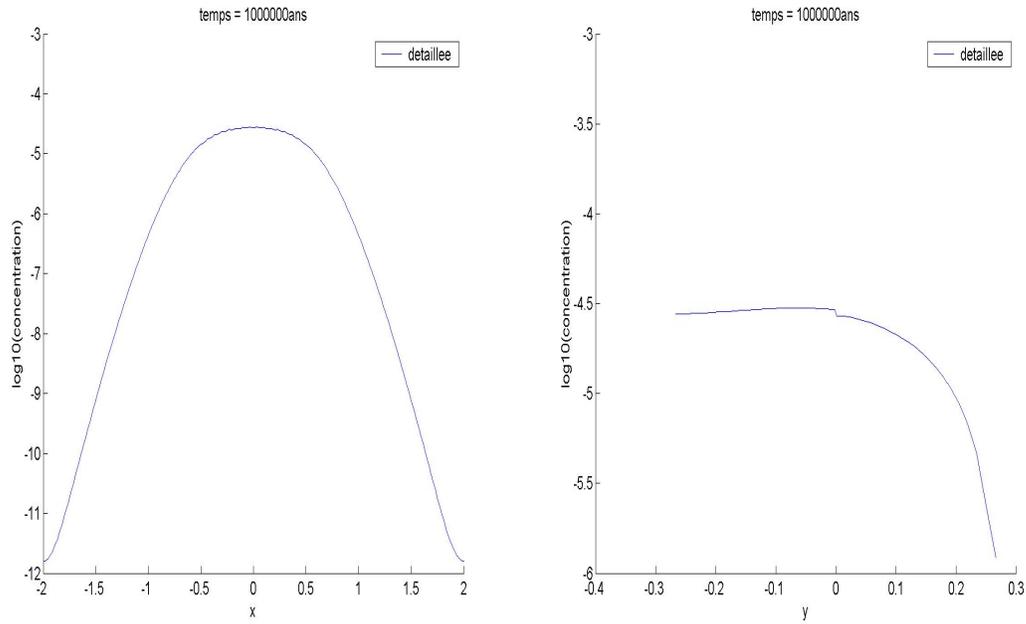


FIG. 2.13 – Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 de la simulation détaillée pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps  $t = 1000000$  ans

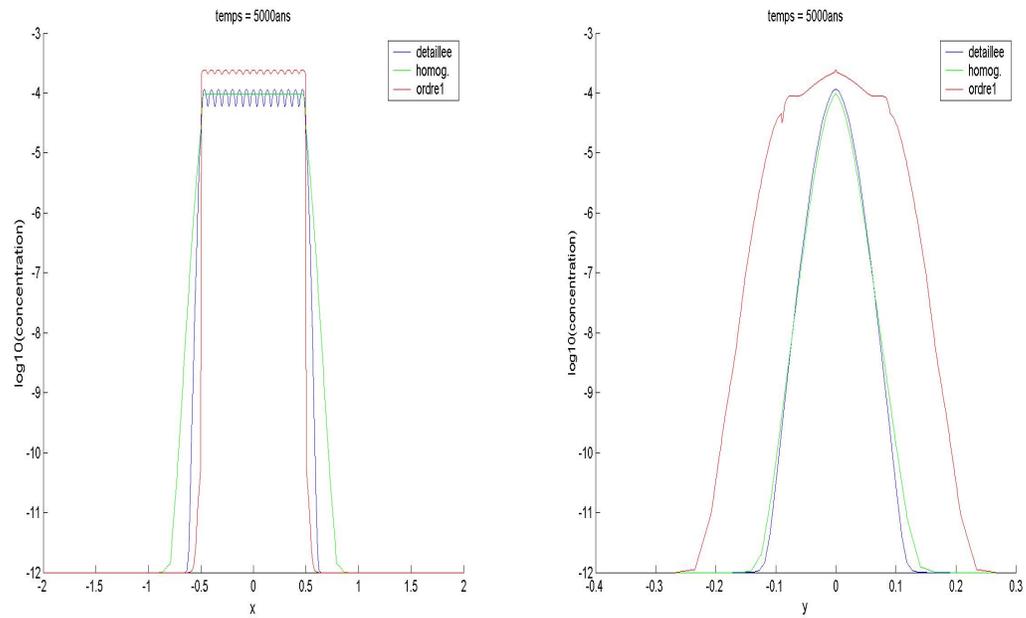


FIG. 2.14 – Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps  $t = 5000$  ans

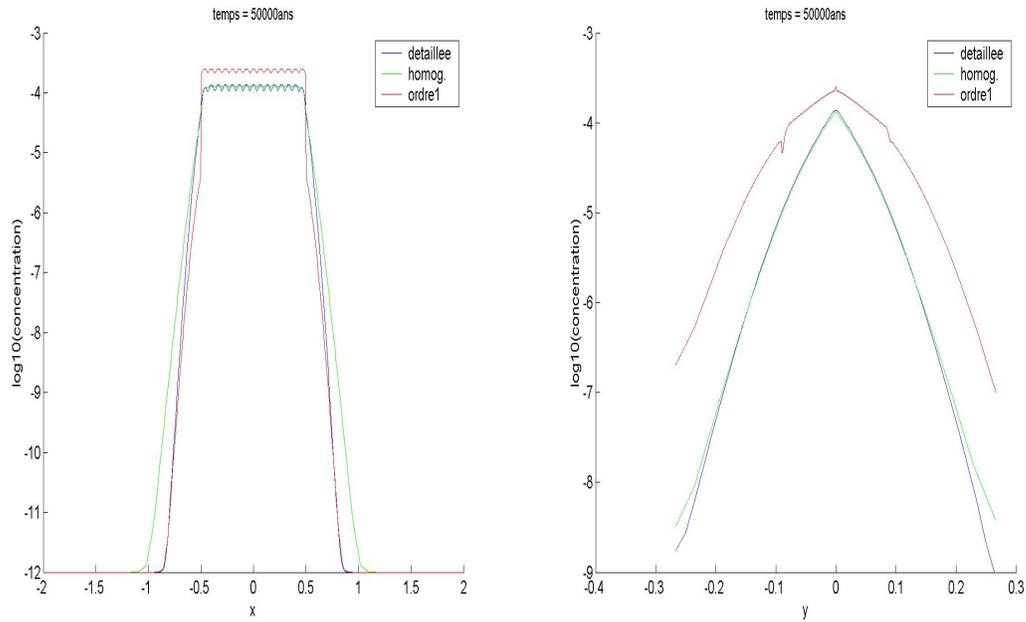


FIG. 2.15 – Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps  $t = 50000$  ans

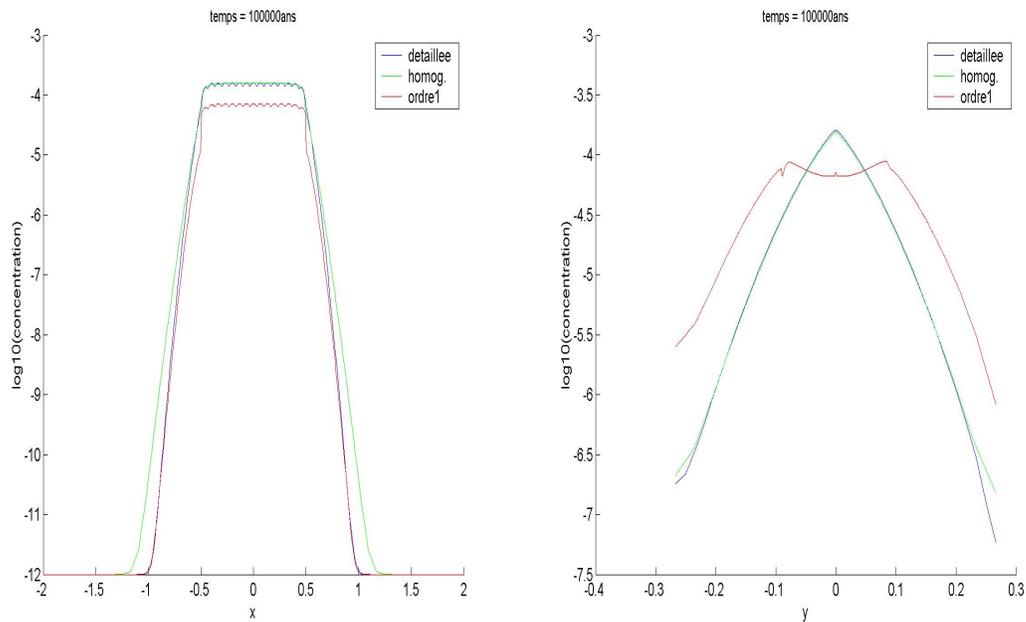


FIG. 2.16 – Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps  $t = 100000$  ans

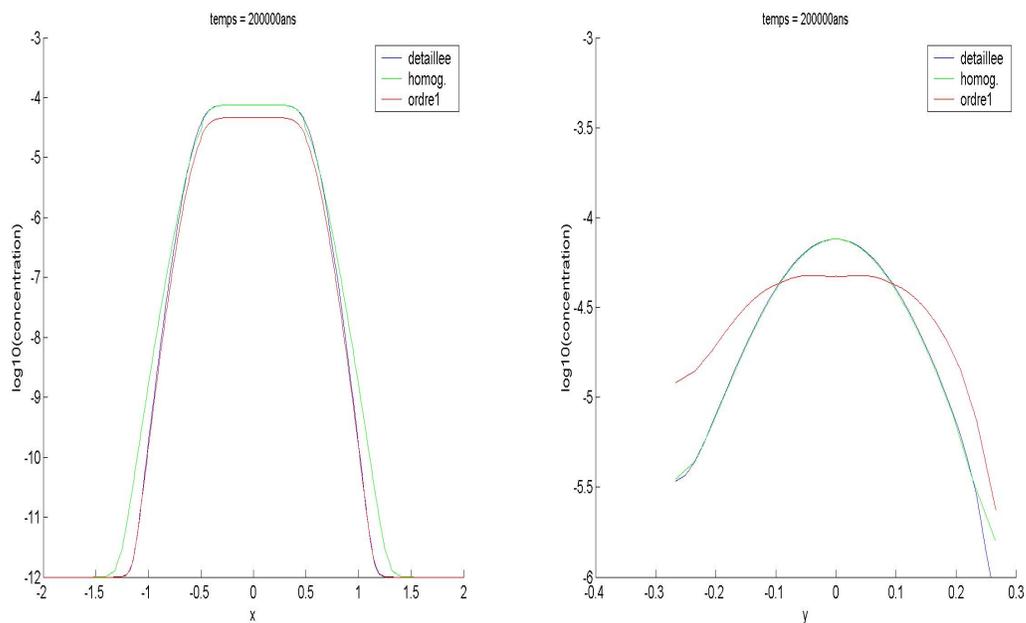


FIG. 2.17 – Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps  $t = 200000$  ans

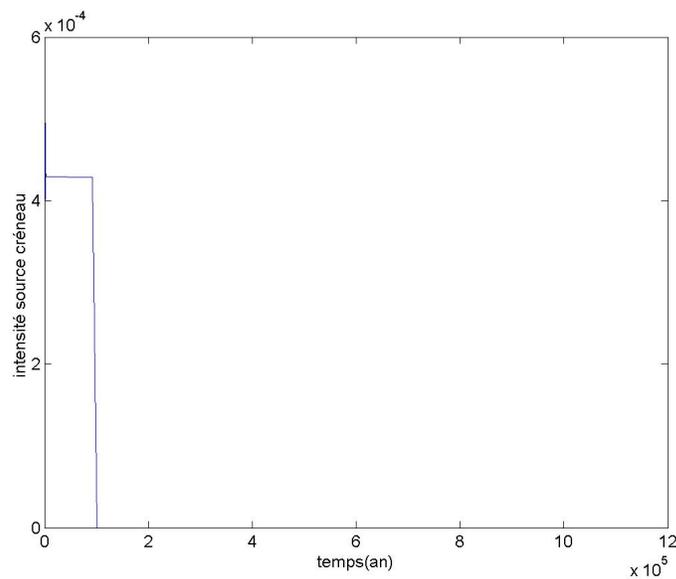


FIG. 2.18 – Evolution d'une source de type créneau au cours du temps

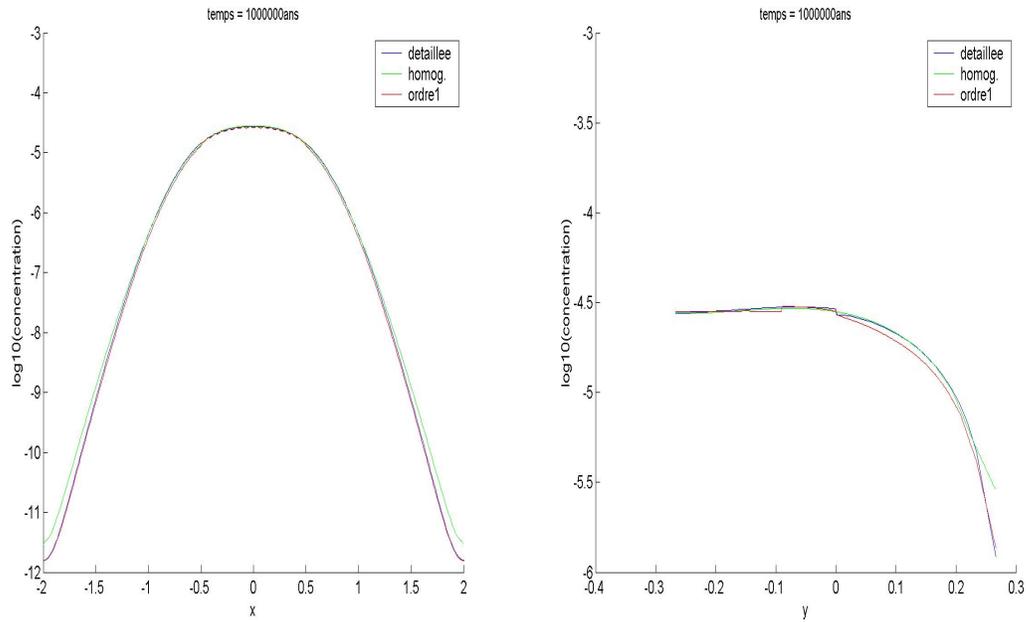


FIG. 2.19 – Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 15 modules, diffusion homogène, source iode (Fig. 2.8), au temps  $t = 10000000$  ans

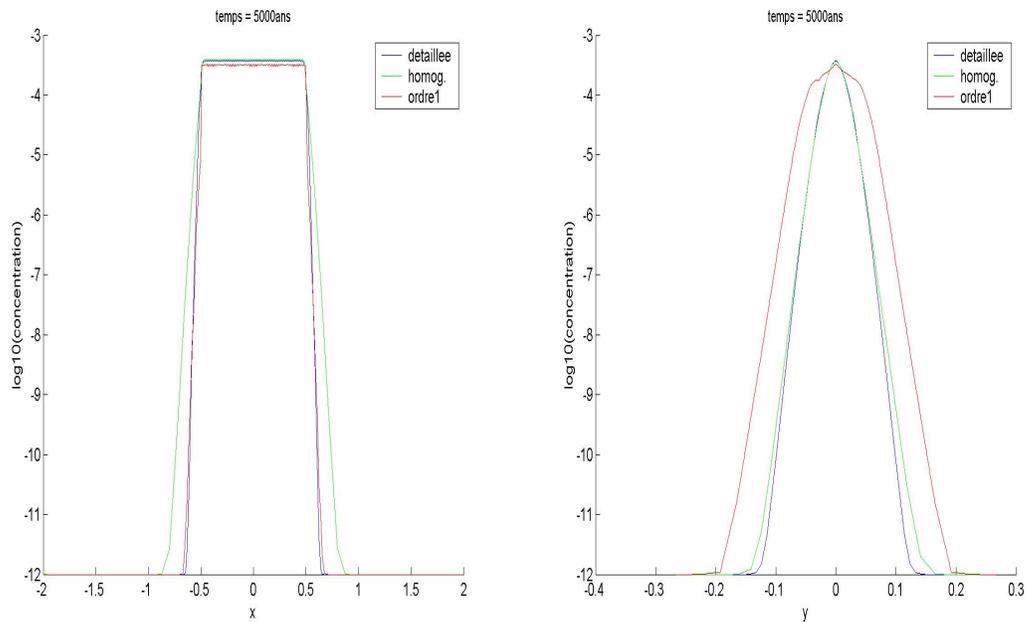


FIG. 2.20 – Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, source iode (Fig. 2.8), au temps  $t = 5000$  ans

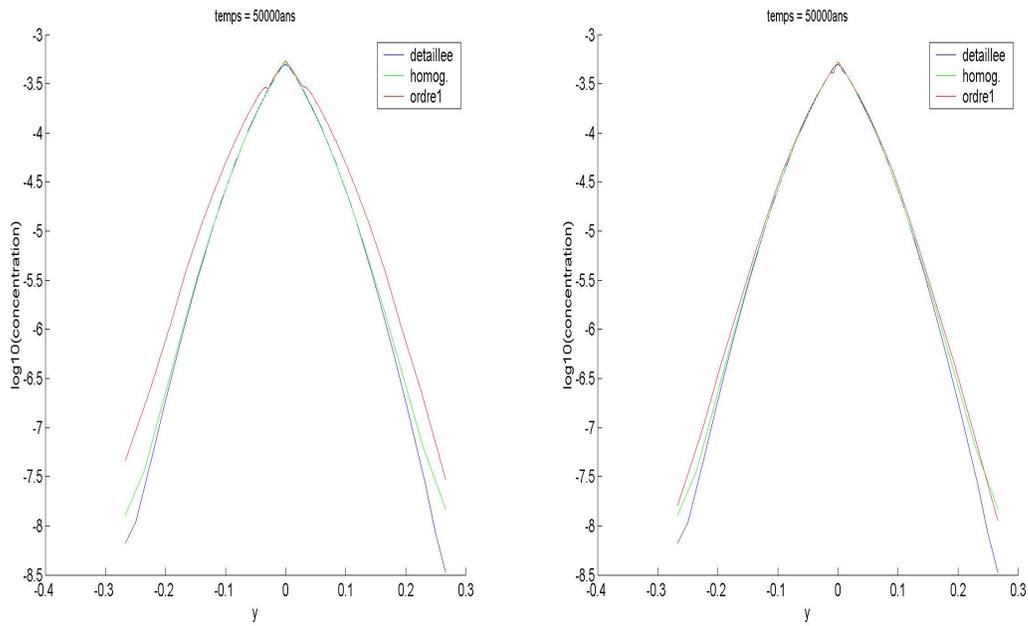


FIG. 2.21 – Comparaison des coupes verticales des valeurs en base  $\log_{10}$  des 3 simulations pour des distances de recollement respectivement de  $\varepsilon \log(1./\varepsilon)$  (à gauche) et  $\varepsilon$  (à droite) pour l'ordre1 pour 60 modules, diffusion homogène, source de type créneau, au temps  $t = 50000$  ans

TAB. 2.1 – Précision relative en  $\|\cdot\|_{L^\infty}$  de la simulation d'ordre 1 par rapport à la référence en fonction de la valeur de  $\epsilon$

temps (an) \ $\epsilon$	1/5	1/15	1/30	1/45	1/60
5e3	2.552	1.1044	0.2047	0.0834	0.0573
5e4	1.8415	0.8229	0.5571	0.1502	0.1302
1e5	NS	0.4419	0.3601	0.3479	0.2916
2e5	NS	0.3725	0.2352	0.0897	0.0586
1e6	NS	0.3725	0.0287	0.0130	0.0134

TAB. 2.2 – Précision relative en  $\|\cdot\|_{L^\infty}$  de la simulation d'ordre 0 par rapport à la référence en fonction de la valeur de  $\epsilon$

temps (an) \ $\epsilon$	1/5	1/15	1/30	1/45	1/60
5e3	0.2265	0.15	0.1259	0.0187	0.0149
5e4	0.1890	0.0486	0.0100	0.0083	0.0265
1e5	0.1482	0.0274	0.0058	0.0055	0.0087
2e5		1.89e-4	7.04e-4	8.6e-4	9.2e-4
1e6		0.0175	0.0090	0.0067	0.0054

représenter correctement ces oscillations, n'est pas pertinent. Pour mémoire,  $\epsilon$  représente l'inverse du nombre de modules, soit concrètement,  $\epsilon \approx 0.067$ . Cette valeur, trop grande pour une analyse asymptotique valable, compte tenu de l'estimation d'erreur (2.4.1), non seulement ne permet pas au modèle d'ordre 1 d'améliorer la précision mais comme on l'a vu précédemment, il enlève toute applicabilité aux théorèmes de convergence. Nous présenterons dorénavant les simulations des modèles pour une configuration de zone de stockage avec 60 modules.

## 2.5.2 Un cas de diffusion multicouches

Nous travaillons pour une configuration de 60 modules. Nous conservons les dimensions et la diffusion effective du cas Andra, figure 2.7. Nous travaillons avec une source créneau qui cesse d'émettre au temps 100000 ans représentée sur la figure 2.18. Les simulations détaillée, celles homogénéisée, celles du terme  $c_e^0$  et des problèmes auxiliaires sont effectuées sur des maillages respectifs de 117368, 6160, 8280 et 11750 quadrangles. Les tailles respectives de ces maillages se justifient de la même manière que dans le cas monocouche. Notons que, comme la taille d'un module est plus petite dans le cas de 60 modules, le maillage est plus fin. Le comportement de la simulation détaillée en fonction du temps est décrit sur les figures 2.23, 2.24, 2.25, 2.26 et 2.27. Comparons les courbes verticales de cas identiques avec 60 modules en changeant uniquement la diffusion de la

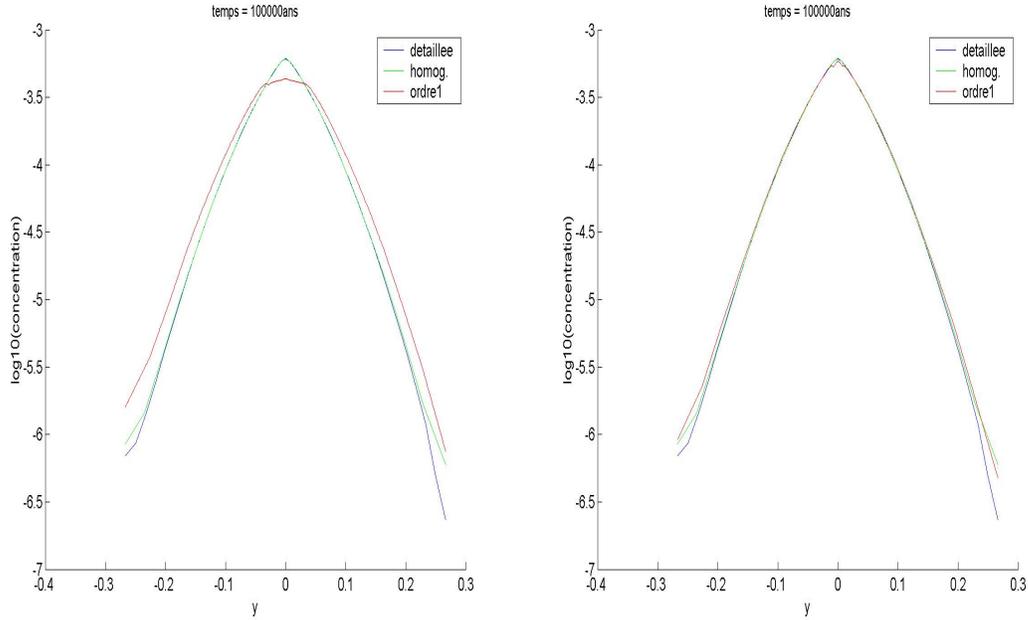


FIG. 2.22 – Comparaison des coupes verticales des valeurs en base  $\log_{10}$  des 3 simulations pour des distances de recollement de  $\varepsilon \log(1./\varepsilon)$  (à gauche) et  $\varepsilon$  (à droite) pour 60 modules, diffusion homogène, source de type créneau, au temps  $t = 100000$  ans

couche hôte par exemple pour le temps 100000 ans, figures 2.22 et 2.26, respectivement cas homogène et hétérogène. La couche hôte avec une faible diffusion joue bien son rôle de barrière.

Les comparaisons avec les simulations homogénéisée et d'ordre 1 sont représentées figures 2.29, 2.30, 2.31, 2.32 et 2.33. Précisons tout d'abord que l'épaisseur de la couche hôte est représentée sur la coupe verticale de la figure 2.29. Le modèle homogénéisé ne prend évidemment pas en compte les oscillations en temps court, qui du fait de la source représentée figure 2.18, sont importantes. Nous pouvons remarquer que les valeurs de la simulation homogénéisée sont systématiquement sous-évaluées près du site de stockage. C'est tout à fait logique dans la mesure où le modèle d'ordre 0 ne représente que le comportement "moyen", et de plus, aux temps longs. La propagation à travers les couches est mal représentée par le modèle homogénéisé puisqu'il ne peut pas tenir compte de la faible diffusion de la couche hôte, celle-ci disparaissant dans l'asymptotique avec l'adimensionalisation considérée ici. Ce phénomène ne fait que s'accroître au cours des temps de simulation. Le modèle homogénéisé ne peut pas représenter le confinement très important des radionucléides dans la couche hôte, particulièrement si la durée d'émission de la source est longue, les radionucléides restant au voisinage du stockage dans le callovo-oxfordien, de par la plus faible diffusivité de la couche hôte.

En ce qui concerne le modèle par développement asymptotique, nous avons d'abord

effectué une simulation avec une hauteur de domaine intérieur  $G_\varepsilon$ , noté  $h_{G_\varepsilon}$ , de taille  $\varepsilon \log(1/\varepsilon)$ . Les coupes verticales des 3 simulations pour les temps  $t= 5000$  ans et  $t= 50000$  sont représentées figure 2.28. Le paramètre  $h_{G_\varepsilon}$  fixé à  $\varepsilon \log(1/\varepsilon)$  représente la distance théorique permettant le recollement des flux. Mais ceci est vrai à partir du moment où le phénomène de diffusion est prépondérant au niveau du recollement. Ici, la diffusion de la couche hôte est trop faible pour que le phénomène de diffusion parvienne à être prépondérant à ce niveau dans un délai raisonnable. Nous allons tenter de remédier numériquement à ce problème en réduisant la taille de  $h_{G_\varepsilon}$  à  $\varepsilon$  pour être à l'intérieur de la couche hôte. Ainsi, le phénomène de recollement a lieu dans un endroit où le phénomène de diffusion est prépondérant, conformément à la théorie. D'un point de vue théorique, il serait bon de développer un modèle tenant compte de cette lenteur de migration par diffusion, comme nous le suggérons dans la conclusion. Les coupes des valeurs des nouvelles simulations, avec  $h_{G_\varepsilon} = \varepsilon$ , sont représentées sur les figures 2.29, 2.30, 2.31, 2.32 et 2.33. Comparons les simulations du modèle par développement asymptotique pour les valeurs de  $h_{G_\varepsilon} = \varepsilon \log(1/\varepsilon)$  et  $h_{G_\varepsilon} = \varepsilon$  respectivement représentées sur les figures 2.28 et 2.29 au temps 5000 ans. Nous constatons que nous améliorons artificiellement le comportement général du modèle par développement asymptotique vis à vis du modèle détaillé en ce qui concerne les coupes verticales en temps court. Les oscillations sont effectivement représentées par l'ordre 1. Mais elles ont une amplitude propre moins élevée que celles de la simulation détaillée. D'autre part, aucune amélioration ne se produit lorsque l'on considère une évaluation numérique de la qualité du modèle par développement par la norme  $\|\cdot\|_\infty$ . Ce type de problème est vraisemblablement relié à l'inadaptation du facteur  $\varepsilon$  de représenter les oscillations, qui, numériquement ne sont pas du même ordre. Abordons les temps plus longs représentés sur les figures 2.31, 2.32 et 2.33. Malheureusement, dans le cas d'une diffusion hétérogène,  $c$  et  $c_\varepsilon^0$  ne sont pas de bonnes approximations du comportement "moyen" de la concentration en temps longs. La propagation du contaminant par diffusion à travers les couches est bien trop importante par rapport aux simulations du modèle détaillé obtenues. Ceci est dû au fait que la couche hôte faiblement diffusive n'est pas prise en compte dans la définition de  $c$  et  $c_\varepsilon^0$  (cf. (2.14)–(2.19) et (2.28)–(2.33)). En temps longs, lorsque la contribution  $\varepsilon w\Phi$  disparaît, la contribution principale au modèle d'ordre 1 devient le terme  $c_\varepsilon^0$ . Alors, il n'est plus à même de décrire le contaminant retenu dans la couche hôte. Pour pallier ce problème, nous allons numériquement tenir compte de la couche hôte très peu diffusive pour simuler  $c$  et  $c_\varepsilon^0$ . Les nouvelles simulations du modèle homogénéisé et par développement asymptotique sont représentées sur les figures 2.34, 2.35, 2.36, 2.37 et 2.38. Nous constatons, en particulier sur les figures 2.36, 2.37 et 2.38 que le comportement général décrit par les modèles homogénéisé et par développement asymptotique d'ordre 1 est bien plus conforme au comportement du modèle détaillé en temps longs. Le phénomène de rétention des radionucléides par la couche hôte est notamment à présent retranscrit sur les simulations de ces deux modèles. En revanche, cela n'améliore aucunement la qualité de représentation de l'ordre des oscillations, comme on le voit sur les figures 2.34 à 2.38.

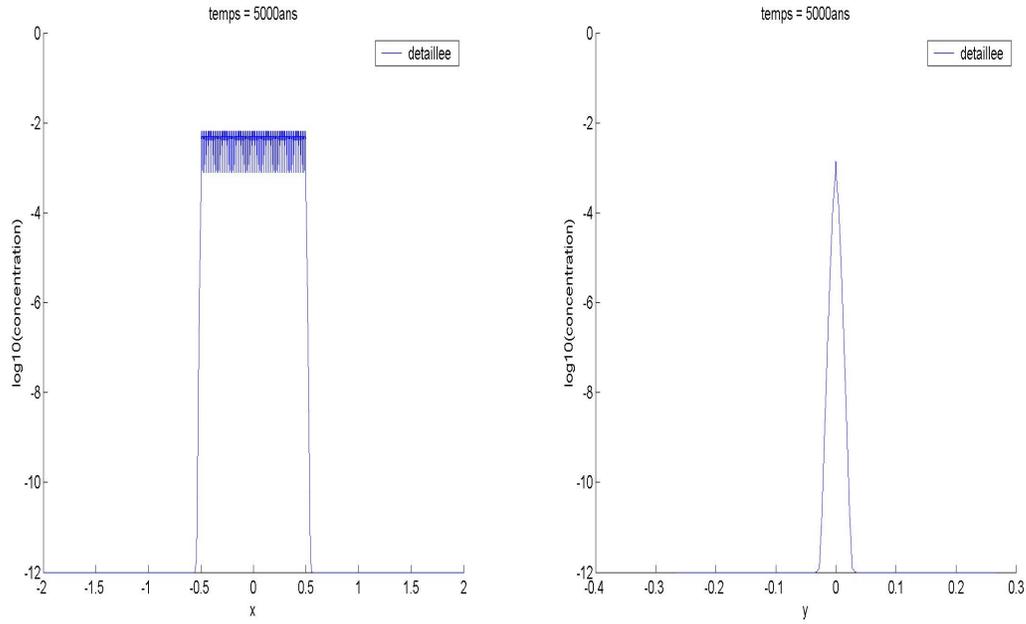


FIG. 2.23 – Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base  $\log_{10}$  de la simulation détaillée pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps  $t = 5000$  ans

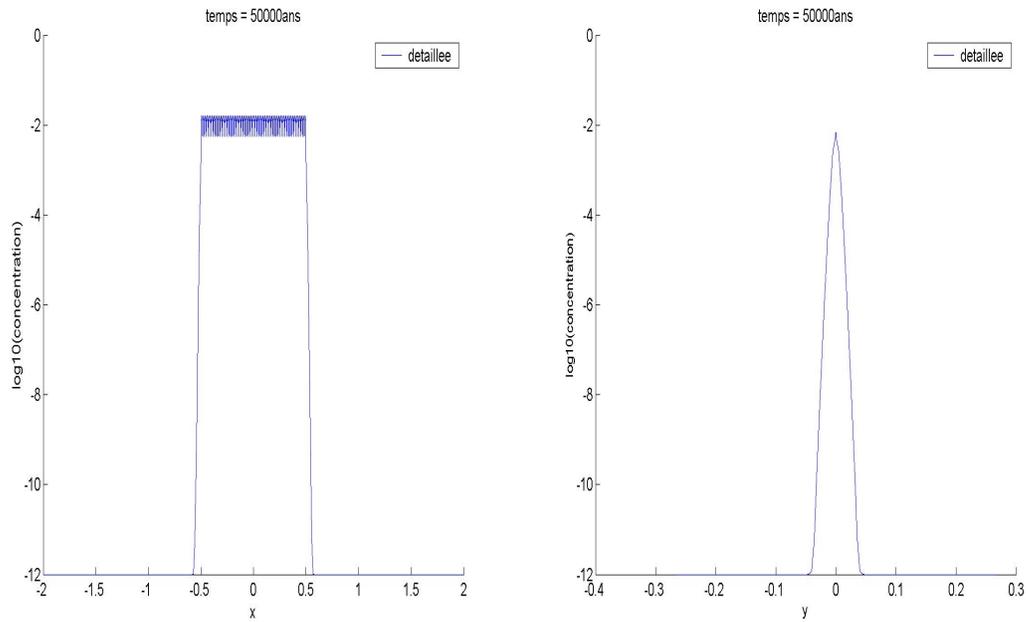


FIG. 2.24 – Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base  $\log_{10}$  de la simulation détaillée pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps  $t = 50000$  ans

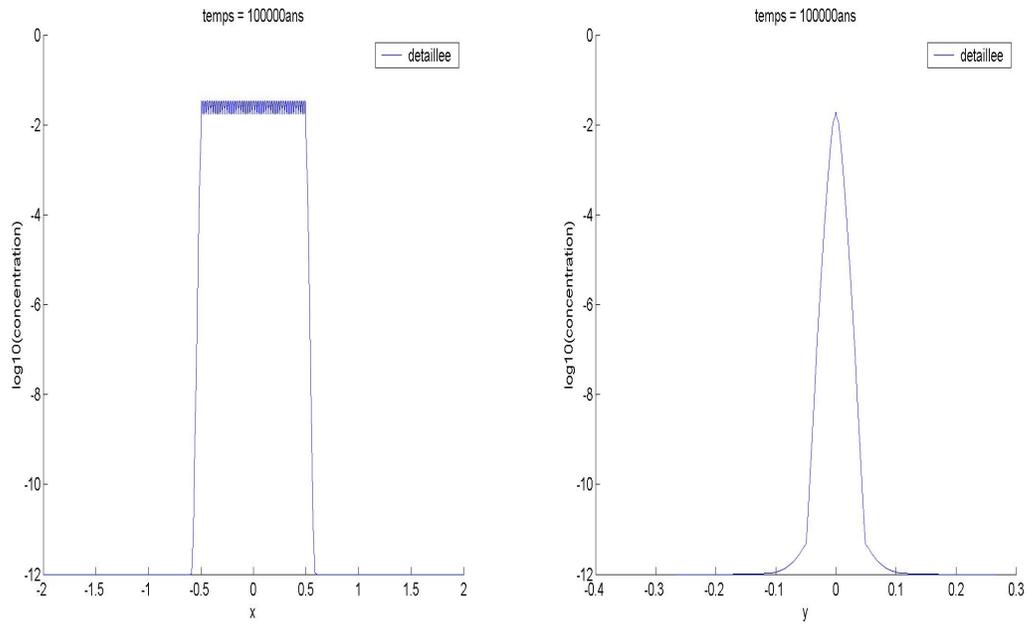


FIG. 2.25 – Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base  $\log_{10}$  de la simulation détaillée pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps  $t = 100000$  ans

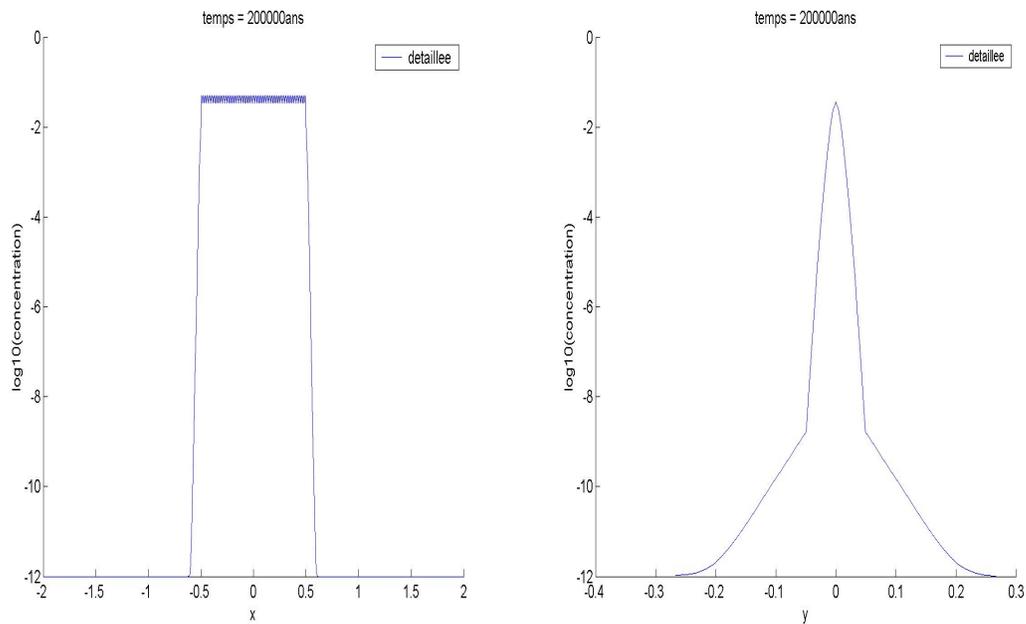


FIG. 2.26 – Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base  $\log_{10}$  de la simulation détaillée pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps  $t = 200000$  ans

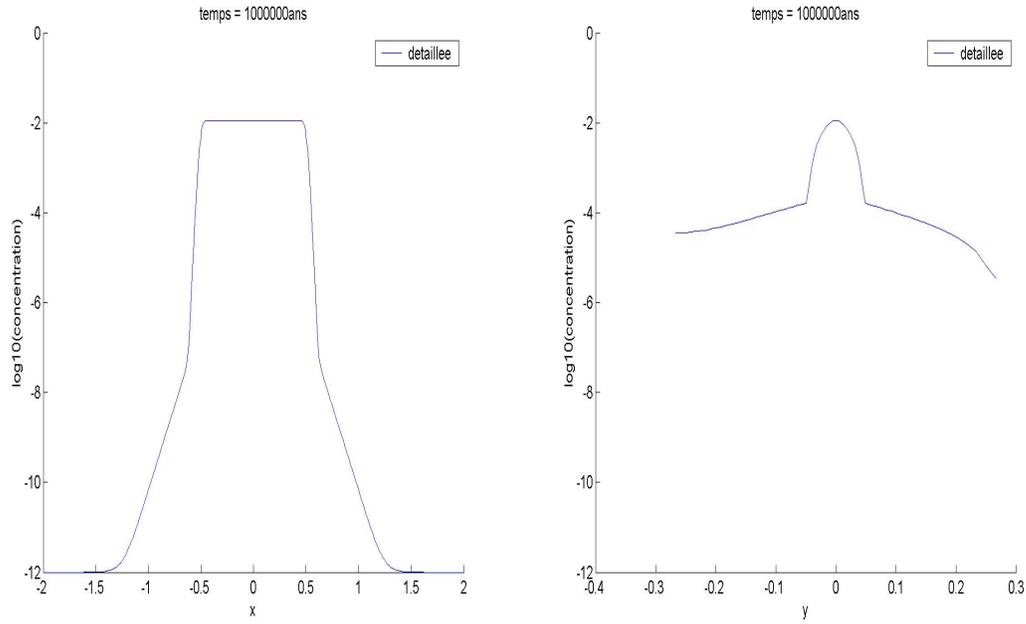


FIG. 2.27 – Coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base  $\log_{10}$  de la simulation détaillée pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps  $t = 1000000$  ans

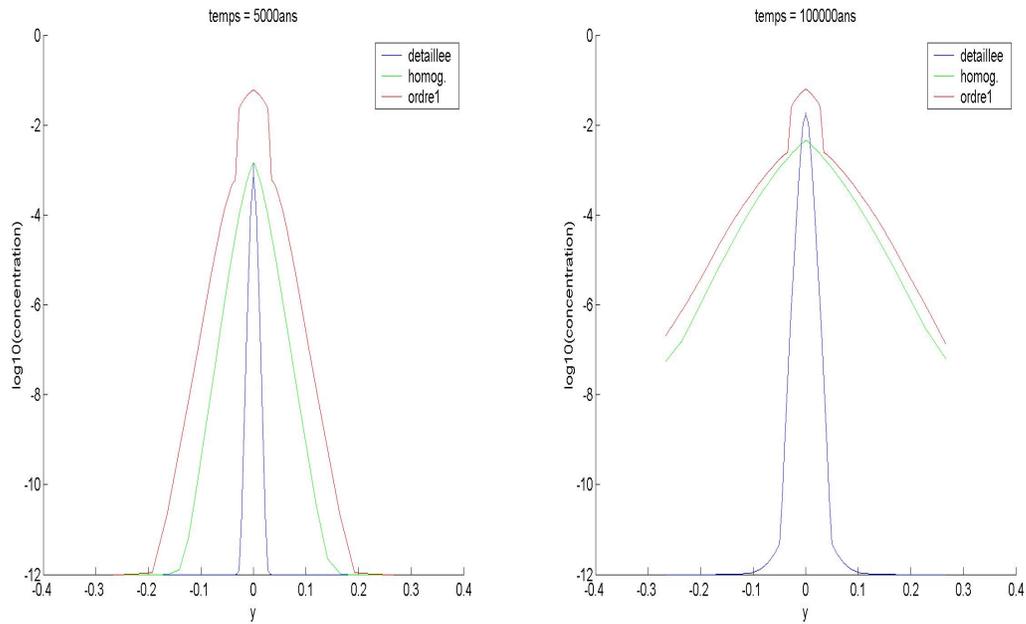


FIG. 2.28 – Comparaison des coupes verticales des valeurs en base  $\log_{10}$  des 3 simulations au temps  $t = 5000$  ans (à gauche) et  $t = 50000$  ans (à droite) pour 60 modules, hauteur  $G_\varepsilon = \varepsilon \log(1/\varepsilon)$  pour calcul ordre 1, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18)

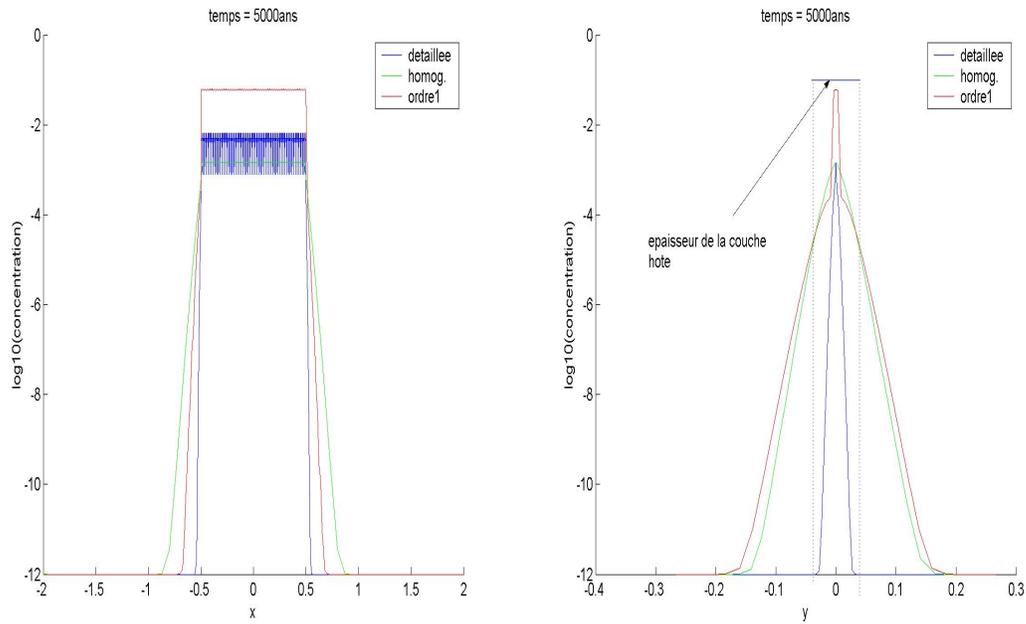


FIG. 2.29 – Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps  $t = 5000$  ans

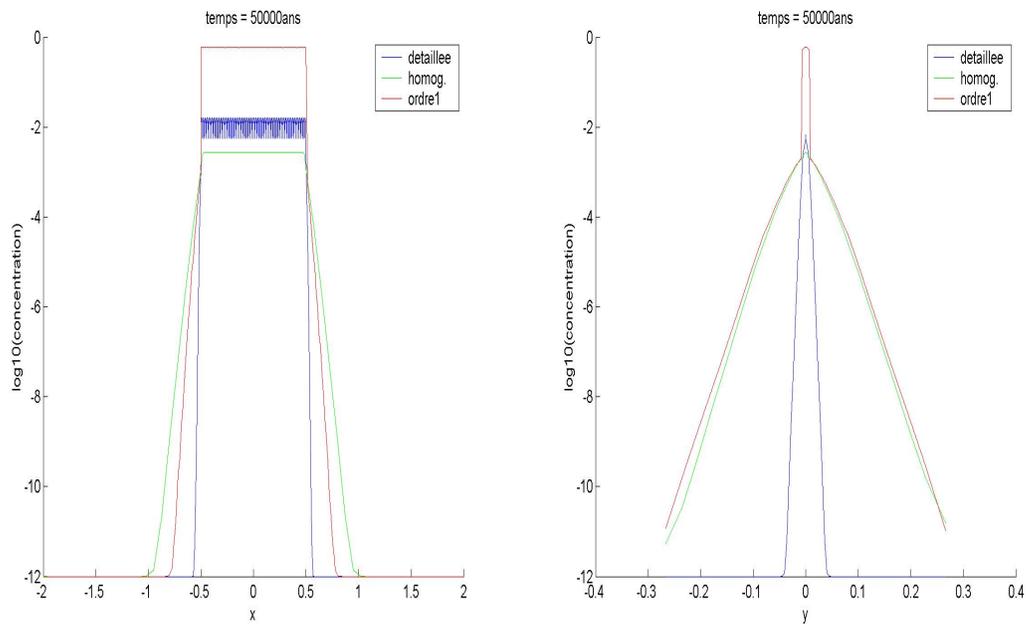


FIG. 2.30 – Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps  $t = 20000$  ans

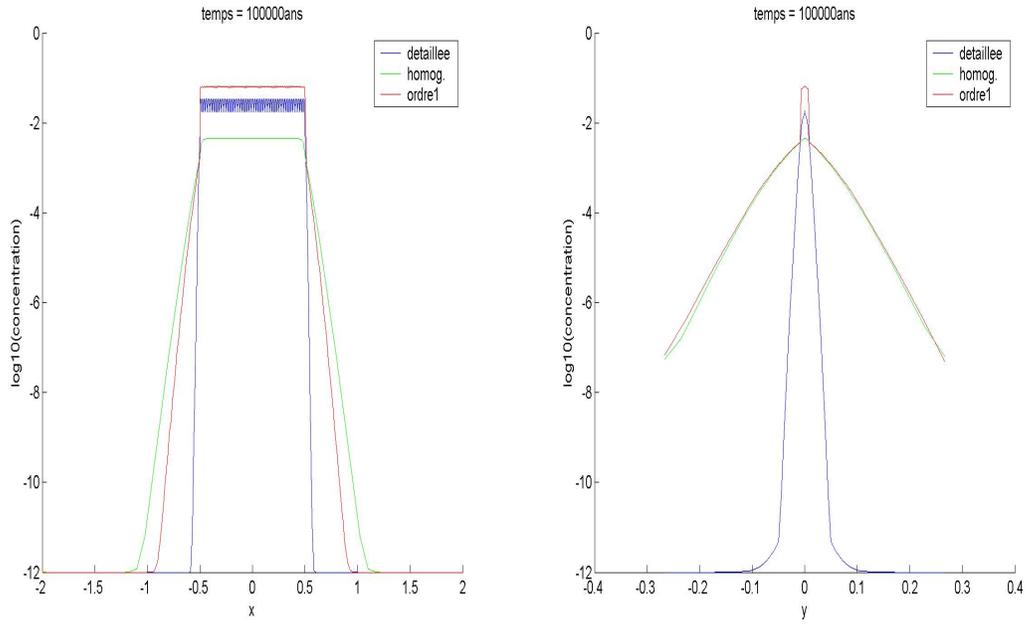


FIG. 2.31 – Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps  $t = 50000$  ans

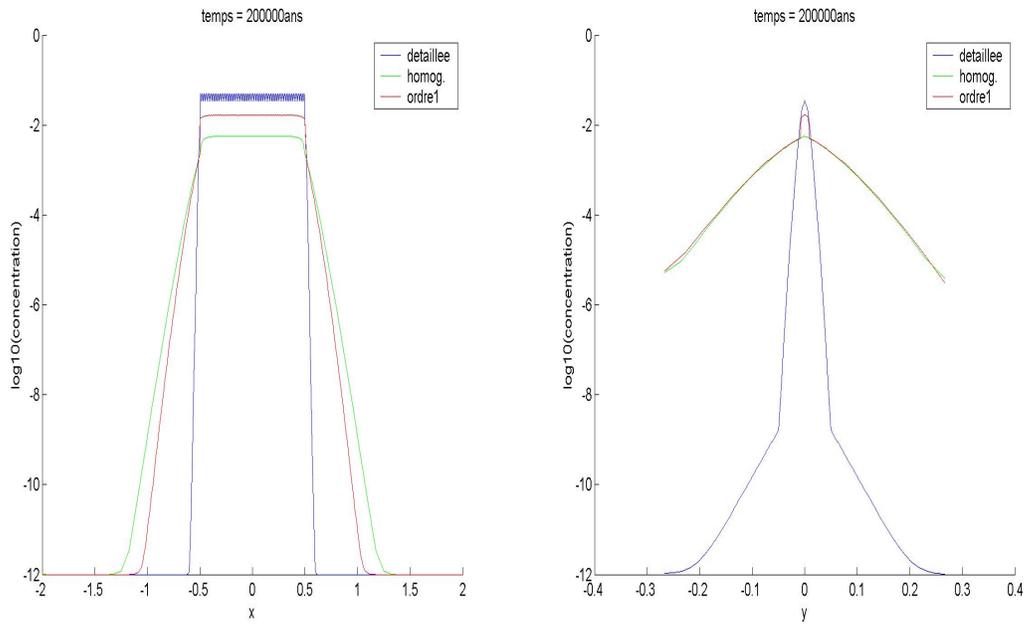


FIG. 2.32 – Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps  $t = 100000$  ans

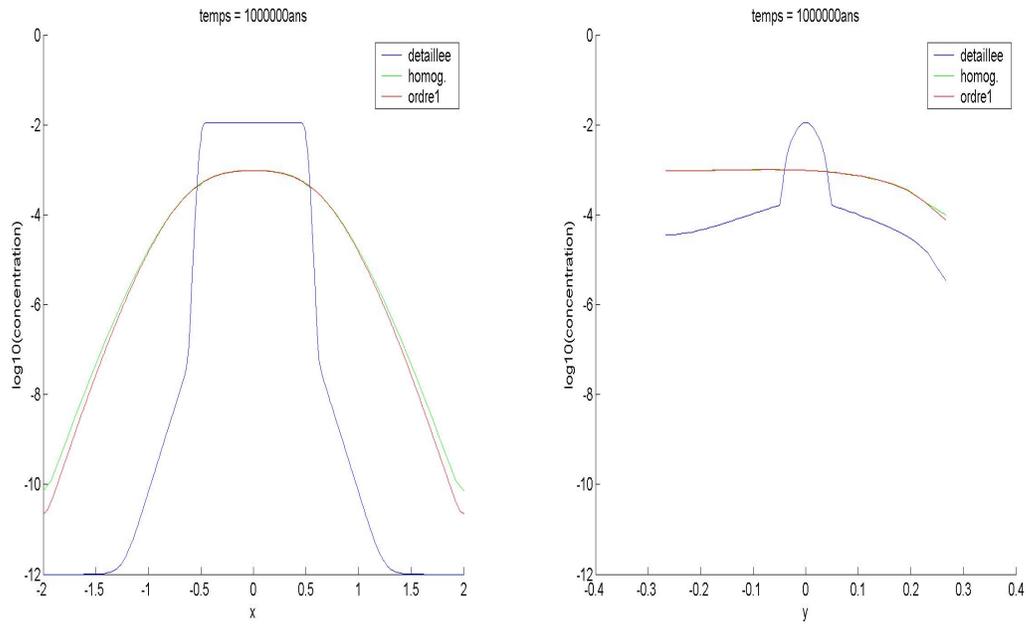


FIG. 2.33 – Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps  $t = 1000000$  ans

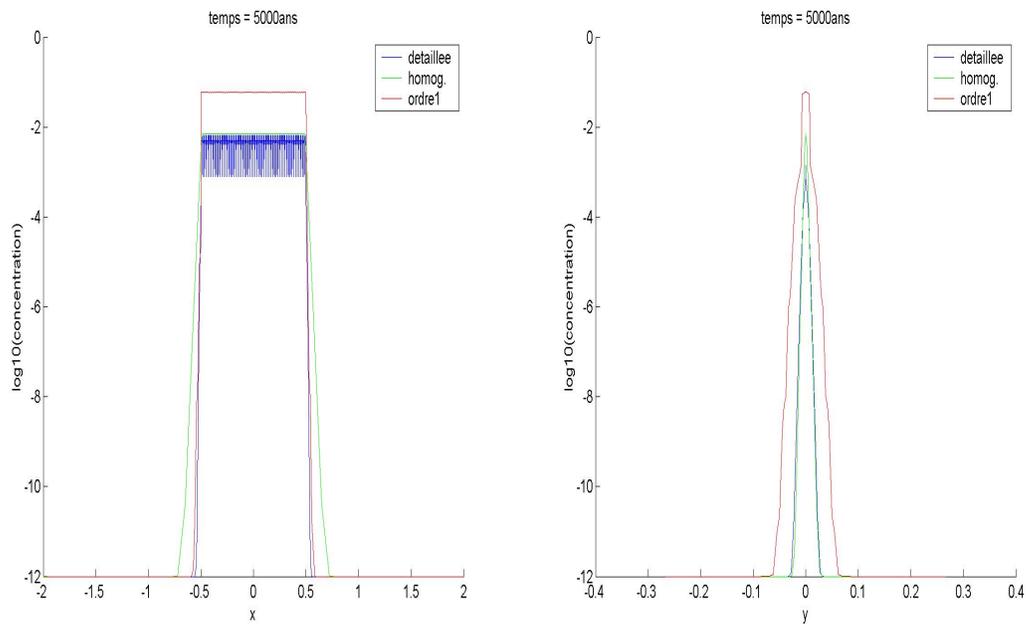


FIG. 2.34 – Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 60 modules,  $c_e^0$  modifié, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps  $t = 5000$  ans

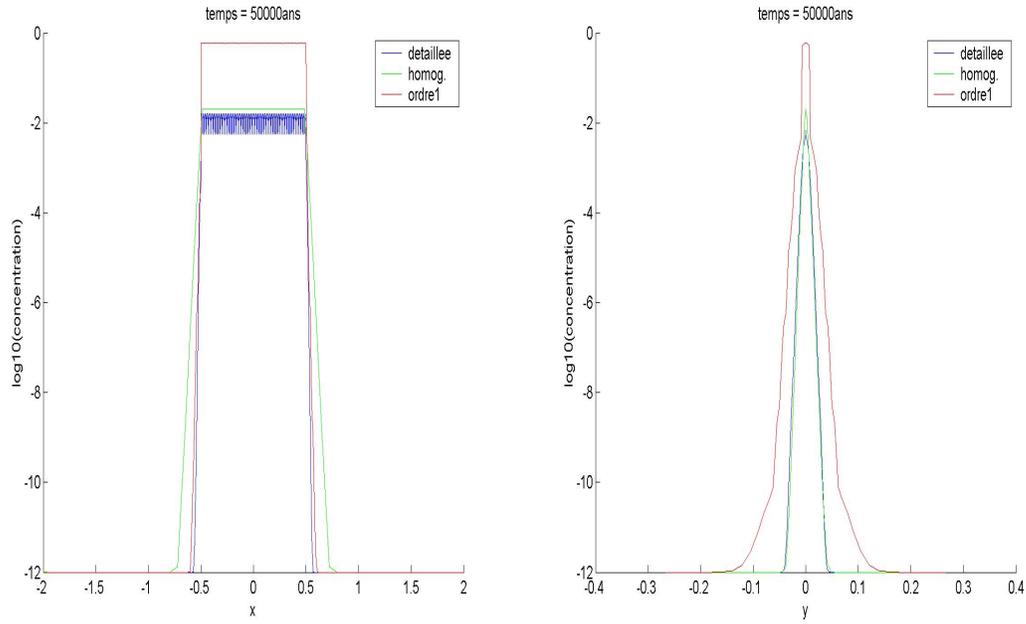


FIG. 2.35 – Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base  $\log_{10}$  des 3 simulations pour 60 modules,  $c_e^0$  modifié, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps  $t = 20000$  ans

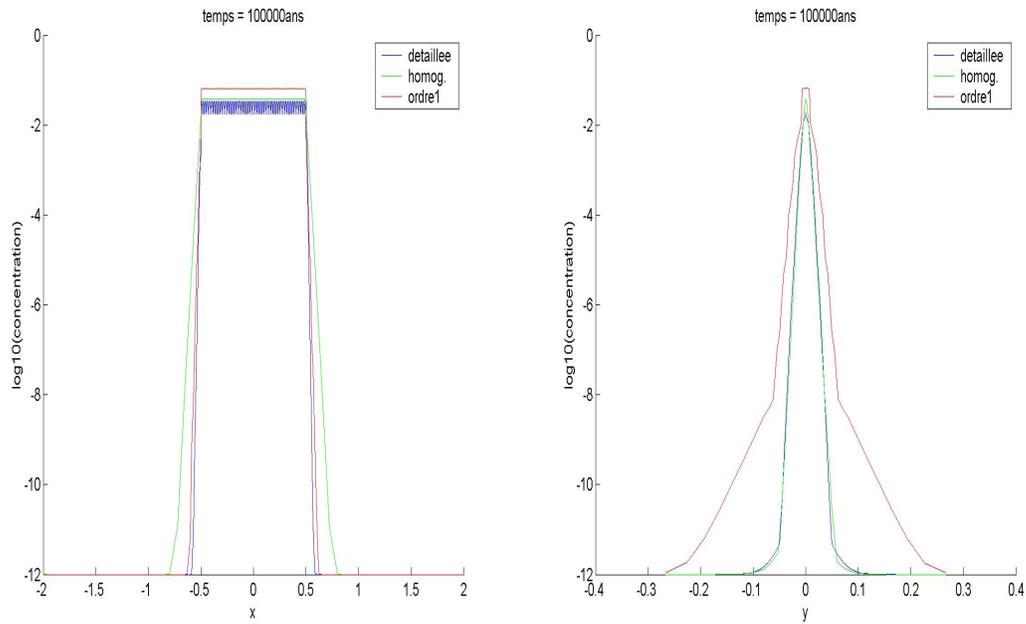


FIG. 2.36 – Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base  $\log_{10}$  des 3 simulations pour 60 modules,  $c_e^0$  modifié, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps  $t = 50000$  ans

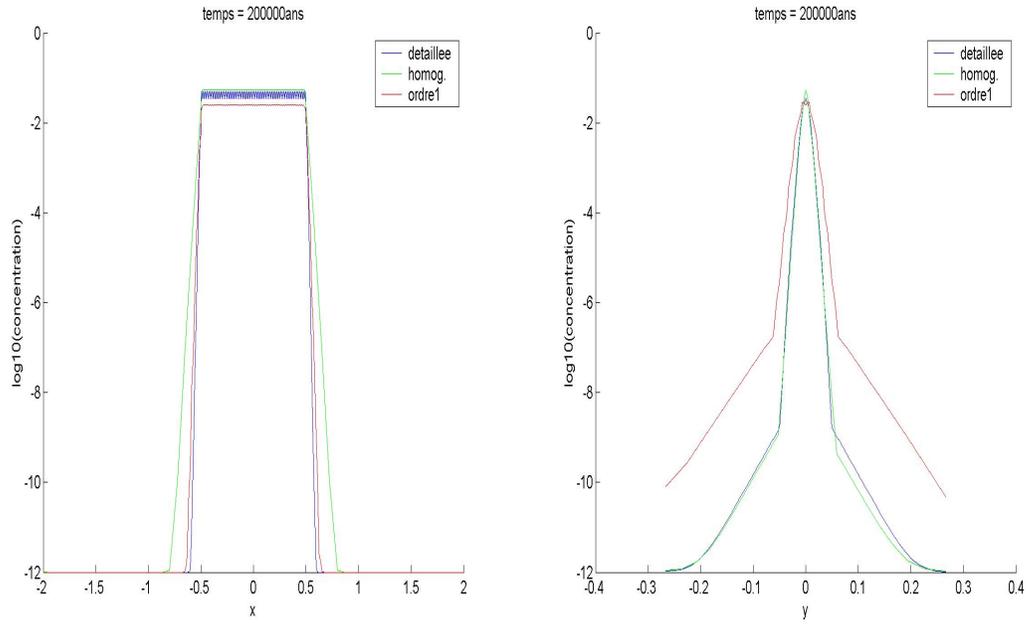


FIG. 2.37 – Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base  $\log_{10}$  des 3 simulations pour 60 modules,  $c_e^0$  modifié, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps  $t = 100000$  ans

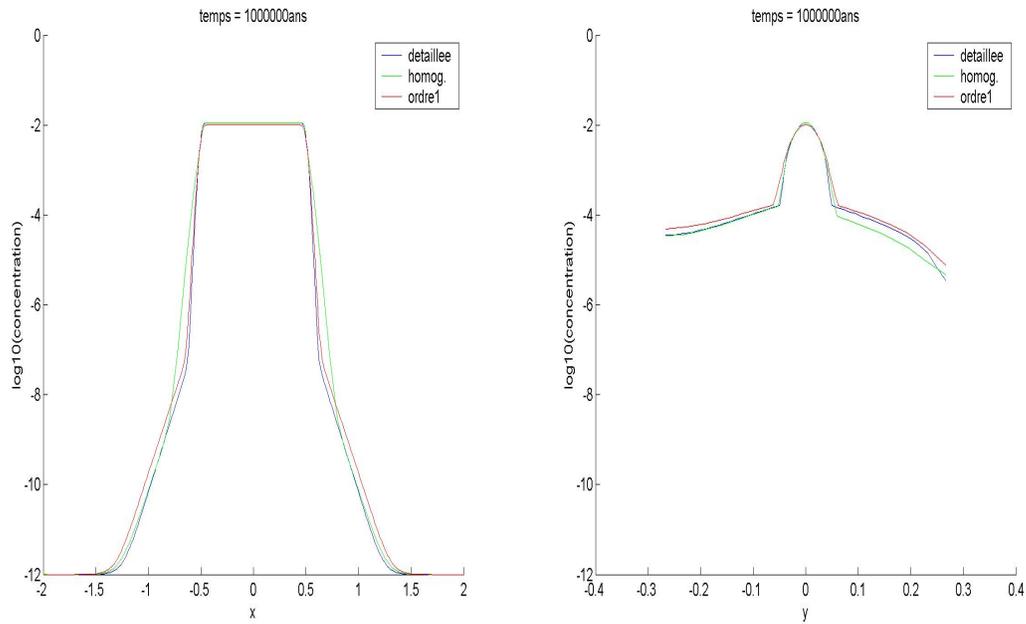


FIG. 2.38 – Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base  $\log_{10}$  des 3 simulations pour 60 modules,  $c_e^0$  modifié, diffusion hétérogène, source créneau (Fig. 2.18), au temps  $t = 1000000$  ans

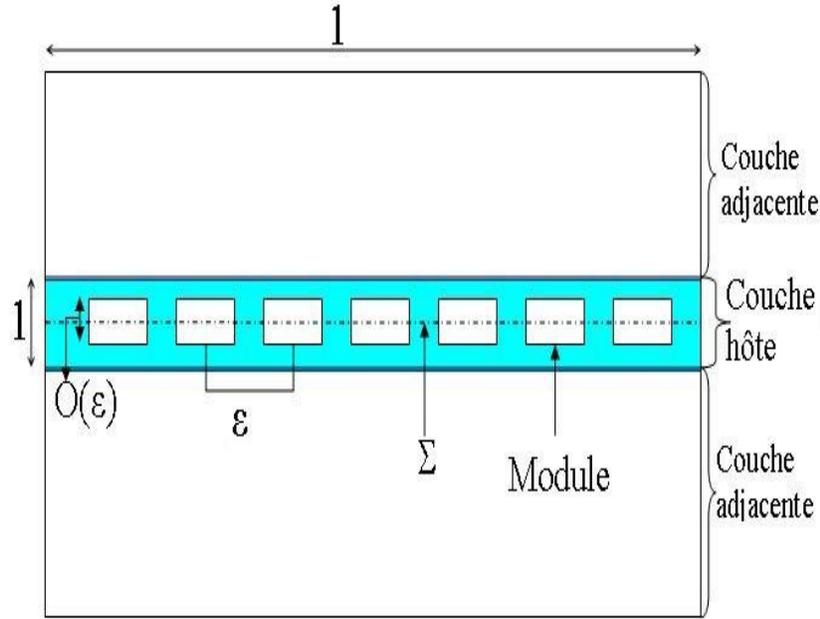


FIG. 2.39 – Les trois couches du sol contenant les modules : nouvelle adimensionalisation

## 2.6 Adaptation des modèles au cas hétérogène

### 2.6.1 Les modèles

Nous souhaitons adapter les modèles (2.14)–(2.19) et (2.20). A cette fin, nous procédons à une nouvelle adimensionalisation. Dans le sens longitudinal des modules, nous continuons à adimensionaliser le domaine par la longueur du stockage. Dans le sens transversal des modules, nous adimensionalisons par la hauteur de la couche hôte. Nous introduisons alors le nouveau petit paramètre  $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ ,  $\varepsilon_1 = \frac{l_{inter}}{L}$ ,  $\varepsilon_2 = \frac{h_M}{l}$ , où  $l_{inter}$  est la distance entre les isobarycentres de modules successifs et  $h_M$  est la hauteur d'un module et nous supposons de plus que  $\varepsilon_2 = \lambda \varepsilon_1$ ,  $\lambda \in \mathbb{R}$ ,  $\lambda = O(1)$ . Les effets de la nouvelle adimensionalisation sont représentés sur la figure 2.39.

Nous remarquons notamment que la hauteur de la couche hôte devient maintenant indépendante du paramètre  $\varepsilon$ . L'étude du nouveau modèle homogénéisé, que nous notons toujours  $c$ , repose toujours sur les estimations a priori définies par les relations (2.11)–(2.13).

**Théorème 2.6.1** *Alors  $c$  est solution du modèle homogénéisé suivant :*

$$\omega_{nh} \frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div}(A \nabla c) + (v \cdot \nabla)c + \lambda \omega c = 0 \quad \text{dans } \hat{\Omega}^T = (\Omega/\Sigma) \times ]0, T[ \quad (2.38)$$

$$c(x, 0) = c_0(x), \quad x \in \hat{\Omega} = \Omega/\Sigma \quad (2.39)$$

$$c = 0 \quad \text{sur } S_1 \quad (2.40)$$

$$n \cdot (A \nabla c - v c) = 0 \quad \text{sur } S_2 \quad (2.41)$$

$$[c] = 0 \quad \text{sur } \Sigma \quad (2.42)$$

$$[e_2 \cdot (A \nabla c - v^{nh} c)] = -2|\partial M_\varepsilon| \Phi \quad \text{sur } \Sigma \quad (2.43)$$

**Preuve 2.6.1** *Soit  $\psi \in C^\infty([0, T]; C_0^\infty(\Omega))$  tel que  $\psi(\cdot, T) = 0$ . Utilisant  $\psi$  en tant que fonction test dans (2.2)–(2.6), on obtient :  $\int_{\Omega_\varepsilon^T} \omega c_\varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} - \int_{\Omega_\varepsilon} c_0 \psi(\cdot, 0) + \int_{\Omega_\varepsilon^T} A^\varepsilon \nabla c_\varepsilon \nabla \psi + \int_{\Omega_\varepsilon^T} (v^\varepsilon \cdot \nabla) c_\varepsilon \psi + \int_{\Omega_\varepsilon} \omega^\varepsilon \lambda c_\varepsilon \psi - \int_0^T \Phi \sum_{i \in J(\varepsilon)} \int_{\Gamma_\varepsilon^i} \psi = 0$ . Les limites des 5 premières intégrales sont obtenues de manière directe. Par exemple,*

$$\int_{\Omega_\varepsilon^T} A^\varepsilon \nabla c_\varepsilon \nabla \psi = \int_{\Omega_\varepsilon^T} A^{nh} \nabla c_\varepsilon \nabla \psi + \int_{\Omega_\varepsilon^T} A^h \nabla c_\varepsilon \nabla \psi = I_\varepsilon^1 + I_\varepsilon^2.$$

$I_\varepsilon^1 \rightarrow \int_{\Omega^T} A^{nh} \nabla c_\varepsilon \nabla \psi$  et  $I_\varepsilon^2 \rightarrow \int_{\Omega^T} A^h \nabla c_\varepsilon \nabla \psi$ . Le plus important est la dernière intégrale :  $\int_{\Gamma_\varepsilon^i} \psi = (\psi(x_\varepsilon^i, t) + O(\varepsilon)) |\Gamma_\varepsilon^i| = \psi(x_\varepsilon^i, t) |M_\varepsilon|$  où  $x_\varepsilon^i = ((x_\varepsilon^i)', 0)$  est un point arbitraire de  $\varepsilon M_\alpha \times 0$ . Mais alors,

$$\sum_{i \in J(\varepsilon)} \int_{\Gamma_\varepsilon^i} \psi(x, t) d\Gamma_\varepsilon^i \rightarrow |M_\varepsilon| \int_\Sigma \psi(x_1, 0, t) dx_1$$

Le développement asymptotique d'ordre 1 va lui être recherché dans  $G_\varepsilon$ , domaine intérieur, sous la forme suivante :

$$c_\varepsilon \simeq c_\varepsilon^0 + \varepsilon_k \left( \chi_\varepsilon^k \left( \frac{x}{\varepsilon} \right) \frac{\partial c_\varepsilon^0}{\partial x_k} + w_\varepsilon^k \left( \frac{x}{\varepsilon} \right) \Phi - c_\varepsilon^0 \rho_\varepsilon^k \left( \frac{x}{\varepsilon} \right) v_k^h \right) \equiv c_\varepsilon^1 \quad (2.44)$$

Les problèmes auxiliaires modifiés sont de la forme suivante :

$$I \begin{cases} -\nabla \cdot (\bar{A}^k \nabla (\chi_\varepsilon^k + y_k)) = 0 & \text{dans } G_\varepsilon \\ n \cdot (\bar{A}^k \nabla (\chi_\varepsilon^k + (1 + y_k))) = 0 & \text{sur } \partial M_\varepsilon \\ \chi_\varepsilon^k \text{ est 1-périodique en } y_1 \\ \lim_{y_2 \rightarrow \infty} \nabla \chi_\varepsilon^k = 0 \end{cases} \quad (2.45)$$

$$II \quad \begin{cases} -\nabla \cdot (\bar{A}^k \nabla w_\epsilon^k) = 0 & \text{dans } G_\epsilon \\ n_1 \cdot (\bar{A}^k \nabla w_\epsilon^k) = 1/2 & \text{sur } \partial M_\epsilon \\ n_2 \cdot (\bar{A}^k \nabla w_\epsilon^k) = 1/2 & \text{sur } \partial M_\epsilon \\ w_\epsilon^k \text{ est 1-périodique en } y_1 \\ \lim_{y_2 \rightarrow \infty} \bar{A}^k \nabla w_\epsilon^k = \pm 1/4 |\partial M_\epsilon| \end{cases} \quad (2.46)$$

$$III \quad \begin{cases} -\nabla \cdot (\bar{A}^k \nabla \rho_\epsilon^k) = 0 & \text{dans } G_\epsilon \\ n \cdot (\bar{A}^k \nabla \rho_\epsilon^k + e_k) = 0 & \text{sur } \partial M_\epsilon \\ \rho_\epsilon^k \text{ est 1-périodique en } y_1 \\ \lim_{y_2 \rightarrow \infty} \nabla \rho_\epsilon^k = 0 \end{cases} \quad (2.47)$$

où  $\bar{A}^1 = \begin{pmatrix} A_{11}^h & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda} A_{22}^h \end{pmatrix}$  et  $\bar{A}^2 = \begin{pmatrix} \lambda A_{11}^h & 0 \\ 0 & A_{22}^h \end{pmatrix}$

**Preuve 2.6.2** On a :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx_1} c_\epsilon &= \frac{\partial c_\epsilon^0}{\partial x_1} + \epsilon_1 \frac{\partial}{\partial x_1} [\chi_\epsilon^1 \frac{\partial c_\epsilon^0}{\partial x_1}] + \lambda \epsilon_1 \frac{\partial}{\partial x_1} [\chi_\epsilon^2 \frac{\partial c_\epsilon^0}{\partial x_2}] + \frac{\partial}{\partial y_1} [\chi_\epsilon^1 \frac{\partial c_\epsilon^0}{\partial x_1}] + \lambda \frac{\partial}{\partial y_1} [\chi_\epsilon^2 \frac{\partial c_\epsilon^0}{\partial x_2}] + \\ &\quad \epsilon_j \frac{\partial w^j}{\partial x_1} \Phi + \frac{\partial w^1}{\partial y_1} \Phi + \lambda \frac{\partial w^2}{\partial y_1} \Phi - \\ &\quad (\epsilon_j \frac{\partial (c_\epsilon^0 \rho_\epsilon^j v^h)}{\partial x_1} + \frac{\partial (c_\epsilon^0 \rho_\epsilon^1 v^h)}{\partial y_1} + \lambda \frac{\partial (c_\epsilon^0 \rho_\epsilon^2 v^h)}{\partial y_1}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx_2} c_\epsilon &= \frac{\partial c_\epsilon^0}{\partial x_2} + \epsilon_1 \frac{\partial}{\partial x_2} [\chi_\epsilon^1 \frac{\partial c_\epsilon^0}{\partial x_1}] + \lambda \epsilon_1 \frac{\partial}{\partial x_2} [\chi_\epsilon^2 \frac{\partial c_\epsilon^0}{\partial x_2}] + \frac{1}{\lambda} \frac{\partial}{\partial y_2} [\chi_\epsilon^1 \frac{\partial c_\epsilon^0}{\partial x_1}] + \frac{\partial}{\partial y_2} [\chi_\epsilon^2 \frac{\partial c_\epsilon^0}{\partial x_2}] + \\ &\quad \epsilon_j \frac{\partial w^j}{\partial x_2} \Phi + \frac{1}{\lambda} \frac{\partial w^1}{\partial y_1} \Phi + \frac{\partial w^2}{\partial y_2} \Phi - \\ &\quad (\epsilon_j \frac{\partial (c_\epsilon^0 \rho_\epsilon^j v^h)}{\partial x_2} + c_\epsilon^0 \frac{1}{\lambda} \frac{\partial (\rho_\epsilon^1 v^h)}{\partial y_2} + c_\epsilon^0 \frac{\partial (\rho_\epsilon^2 v^h)}{\partial y_2}) \end{aligned}$$

Termes en  $\frac{1}{\epsilon_1}$  :

$$\begin{aligned} &-\frac{\partial c_\epsilon^0}{\partial x_1} \left[ \frac{\partial}{\partial y_1} A_{11} \frac{\partial \chi_\epsilon^1}{\partial y_1} + \frac{\partial}{\partial y_2} \frac{1}{\lambda} A_{22} \frac{\partial \chi_\epsilon^1}{\partial y_2} \right] - \\ &\frac{\partial c_\epsilon^0}{\partial x_2} \left[ \frac{\partial}{\partial y_1} \lambda A_{11} \frac{\partial \chi_\epsilon^2}{\partial y_1} + \frac{\partial}{\partial y_2} A_{22} \frac{\partial \chi_\epsilon^2}{\partial y_2} \right] - \Phi \left[ \frac{\partial}{\partial y_1} A_{11} \frac{\partial w_\epsilon^1}{\partial y_1} + \right. \\ &\quad \left. \frac{\partial}{\partial y_2} \frac{1}{\lambda} A_{22} \frac{\partial w_\epsilon^1}{\partial y_2} \right] - \Phi \left[ \frac{\partial}{\partial y_1} \lambda A_{11} \frac{\partial w_\epsilon^2}{\partial y_1} + \frac{\partial}{\partial y_2} A_{22} \frac{\partial w_\epsilon^2}{\partial y_2} \right] - \\ &c_\epsilon^0 v_1^h \left[ \frac{\partial}{\partial y_1} A_{11} \frac{\partial \rho_\epsilon^1}{\partial y_1} + \frac{\partial}{\partial y_2} \frac{1}{\lambda} A_{22} \frac{\partial \rho_\epsilon^1}{\partial y_2} \right] - c_\epsilon^0 v_2^h \left[ \frac{\partial}{\partial y_1} \lambda A_{11} \frac{\partial \rho_\epsilon^2}{\partial y_1} + \frac{\partial}{\partial y_2} A_{22} \frac{\partial \rho_\epsilon^2}{\partial y_2} \right] \end{aligned} \quad (2.48)$$

Les conditions aux limites sur  $\partial M_\epsilon$  :

$$n_j \cdot (A_{jj} \nabla c_\epsilon - v^h c_\epsilon) = n_j \cdot \begin{pmatrix} A_{11} \frac{d}{dx_1} c_\epsilon \\ A_{22} \frac{d}{dx_2} c_\epsilon \end{pmatrix} = \Phi$$

Ceci implique que :

$$n_1 \cdot \begin{pmatrix} A_{11} \frac{\partial c_\epsilon^0}{\partial x_1} [1 + \frac{\partial \chi_\epsilon^1}{\partial y_1}] \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow n_1 \cdot \begin{pmatrix} A_{11} [1 + \frac{\partial \chi_\epsilon^1}{\partial y_1}] \\ 0 \end{pmatrix} = 0,$$

$$n_2 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ A_{22} \frac{\partial c_\epsilon^0}{\partial x_2} [1 + \frac{\partial \chi_\epsilon^2}{\partial y_2}] \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow n_2 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ A_{22} [1 + \frac{\partial \chi_\epsilon^2}{\partial y_2}] \end{pmatrix} = 0,$$

$$n_1 \cdot \begin{pmatrix} v_1^h c_\epsilon^0 - c_\epsilon^0 v_1^h A_{11} \frac{\partial(\rho_\epsilon^1)}{\partial y_1} \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow n_1 \cdot \begin{pmatrix} (1 + A_{11} \frac{\partial(\rho_\epsilon^1)}{\partial y_1}) \\ 0 \end{pmatrix} = 0,$$

$$n_2 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ v_2^h c_\epsilon^0 - c_\epsilon^0 v_2^h A_{22} \frac{\partial(\rho_\epsilon^2)}{\partial y_2} \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow n_2 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ (1 + A_{22} \frac{\partial(\rho_\epsilon^2)}{\partial y_2}) \end{pmatrix} = 0,$$

$$n_1 \cdot \begin{pmatrix} (A_{11} \frac{\partial(w_\epsilon^1)}{\partial y_1} + \lambda A_{11} \frac{\partial(w_\epsilon^2)}{\partial y_1}) \Phi \\ 0 \end{pmatrix} = \Phi \Rightarrow n_1 \cdot \begin{pmatrix} A_{11} \frac{\partial(w_\epsilon^1)}{\partial y_1} \\ 0 \end{pmatrix} = 0.5 \quad \text{and} \quad n_1 \cdot \begin{pmatrix} \lambda A_{11} \frac{\partial(w_\epsilon^2)}{\partial y_1} \\ 0 \end{pmatrix} = 0.5$$

$$n_2 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ (\frac{1}{\lambda} A_{22} \frac{\partial(w_\epsilon^1)}{\partial y_2} + A_{22} \frac{\partial(w_\epsilon^2)}{\partial y_2}) \Phi \end{pmatrix} = \Phi \Rightarrow n_2 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\lambda} A_{22} \frac{\partial(w_\epsilon^1)}{\partial y_2} \end{pmatrix} = 0.5 \quad \text{and} \quad n_2 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ A_{22} \frac{\partial(w_\epsilon^2)}{\partial y_2} \end{pmatrix} = 0.5$$

Les conditions aux limites lorsque  $y$  tend vers l'infini :  $\nabla \chi_\epsilon^k = 0$ ,  $k = 1, 2$  et  $\nabla \rho_\epsilon^k = 0$ ,  $k = 1, 2$ . La condition de compatibilité (2.49) doit être vérifiée

$$\int_{\Gamma_N} \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \tag{2.49}$$

où  $\Gamma_N$  représente l'ensemble des bords dont les conditions aux limites sont de type Neumann. Cela implique que :

$$\lim_{y_2 \rightarrow \pm\infty} \bar{A} \nabla w_\epsilon^k = \pm 1/4 |\partial M_\epsilon|$$

## 2.6.2 Validation numérique

Nous reprenons la configuration représentée sur la figure 2.7 avec couches hétérogènes pour 30 modules avec le relachement de l'iode 129. Nous simulons nos modèles par EFMH. Les simulations détaillée, celles homogénéisée, celles du terme  $c_\epsilon^0$  et des problèmes auxiliaires sont effectuées sur des maillages respectifs de 71850, 6160, 6120 et 26150 quadrangles. Les résultats sont représentés sur les figures 2.40, 2.41, 2.42 pour les temps courts et 2.43 pour les temps longs.

Nous pouvons constater que les nouveaux modèles peuvent représenter le phénomène de rétention des radionucléides en temps courts et en temps longs. D'autre part, il semble que, au moins pour certains temps, l'ordre des oscillations en champ proche soit représenté par le développement asymptotique d'ordre 1.

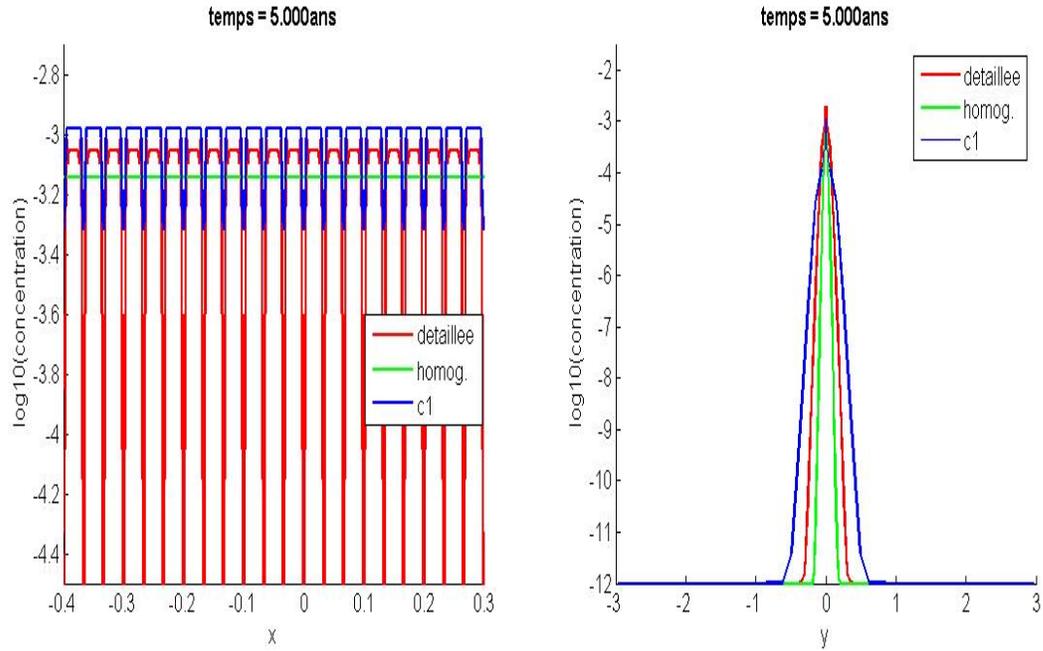


FIG. 2.40 – Comparaison des coupes horizontale (gauche) et verticale (droite) des valeurs en base  $\log_{10}$  des 3 simulations, 30 modules, nouveau modèle, diffusion hétérogène, source iode,  $t = 5 \cdot 10^3$  ans

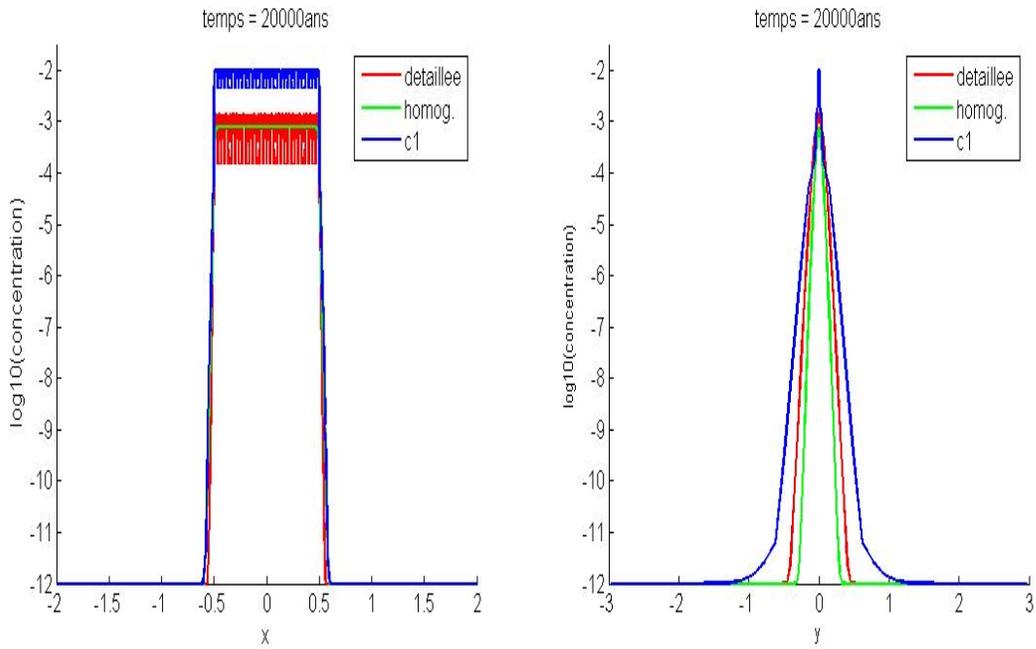


FIG. 2.41 – Comparaison des coupes horizontale (gauche) et verticale (droite) des valeurs en base  $\log_{10}$  des 3 simulations, 30 modules, nouveau modèle, diffusion hétérogène, source iode,  $t = 2 \cdot 10^4$  ans

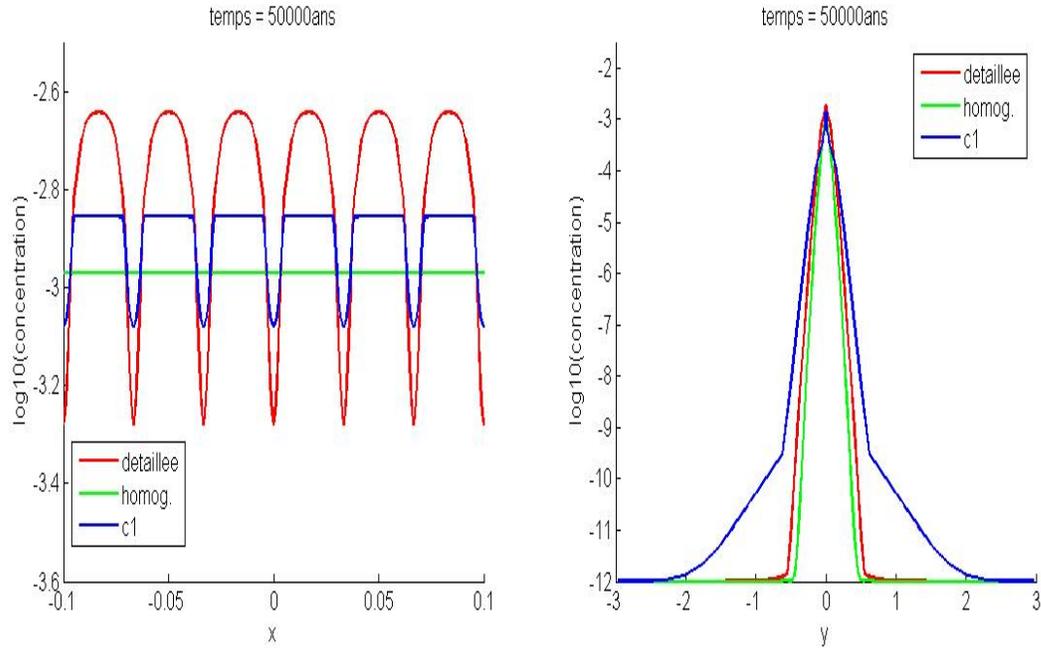


FIG. 2.42 – Comparaison des coupes horizontale (gauche) et verticale (droite) des valeurs en base  $\log_{10}$  des 3 simulations, 30 modules, nouveau modèle, diffusion hétérogène, source iode,  $t = 5 \cdot 10^4$  ans

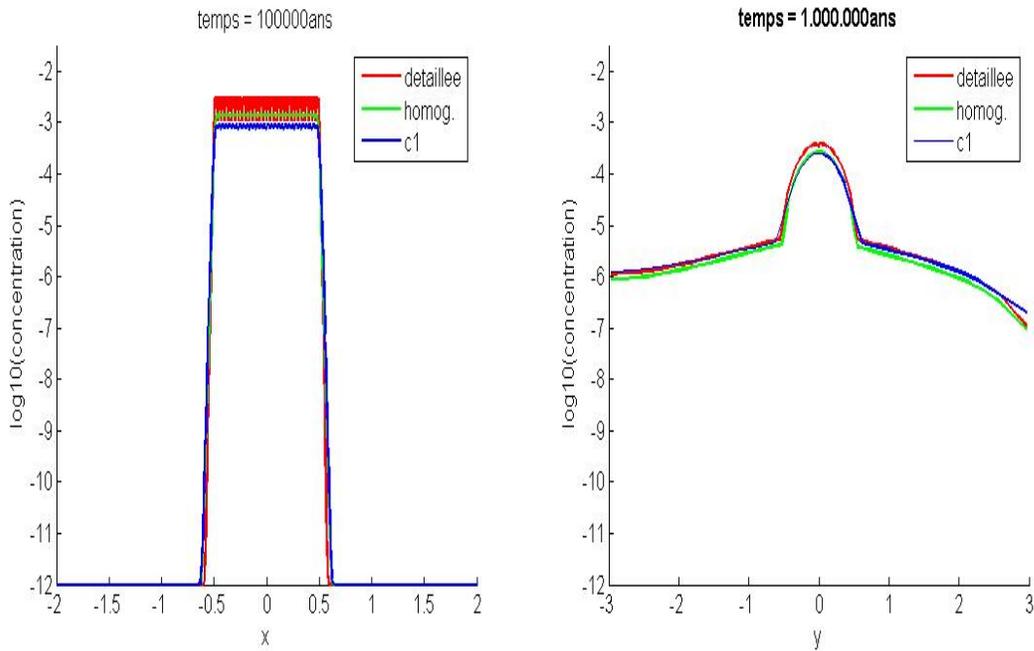


FIG. 2.43 – Comparaison des coupes horizontale (gauche) et verticale (droite) des valeurs en base  $\log_{10}$  des 3 simulations, 30 modules, nouveau modèle, diffusion hétérogène, source iode,  $t = 10^5$  ans (gauche),  $t = 10^6$  (droite)

## 2.7 Conclusion

Nous avons testé numériquement, d'un point de vue ingénierie, la validité des modèles homogénéisé et d'ordre 1 respectivement définis par (2.14)–(2.19) et (2.34) dans la section 2.5. Établissons d'abord quelques constats généraux :

- Du point de vue purement ingénierie, les difficultés que nous avons rencontré en post-traitement pour reconstituer de manière relativement satisfaisante la simulation du développement d'ordre 1 contrastent avec la simplicité, la rapidité et l'absence de post-traitement de la simulation du modèle homogénéisé (2.14)–(2.19). Nous avons du interpoler les valeurs des problèmes auxiliaires sur le maillage fin que requiert la simulation détaillée afin de pouvoir effectuer des comparaisons valables entre les deux simulations. Cette interpolation nécessite beaucoup de temps.
- La valeur de  $\varepsilon \simeq 0.067$  que l'on obtient d'après les données de l'Andra pour une configuration des modules réaliste dans le stockage est trop grande pour qu'on puisse appliquer les modèles obtenus par homogénéisation et par développement asymptotique d'ordre 1 dans [7]. Nous avons poursuivi notre étude avec une valeur plus petite de  $\varepsilon$ , soit  $\varepsilon = 0.0167$ .

Nous avons obtenu d'autres informations en traitant un problème monocouche dans la section 2.5.1.

- (a) Le modèle par développement asymptotique d'ordre 1 parvient à représenter les oscillations comme le montre par exemple les figures 2.14 et 2.15. Mais ceci opère au prix d'une faible précision en  $\|\cdot\|_\infty$ . Le paramètre  $\varepsilon$  est en effet trop grand pour représenter l'ordre de grandeur effectif des oscillations ( $10^{-4}$ ).
- (b) Finalement, dans le sens de la précision en  $\|\cdot\|_\infty$ , la simulation du modèle homogénéisé s'est avérée meilleure que celle du modèle par développement asymptotique.

Nous avons enfin traité un problème en diffusion multicouches dans la section 2.5.2. La simulation du modèle détaillé fait apparaître un phénomène de rétention des radionucléides au sein de la couche hôte en raison de sa faible diffusivité au moins pour les temps courts.

Nous constatons une nouvelle fois que le paramètre  $\varepsilon$  est trop grand pour retranscrire l'ordre de grandeur des oscillations. Deux autres facteurs de simulation au moins empêchent les modèles homogénéisés et par développement asymptotique d'être pertinents.

- (a) Les modèles homogénéisé  $c$  et  $c_\varepsilon^0$  ne tiennent pas compte de la couche hôte, très peu diffusive. Ils ne peuvent donc pas représenter le phénomène de rétention des radionucléides au sein de la couche hôte comme le montrent les figures 2.32 et 2.33 par exemple. Numériquement, nous avons tenu compte de la faible diffusivité de la couche hôte dans les simulations de  $c$  et  $c_\varepsilon^0$ . Les comportements généraux de  $c$  et  $c^1$  s'en trouvent améliorés comme le montrent les figures 2.37 et 2.38.
- (b) Le paramètre  $h_{G_\varepsilon}$  représente la hauteur du domaine intérieur  $G_\varepsilon$  à laquelle on effectue le recollement des flux. Le recollement des flux nécessite d'être dans une zone où le phénomène de diffusion est prépondérant. Or, ce n'est pas le cas au moins pour

les temps courts hors de la couche hôte en raison de rétention des radionucléides au sein de la couche hôte. La valeur théorique  $h_{G_\varepsilon} = \varepsilon \log(1/\varepsilon)$  est donc une distance beaucoup trop grande pour y effectuer le recollement des flux.

Nous avons vu que, en modifiant deux paramètres du modèle par développement asymptotique, soit la distance de recollement et la prise en compte par  $c_\varepsilon^0$  de la faible diffusivité de la couche hôte, nous parvenons à retranscrire le comportement général tel que décrit par le modèle détaillé pour tous les temps de simulation. D'une part, ce modèle d'ordre 1 permet de représenter les oscillations en temps courts. D'autre part, il permet de représenter le phénomène de rétention des radionucléides par la couche hôte peu diffusive, et ce jusqu'aux temps longs. En revanche, les théorèmes de convergences de l'étude [7] ne s'appliquent pas ici en raison de la trop grande valeur de  $\varepsilon$ .

Nous avons donc tenu compte de la modification des paramètres décrite ci-dessus. Les modèles que nous avons proposé peuvent être améliorés en modifiant l'adimensionalisation initiale du problème de convection-diffusion (1.1). Ainsi, un modèle qui puisse prendre en compte la grande hétérogénéité des couches (couche hôte très peu diffusive) doit être construit en adimensionalisant par rapport à l'épaisseur de la couche hôte plutôt que par rapport à l'épaisseur du site tout entier. Nous tenons mieux compte des phénomènes spécifiques de rétention de la pollution induits par la diffusion de l'argile. Cette dernière ne disparaît alors plus du modèle homogénéisé ou de la définition de  $c_\varepsilon^0$ . Cela permet de tenir compte de la diffusion de la couche hôte dans le phénomène du transport, au moins en terme de diffusion.





## **Partie 2** : Simulation numérique par décomposition de domaine



# Chapitre 3

## Description de la méthodologie développée

### 3.1 Introduction

Dans cette seconde partie, nous nous préoccupons de développer une méthodologie numérique qui repose surtout sur la méthode de décomposition de domaine. Cette technique est considérée dans notre travail de deux manières :

- utiliser des solveurs adaptés à la résolution des problèmes selon les régions où se produit le phénomène,
- distribuer les données du problème sur les différents processeurs disponibles dans le cadre du calcul parallèle. Cet aspect est plus spécifiquement développé dans le chapitre 4.

Dans la section 3.2, nous introduisons la correspondance de Dirichlet-Neumann qui va nous permettre d'établir des conditions de transmission entre les sous-domaines d'une décomposition. Elle garantit l'unicité de la dérivée sur le bord connaissant la condition de Dirichlet. Elle permet également un couplage de méthodes en maillage non conforme. Nous verrons que nous pouvons l'exprimer via une équation définie sur le bord, via l'opérateur de Steklov-Poincaré. Dans la section 3.3, nous effectuerons quelques rappels de base sur la technique de décomposition de domaine. Nous avons choisi d'utiliser une décomposition de domaine de Neumann-Dirichlet (N-D), itérative, facile à implémenter, robuste et dont le lien avec l'opérateur de Steklov-Poincaré est standard [14]. Nous évoquerons ensuite la technique que nous avons choisie pour accélérer la convergence de cette méthode, en l'occurrence la technique d'Aitken, en tirant partie du comportement de la convergence de l'algorithme (N-D) dans les sections 3.4 à 3.6.

### 3.2 La correspondance de Dirichlet-Neumann

Soit  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  et  $n = 2$  ou  $n = 3$  un ouvert borné avec une frontière de Lipchitz  $\Gamma = \partial\Omega$ .

Pour  $k \in \mathbb{N}_0$  nous définissons la norme

$$\|u\|_{H^k(\Omega)} := \left\{ \sum_{|\alpha| \leq k} \|D^\alpha u\|_{L_2(\Omega)}^2 \right\}^{1/2} \quad (3.1)$$

alors que pour  $0 < s \in \mathbb{R}$ ,  $s \notin \mathbb{N}$ , nous définissons

$$\|u\|_{H^s(\Omega)} := \left\{ \|u\|_{H^{[s]}(\Omega)}^2 + |u|_{H^s(\Omega)}^2 \right\}^{1/2} \quad (3.2)$$

$$|u|_{H^s(\Omega)} := \left\{ \sum_{|\alpha|=[s]} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{|D^\alpha u(x) - D^\alpha u(y)|^2}{|x-y|^{n+2s}} dx dy \right\}^{1/2}. \quad (3.3)$$

Pour  $s \geq 0$ , nous introduisons les espaces de Sobolev :

$$H^s(\Omega) := C_0^\infty(\Omega)^{\|\cdot\|_{H^s(\Omega)}} \quad (3.4)$$

$$H_0^s(\Omega) := C_0^\infty(\Omega)^{\|\cdot\|_{H^s(\Omega)}} \quad (3.5)$$

$$\tilde{H}^s(\Omega) := C_0^\infty(\Omega)^{\|\cdot\|_{H^s(\mathbb{R}^n)}} \quad (3.6)$$

Nous pouvons définir les espaces de Sobolev sur la frontière fermée  $\Gamma := \partial\Omega$ , pour  $s \in (0, 1)$  où la norme de l'espace de Sobolev  $H^s(\Gamma)$  est donnée par :

$$\|u\|_{H^s(\Gamma)} := \left\{ \|u\|_{L_2(\Gamma)}^2 + |u|_{H^s(\Gamma)}^2 \right\}^{1/2} \quad (3.7)$$

$$|u|_{H^s(\Gamma)}^2 = \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \frac{|u(x) - u(y)|^2}{|x-y|^{n-1+2s}} ds_x ds_y. \quad (3.8)$$

Nous voulons résoudre le problème elliptique de second ordre avec des conditions aux limites de type mixte (Neumann ou Dirichlet) suivant :

$$(MBP) \begin{cases} L(u) = f \text{ dans } \Omega, \\ \gamma_0 u = g_D \text{ sur } \Gamma_D, \\ \gamma_1 u = g_N \text{ sur } \Gamma_N, \end{cases} \quad (3.9)$$

avec  $f \in \tilde{H}^{-1}(\Omega)$ ,  $g_D \in H^{1/2}(\Gamma_D)$ ,  $g_N \in H^{-1/2}(\Gamma_N)$ .

Soit  $H_0^1(\Omega, \Gamma) = \{v \in H_0^1(\Omega), \int_{\Gamma} v(x) dx = 0\}$ . L'opérateur symétrique  $L \in L^\infty$  a la forme suivante :

$$L(u)(x) = - \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} [a_{ji}(x) \frac{\partial}{\partial x_i} u(x)] \quad (3.10)$$

Nous supposons de plus que  $L(\cdot)$  est coercif, c'est à dire qu'il existe une constante  $c > 0$ , telle que

$$\sum_{k,l=1}^n a_{kl}(x) \xi_k \xi_l \geq c |\xi|^2, \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^n, \quad \forall x \in \Omega.$$

Soit  $a(.,.)$  la forme bilinéaire symétrique associée à l'opérateur  $L$  :

$$a(u, v) = \sum_{i,j=1}^n \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} v(x) a_{ji}(x) \frac{\partial}{\partial x_i} u(x) dx, \quad \forall (u, v) \in H^1(\Omega) \times H^1(\Omega) \quad (3.11)$$

bornée en  $H^1(\Omega)$  et coercive, c'est à dire qu'il existe  $\alpha > 0$ ,  $a(v, v) \geq \alpha^2 \|v\|_{H^1(\Omega)}^2$ ,  $\forall v \in H_0^1(\Omega, \Gamma_D)$ . La correspondance de Dirichlet-Neumann se définit par :

$$\gamma_1 u(x) = S\gamma_0 u(x) - Nf(x) \forall x \in \Gamma \quad (3.12)$$

(3.12) a été introduit dans [72]. Une approche pour un couplage éléments finis/ méthode intégrale sur la frontière a été étudiée dans [73].

La formulation variationnelle de (MBP) est :

Trouver  $u \in H^1(\Omega)$  satisfaisant  $\gamma_0 u(x) = g_D(x)$ ,  $x \in \Gamma_D$ ,

$$a(u, v) = \int_{\Omega} f(x)v(x)dx + \int_{\Gamma_N} g_N(x)(x)\gamma_0 v(x)ds_x, \quad \forall v \in \{w \in H^1(\Omega), \gamma_0 w(x) = 0, x \in \Gamma_D\} \quad (3.13)$$

D'après le théorème de Lax-Milgram, le problème (MBP) a une solution unique  $u \in H_0^1(\Omega, \Gamma_D)$ .

Notons par  $\gamma_0 : H^1(\Omega) \rightarrow H^{1/2}(\Gamma)$  l'opérateur trace. L'opérateur de dérivée conormale associé est défini par  $\gamma_1 u(x) = \sum_{i,j=1}^n n_j(x) a_{ji}(x) \frac{\partial}{\partial x_i} u(x) \forall x \in \Gamma$ .

Nous pouvons également considérer le problème aux conditions limites de Dirichlet suivant :

$$(DBP) \begin{cases} L(u) = f \text{ dans } \Omega, \\ \gamma_0 u = g, \text{ sur } \Gamma, \end{cases} \quad (3.14)$$

De la même manière que précédemment, il existe une solution faible de (DBP) dont nous pouvons calculer la dérivée conormale  $\lambda = \gamma_1 u$ . Il est montré dans [79] que  $\lambda \in H^{-1/2}(\Gamma)$ . De plus,  $\lambda$  vérifie :

$$\int_{\Gamma} \lambda(x)w(x)dx = a(u_0 + \varepsilon g, \varepsilon w) - \int_{\Omega} f(x)w(x)dx \quad \forall w \in H^{1/2}(\Gamma) \quad (3.15)$$

où  $\varepsilon w \in H^1(\Omega)$  est une extension bornée de  $w \in H^{1/2}(\Gamma)$ . Nous avons ainsi défini une application qui associe le couple  $(f, g)$  à  $\lambda$ . En particulier à  $f$  fixé et en faisant varier  $g = \gamma_0 u$ , nous pouvons réécrire la correspondance Dirichlet-Neumann sous la forme :

$$\gamma_1 u(x) = Sg(x) - Nf(x) \quad \forall x \in \Gamma \quad (3.16)$$

Ici  $S$  est l'opérateur de Steklov-Poincaré et  $Nf$  est un potentiel de Newton. Le problème ( $MBP$ ) est alors équivalent à trouver les données  $u$  de Dirichlet, avec  $u(x) = g(x)$ ,  $x \in \Gamma$  telles que :

$$g_N(x) = \gamma_1 u(x) = Su(x) - Nf(x) \quad \forall x \in \Gamma_N \quad (3.17)$$

Nous sommes dans le cas linéaire, nous pouvons considérer la décomposition de la solution du problème de Dirichlet en la somme de la solution du problème homogène (3.18) avec des conditions aux limites de Dirichlet, (associé à l'opérateur de Steklov-Poincaré) et de la solution du problème non homogène avec des conditions aux limites homogènes, (associé au potentiel de Newton).

$$L(u) = 0 \text{ dans } \Omega, \quad u = g \text{ sur } \Gamma. \quad (3.18)$$

Le problème variationnel associé est :  
trouver  $u \in H^1(\Omega)$  tel que

$$\gamma_0 u(x) = g(x), \quad \forall x \in \Gamma \quad (3.19)$$

$$a(u, v) = 0 \quad \forall v \in H_0^1(\Omega, \Gamma). \quad (3.20)$$

La solution du problème (3.19)–(3.20) est également unique et nous pouvons calculer la dérivée conormale  $\gamma_1 u$  presque partout sur  $\Gamma$ . D'après la seconde formule de Green, nous pouvons définir le problème variationnel suivant :  
trouver  $\lambda \in H^{-1/2}(\Gamma)$  tel que

$$\int_{\Gamma} \lambda w ds_x = a(u, \varepsilon w) \quad \forall w \in H^{1/2}(\Gamma) \quad (3.21)$$

Soit  $\tilde{g} = \varepsilon g \in H^1(\Omega)$  une extension bornée de  $g$  et soit la forme bilinéaire bornée  $b(., .)$  définie par :

$$b(w, \mu) = \int_{\Gamma} w(x) \mu(x) ds_x \quad \forall (w, \mu) \in H^{1/2}(\Gamma) \times H^{-1/2}(\Gamma)$$

Alors on peut réécrire (3.19)–(3.20) et (3.21) sous la forme :  
trouver  $(u_0, \lambda) \in H_0^1(\Omega) \times H^{-1/2}(\Gamma)$ , tel que

$$\begin{aligned} a(u_0, \lambda) &= 0, \\ b(w, \lambda) &= a(\tilde{g} + u_0, \varepsilon w). \end{aligned} \quad (3.22)$$

La solution est unique d'après [76] et en résolvant (3.22), nous avons défini l'opérateur suivant :

$$Sg(x) = \lambda(x) \quad \forall x \in \Gamma \quad (3.23)$$

où  $g = \gamma_0 u$  et  $\lambda = \gamma_1 u(x)$ . Nous avons alors le théorème suivant :

**Théorème 3.2.1** *L'opérateur de Steklov-Poincaré défini par (3.23) est borné et coercif [72], c'est à dire :*

$$\|Sg\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} \leq \|g\|_{H^{1/2}(\Gamma)} \quad \forall g \in H^{1/2}(\Gamma) \quad (3.24)$$

*Il existe une constante  $\alpha > 0$ ,*

$$\langle Sv, v \rangle_{L^2(\Gamma)} \geq \alpha \|v\|_{H^{1/2}(\Gamma)}^2 \quad \forall v \in H_0^{1/2}(\Gamma, \Gamma_D) \quad (3.25)$$

L'opérateur de Steklov-Poincaré est ainsi défini implicitement de manière unique. Nous avons vu que l'on pouvait considérer l'opérateur de Steklov-Poincaré, à partir d'une formulation variationnelle fondée sur une forme bilinéaire de Dirichlet. Cela conduit à une approximation par éléments finis de l'opérateur [14] qui conserve le caractère borné et coercif de l'opérateur de Steklov-Poincaré. Une autre manière de considérer l'opérateur de Steklov-Poincaré consiste à le représenter de manière symétrique [73]. Cela conduit à une approximation par méthode intégrale au bord qui a les mêmes propriétés [76]. Nous voulons effectuer un couplage mixte éléments finis / méthodes spectrales. Nous l'effectuons via une décomposition de domaine avec des correspondances de Dirichlet-Neumann locales. Aucune condition de compatibilité n'est requise grâce à ce caractère local. Cela conduit à une décomposition de domaine naturelle [74]. Nous verrons dans la section suivante que nous pouvons éviter d'approximer l'opérateur de Steklov-Poincaré grâce à l'algorithme itératif de Neumann-Dirichlet.

### 3.3 Décomposition de domaine de Schwarz

La méthode de décomposition de domaine a été élaborée par H. Schwarz en 1870 [36]. Toutefois, elle n'a été appliquée à la résolution des équations aux dérivées partielles qu'à partir de la fin des années quatre-vingt avec la généralisation des ordinateurs multi-processeurs. La méthode de décomposition de domaine repose sur l'idée que le domaine de calcul, noté par exemple  $\Omega$ , est découpé en  $n$  sous-domaines, notés  $\Omega_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Ces sous-domaines peuvent se recouvrir ou non. Le problème initial est alors reformulé sur chaque sous-domaine, conduisant ainsi à une famille de sous-problèmes de taille plus petite. Ils sont couplés les uns aux autres par les inconnues sur les interfaces des sous-domaines. L'algorithme initial reste un sujet de recherche [24, 25], mais ses évolutions sont nombreuses et témoignent d'une vraie vigueur de la recherche dans ce domaine [91, 92]. Plusieurs ouvrages de référence sur les décomposition de domaine ont été écrits ces dernières années. Parmi eux, nous pouvons citer [14, 39, 80] qui font une bonne synthèse des divers algorithmes utilisés actuellement.

Nous pouvons décrire deux voies d'exploration des méthodes de décomposition de domaine. On peut les voir de manière purement algébrique, cela concerne essentiellement les méthodes de Schur. On peut décrire les sous-problèmes interface à l'aide de l'opérateur de Steklov-Poincaré (cf. section 3.2), qui s'interprète algébriquement comme un complément de Schur [14]. En général, on ne forme pas la matrice explicitement, mais on résout

itérativement le problème par une méthode de Krylov appropriée selon que l'opérateur est symétrique ou non [40]. On améliore la convergence par un bon préconditionnement du complément de Schur [41, 42, 75]. Une autre manière de considérer les méthodes de décomposition de domaine est fondée sur l'analyse de la convergence vers la solution liée à l'opérateur et la géométrie du domaine.

Nous nous contentons modestement d'évoquer les décompositions de domaine sans recouvrement. Les premiers travaux sur ce type de décomposition ont été effectués récemment, à partir des années 80 [87, 88, 89]. Nous considérons une généralisation de l'algorithme itératif multiplicatif de Schwarz, l'algorithme de Neumann-Dirichlet, en maillage non conforme et sans recouvrement. Il permet en effet le couplage d'opérateurs et méthodes numériques différents. De plus, la méthode de base est, bien que lente, robuste. Nous nous appliquerons, de toute façon, à accélérer cette convergence. Un dernier avantage réside en la simplicité de l'implémentation.

### 3.3.1 Quelques rappels sur l'algorithme de Neumann-Dirichlet sans recouvrement

Nous utilisons dans notre travail une méthode de décomposition de domaine itérative très classique, l'algorithme de Neumann-Dirichlet étudié dans [14], et qui repose sur la correspondance de Dirichlet-Neumann (3.12). On considère le problème suivant :

$$\begin{cases} L(u) = f & \text{sur } \Omega \\ B[u] = g & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (3.26)$$

où  $L$  représente un opérateur linéaire elliptique et  $B$  formalise les conditions aux limites sur le bord du domaine  $\partial\Omega$ . On considère une partition de  $\Omega$  en deux sous-domaines ne se recouvrant pas comme schématisé sur la figure 3.1 :

$$\begin{aligned} \Omega &= \Omega_1 \cup \Omega_2, & \Omega_1 \cap \Omega_2 &\neq \emptyset, \\ \Gamma &= \Omega_1 \cap \Omega_2, \end{aligned}$$

L'algorithme se définit comme suit :

Etant donné  $\lambda^0$ , résoudre :

$$\begin{cases} L(u_1^{n+1}) = f_1^{n+1}, & \text{dans } \Omega_1 \\ u_1^{n+1}|_{\Gamma} = \lambda^n \\ L(u_2^{n+1}) = f_2^{n+1}, & \text{dans } \Omega_2 \\ \frac{\partial u_2^{n+1}}{\partial n} = \frac{\partial u_1^n|_{\Gamma}}{\partial n} \end{cases}$$

où

$$\lambda^{k+1} = \theta u_{2|\Gamma}^{k+1} + (1 - \theta)\lambda^k, \text{ sur } \Gamma, k \geq 0 \quad (3.27)$$

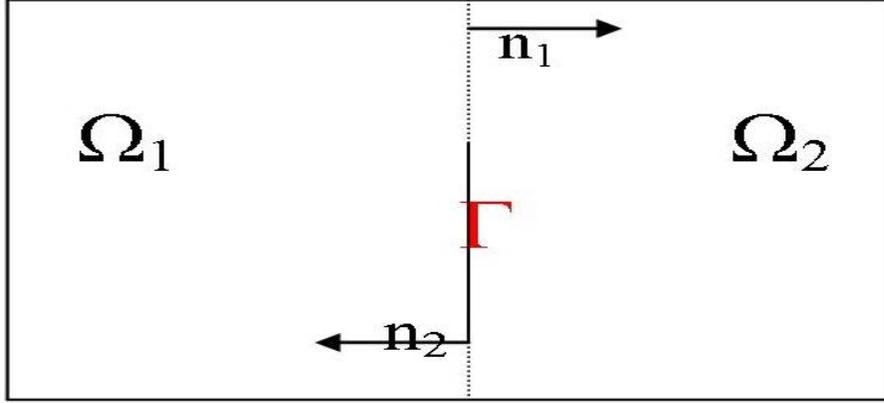


FIG. 3.1 – Une décomposition de domaine en deux sous-domaines sans recouvrement

L'algorithme itératif multiplicatif de Schwarz sans recouvrement est défini pour  $\theta = 1$ . Nous allons utiliser l'algorithme (N-D) pour résoudre deux problèmes, une équation de convection-diffusion - avec la condition  $(\mathcal{C}(x), \nu_\Sigma) = 0$  - et un problème elliptique du second ordre non convexe. La convergence de l'algorithme de Neumann-Dirichlet peut se montrer de manière algébrique dans le cas de certains problèmes elliptiques symétriques.

### Convergence de l'algorithme de Neumann-Dirichlet

Grâce à la correspondance de Dirichlet-Neumann (3.12), nous pouvons réécrire (3.26) sous la forme multi-domaine :

$$\begin{cases} L(u_1) = f_1 \text{ dans } \Omega_1, \\ u_1 = u_2 \text{ sur } \Gamma, \\ \frac{\partial u_1}{\partial n} = \frac{\partial u_2}{\partial n} \text{ sur } \Gamma, \\ L(u_2) = f_2 \text{ dans } \Omega_2, \end{cases} \quad (3.28)$$

Si l'on introduit les problèmes de Dirichlet suivants pour  $i = 1, 2$ , à la manière de la section 3.2 :

$$\begin{cases} L(w_i) = f_i \text{ dans } \Omega_i, \\ w_i = 0 \text{ sur } \partial\Omega_i \cap \Omega \\ w_i = \lambda \text{ sur } \Gamma, \end{cases} \quad (3.29)$$

Alors nous savons d'après la section 3.2, que la décomposition de  $w_i$ ,  $i = 1, 2$  en la somme de la solution du problème homogène associé et de la solution particulière, notée  $u_i^*$ ,  $i = 1, 2$ , nulle sur le bord  $\Gamma$ , nous conduit à l'équation de Steklov-Poincaré sur l'interface :

$$S\lambda = \chi \quad (3.30)$$

où  $S$  est l'opérateur de Steklov-Poincaré et  $\chi = -\sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial n_i} u_i^*$ . Pour  $i = 1, 2$ , notons par  $H_i \lambda$  l'extension harmonique de  $\lambda$  sur  $\Omega_i$ . Alors  $S$  se décompose selon  $S = S_1 + S_2$  [72]. Dans le cas où  $L$  est l'opérateur de Poisson,  $S_i \eta = \frac{\partial}{\partial n} H_i \eta$ .

L'algorithme itératif de Neumann-Dirichlet peut alors s'interpréter comme une procédure de Richardson préconditionnée du problème de Steklov-Poincaré (3.23) [14] :

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \theta S_2^{-1}(g - S\lambda^k) \quad (3.31)$$

La convergence de la suite  $\{\lambda^k\}_k$  définie par (3.31) repose sur le théorème 3.3.1.

**Théorème 3.3.1** *Soit  $X$  et  $X'$  un espace de Hilbert et son espace dual. Soit  $Q : X \rightarrow X'$  un opérateur linéaire continu tel que  $Q = Q_1 + Q_2$  où  $Q_1$  et  $Q_2$  sont deux opérateurs linéaires. Considérons l'équation suivante :*

$$Q\lambda = G, \lambda \in X, \Gamma \in X'. \quad (3.32)$$

Supposons que :

1.  $Q_2$  est continue et coercive, c'est à dire qu'il existe une constante  $\beta_2 > 0$ ,  $\langle Q_2 \nu, \mu \rangle \leq \beta_2 \|\nu\|_X \|\mu\|_X$ ,  $\forall \nu, \mu \in X$  et  $\alpha_2 > 0$ ,  $\langle Q_2 \nu, \nu \rangle \leq \alpha_2 \|\nu\|_X^2$ ,  $\forall \nu \in X$
2.  $Q_1$  est continue, c'est à dire qu'il existe une constante  $\beta_1 > 0$ ,  $\langle Q_1 \nu, \mu \rangle \leq \beta_1 \|\nu\|_X \|\mu\|_X$ ,  $\forall \nu, \mu \in X$
3. Il existe une constante  $c > 0$  telle que  $\langle Q_2 \eta, Q_2^{-1} Q \eta \rangle + \langle Q \eta, \eta \rangle \geq c \|\eta\|_X^2$ ,  $\forall \eta \in X$ ,

alors pour tout  $\lambda^0$  donné et pour  $0 < \theta < \theta_{max} = \frac{c\alpha_2^2}{\beta_2(\beta_1 + \beta_2)^2}$ , la suite

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \theta Q_2^{-1}(G - Q\lambda^k) \quad (3.33)$$

converge dans  $X$  vers la solution de (3.32)

Pour  $Q = S$ ,  $Q_1 = S_1$  et  $Q_2 = S_2$ , nous appliquons le théorème 3.3.1 à l'équation (3.30) et la suite (3.31) [14] et nous démontrons ainsi la convergence de l'algorithme (N-D) dans le cadre d'un problème elliptique de second ordre. Cette démonstration peut se généraliser à d'autres problèmes elliptiques non symétriques, en particulier au cas d'une équation de convection-diffusion où  $(\mathcal{C}(x), \nu_\Sigma) = 0$ ,  $C$  représentant la convection [14].

### Linéarité pure de la convergence de l'algorithme de Neumann-Dirichlet

La convergence de l'algorithme de Neumann-Dirichlet a la propriété suivante :

$$\sup_{k \geq 0} \frac{\|e^{k+1}\|_\Gamma}{\|e^k\|_\Gamma} < 1 \quad (3.34)$$

où  $e^k = u_1^k|_\Gamma - u_\Gamma$ . D'après (3.31), cela provient du comportement de la convergence :

$$e^{k+1} = T_\theta e^k \quad (3.35)$$

où  $T_\theta = I - \theta S_2^{-1} S$ . Lorsque le problème est linéaire,  $T_\theta$  est un opérateur linéaire. Le taux de convergence est relié au spectre de l'opérateur itératif et à l'expression de l'erreur initiale dans une base de vecteurs propres. En pratique, nous ne construisons pas la matrice de transfert d'erreur explicitement. Nous donnerons un exemple d'expression de l'erreur modale pour un problème elliptique dans la section 3.4. Ces bas modes vont donc imposer leur faible taux de convergence à la convergence de l'algorithme de Schwarz.

Nous allons essayer de tirer partie du comportement linéaire de l'erreur sur l'interface (3.35) en utilisant le procédé d'Aitken (cf. section 3.4) pour accélérer la convergence de l'algorithme (N-D). Il existe également une autre méthode, fondée sur le choix d'une condition de transmission optimale sur l'interface artificielle, développée pour accélérer la convergence de la méthode de Schwarz, qui a connu de beaux développements ces dernières années. Ce sera l'objet de la section 3.3.2. Remarquons enfin que l'on peut également considérer l'algorithme de Neumann-Dirichlet comme une accélération de l'algorithme de Schwarz par relaxation de la trace sur l'interface en jouant sur le choix de  $\theta$  [90].

### 3.3.2 L'algorithme de Schwarz généralisé

Une alternative pour accélérer la convergence des algorithmes de Schwarz est de modifier légèrement l'algorithme (N-D) en remplaçant ses conditions sur l'interface par des conditions de Robin. P.L. Lions a notamment développé dans [31], un cas particulier de cet algorithme dans  $H^1(\cdot)$ . Il a par exemple été utilisé dans le cadre d'une étude d'écoulement dans [32]. La convergence de l'algorithme de Schwarz généralisé a été étudiée en particulier pour les problèmes elliptiques dans [37].

Considérons le cas où le domaine entier  $\Omega$  se décompose en deux sous-domaines  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$  avec les frontières artificielles  $\Gamma_1, \Gamma_2$  intersectant  $\partial\Omega$ . Soit  $\Omega_{11} = \Omega_1 \setminus \Omega_2, \Omega_{22} = \Omega_2 \setminus \Omega_1$  dans le cas d'un recouvrement. La méthode de Schwarz généralisée s'écrit comme [37] :

1. Version additive :

$$\left\{ \begin{array}{l} L(u_1^n)(x) = f(x), \text{ pour } x \in \Omega_1, \\ u_1^n(x) = g(x), \text{ pour } x \in \partial\Omega_1 \setminus \Gamma_1, \\ \Lambda_1 u_1^n + \lambda_1 \frac{\partial u_1^n(x)}{\partial n_1} = \Lambda_1 u_2^{n-1} + \lambda_1 \frac{\partial u_2^{n-1}(x)}{\partial n_1}, \text{ sur } \Gamma_1 \end{array} \right. \quad (3.36)$$

et

$$\left\{ \begin{array}{l} L(u_2^n)(x) = f(x), \text{ pour } x \in \Omega_2, \\ u_2^n(x) = g(x), \text{ pour } x \in \partial\Omega_2 \setminus \Gamma_2, \\ \Lambda_2 u_2^n + \lambda_2 \frac{\partial u_2^n(x)}{\partial n_2} = \Lambda_2 u_1^{n-1} + \lambda_2 \frac{\partial u_1^{n-1}(x)}{\partial n_2}, \text{ sur } \Gamma_2. \end{array} \right. \quad (3.37)$$

## 2. Version Multiplicative :

$$\left\{ \begin{array}{l} L(u_1^{2k+1})(x) = f(x), \text{ pour } x \in \Omega_1, \\ u_1^{2k+1}(x) = g(x), \text{ pour } x \in \partial\Omega_1 \setminus \Gamma_1, \\ \Lambda_1 u_1^{2k+1} + \lambda_1 \frac{\partial u_1^{2k+1}(x)}{\partial n_1} = \Lambda_1 u_2^{2k} + \lambda_1 \frac{\partial u_2^{2k}(x)}{\partial n_1}, \text{ sur } \Gamma_1 \end{array} \right. \quad (3.38)$$

et

$$\left\{ \begin{array}{l} L(u_2^{2k+2})(x) = f(x), \text{ pour } x \in \Omega_2, \\ u_2^{2k+2}(x) = g(x), \text{ pour } x \in \partial\Omega_2 \setminus \Gamma_2, \\ \Lambda_2 u_2^{2k+2} + \lambda_2 \frac{\partial u_2^{2k+2}(x)}{\partial n_2} = \Lambda_2 u_1^{2k+1} + \lambda_2 \frac{\partial u_1^{2k+1}(x)}{\partial n_2}, \text{ sur } \Gamma_2. \end{array} \right. \quad (3.39)$$

où  $\Lambda_i$  sont des opérateurs et  $\lambda_i$  sont des constantes. Si  $\Lambda_1 = \Lambda_2 = I$  et  $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$  la version ci-dessus est la méthode de Schwarz multiplicative classique. Si  $\Lambda_1 = \Lambda_2 = c > 0$  et  $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$  alors c'est la méthode de Schwarz modifiée proposée par Lions dans [31].

On peut montrer que pour les problèmes elliptiques de second ordre coercifs, avec des conditions de Dirichlet homogènes, en utilisant comme conditions de transmission sur l'interface les conditions aux limites absorbantes, l'algorithme de Robin converge exactement en deux itérations [37].

### Convergence de l'algorithme de Schwarz généralisé

**Lemme 3.3.1** *Si  $\Lambda_1$  (ou  $\Lambda_2$ ) est l'opérateur de Dirichlet-Neumann sur l'interface artificielle  $\Gamma_1$  (ou  $\Gamma_2$ ) pour le problème homogène correspondant en  $\Omega_2$  (ou  $\Omega_1$ ) avec des conditions aux limites homogènes sur  $\partial\Omega_2 \cap \partial\Omega$  (ou  $\partial\Omega_1 \cap \partial\Omega$ ) alors la méthode de Schwarz alternée généralisée converge en deux itérations.*

**Preuve 3.3.1** *Soit  $e_i^n = u - u_i^n, i = 1, 2$ , la fonction erreur itérative. Alors,  $e_i^n$  satisfait l'équation homogène suivante :*

$$\left\{ \begin{array}{l} L(e_1^1)(x) = 0, \text{ pour } x \in \Omega_1, \\ e_1^1(x) = 0, \text{ pour } x \in \partial\Omega_1 \setminus \Gamma_1, \\ \Lambda_1 e_1^1 + \lambda_1 \frac{\partial e_1^1(x)}{\partial n_1} = \Lambda_1 e_2^0 + \lambda_1 \frac{\partial e_2^0(x)}{\partial n_1}, \text{ sur } \Gamma_1 \end{array} \right. \quad (3.40)$$

et

$$\left\{ \begin{array}{l} L(e_2^1)(x) = 0, \text{ pour } x \in \Omega_2, \\ e_2^1(x) = 0, \text{ pour } x \in \partial\Omega_2 \setminus \Gamma_2, \\ \Lambda_2 e_2^1 + \lambda_2 \frac{\partial e_2^1(x)}{\partial n_2} = \Lambda_2 e_1^0 + \lambda_2 \frac{\partial e_1^0(x)}{\partial n_2}, \text{ sur } \Gamma_2. \end{array} \right. \quad (3.41)$$

Comme  $\Lambda_1$  ( $\Lambda_2$ ) est l'opérateur de Dirichlet-Neumann sur  $\Gamma_1$  ( $\Gamma_2$ ) dans  $\Omega_2$  ( $\Omega_1$ ), on doit avoir :

$$\frac{\partial e_2^0}{\partial n_1} + \Lambda_1 e_2^0 = -\frac{\partial e_2^0}{\partial n_2} + \Lambda_1 e_2^0, \quad \left( \frac{\partial e_1^0}{\partial n_2} + \Lambda_2 e_1^0 = -\frac{\partial e_1^0}{\partial n_1} + \Lambda_2 e_1^0 \right) \quad (3.42)$$

et on obtient  $e_1^1 = 0$  dans  $\Omega_1$  ( $e_2^1 = 0$  dans  $\Omega_2$ ). Ainsi, la solution exacte est fournie en deux itérations.

La méthode de Schwarz généralisée converge en deux itérations si les opérateurs Dirichlet-Neumann  $\Lambda_i, i = 1, 2$  sont inversibles.

Nous pouvons montrer, tout comme dans le cas de l'algorithme Dirichlet-Neumann, que l'algorithme de Schwarz généralisé converge linéairement dans le cas de problèmes linéaires. C'est l'objet de la section suivante.

### Comportement purement linéaire de la convergence de la méthode de Schwarz généralisée alternée

Soit

$$\Omega_{12} = \Omega_1 \cap \Omega_2, \quad \Omega_{11} = \Omega_1 \setminus \Omega_{12}, \quad \Omega_{22} = \Omega_2 \setminus \Omega_{12}. \quad (3.43)$$

Soit l'opérateur de projection

$$P_i : H^1(\Omega_i) \rightarrow H^1(\Omega_{ii})$$

comme étant la restriction de  $\Omega_i$  sur  $\Omega_{ii}$ . Soit  $D_i$  (respectivement  $D_{ii}$ ) l'opérateur de transmission de Dirichlet-Neumann dans  $\Omega_i$  (respectivement  $\Omega_{ii}$ ) sur  $\Gamma_i$ . Soit  $R_i$  l'opérateur de restriction de  $H^1(\Omega_i)$  sur  $H^{1/2}(\Gamma_i)$ . Soit  $R_i^*$  l'opérateur inverse de  $R_i$ , c'est à dire,  $R_i R_i^* = I$ ,

$$\forall g \in H^{1/2}(\Gamma_i), \quad \mathcal{L}(R_i^* g) = 0, \quad R_i^* g = g \text{ sur } \Gamma_i, \quad R_i^* g = 0 \text{ sur } \partial\Omega_i \setminus \Gamma_i \quad (3.44)$$

Soit  $R_{ii}$  l'opérateur correspondant dans  $\Omega_{ii}$ . Après un cycle d'itération de la fonction erreur,  $e_i^n = u - u_i^n$  dans  $\Omega_i$  pour l'algorithme généralisé de Schwarz additif, on a

$$e_i^n = R_i^*(\Lambda_i + D_i)^{-1}(\Lambda_i - D_{jj})R_{jj}P_jR_j^*(\Lambda_j + D_j)^{-1}(\Lambda_j - D_{ii})R_{ii}P_i(e_i^{n-2}), \quad \{i, j\} = 1, 2, i \neq j. \quad (3.45)$$

Voici deux cas extrêmes :

(i) dans le cas de l'algorithme de Schwarz multiplicatif, (3.45) est réduit à

$$e_i^n = R_i^*R_{jj}P_jR_j^*R_{ii}P_i(e_i^{n-2}).$$

(ii) dans le cas sans recouvrement, (3.45) est réduit à

$$e_i^n = R_i^*(\Lambda_i + D_i)^{-1}(\Lambda_i - D_j)(\Lambda_j + D_j)^{-1}(\Lambda_j - D_i)R_i(e_i^{n-2}).$$

Dans le cadre de problèmes linéaires, les opérateurs  $\Lambda_i, D_j, R_i, R_i^*, i = 1, 2$  sont linéaires et par conséquent l'algorithme de Schwarz généralisé converge purement linéairement.

## Accélération de la convergence de l’algorithme de Schwarz alterné généralisé

Dans [33], le choix des coefficients de Robin a été étudié pour la première fois en fonction de l’optimisation de la convergence de l’algorithme. Il est fondé sur le lemme 3.3.1 qui démontre que l’opérateur de Dirichlet-Neumann est optimal. C’est un opérateur global (il lie tous les sous-domaines). En pratique, des stratégies ont été développées pour approcher cet opérateur au niveau local. Des approximations par Taylor d’ordre 1 ou 2 ont été appliquées avec succès dans des problèmes comme les problèmes de convection-diffusion [35] ou l’équation de Helmholtz dans [34].

Notons qu’une comparaison intéressante entre les accélérations de la technique de Schwarz classique par la technique d’Aitken et par l’algorithme de Robin a été réalisée dans [26] pour un problème d’écoulement en milieu poreux. Une autre approche est possible dans le cadre de problèmes linéaires. Comme la convergence de l’algorithme de Schwarz généralisé est purement linéaire dans le cadre de problèmes linéaires, nous suggérons d’appliquer la technique d’accélération d’Aitken à cet algorithme. Dans ce cas, on ne construit pas une approximation directe de l’opérateur de Dirichlet-Neumann. En revanche, une approximation de l’opérateur de transfert d’erreur est calculée comme nous le verrons dans la section 3.4.

Nous allons travailler dans le cadre des décompositions de domaines en maillage non conforme. La prochaine section est consacrée à un bref état de l’art dans ce domaine, même si nous abordons le problème de manière un peu différente dans notre méthodologie.

### 3.3.3 Décomposition de domaine en maillage non conforme

Diverses techniques ont été développées pour faire face à cette situation. La méthode des éléments joints en fait partie. Elle a été développée initialement pour faire communiquer des éléments finis et des éléments spectraux [69, 70]. Cette méthode repose sur une écriture variationnelle des sous-problèmes et sur une écriture faible de la condition de conformité sur l’interface. Cette condition est concrètement imposée par des multiplicateurs de Lagrange. Trois grilles différentes coexistent, les grilles spectrale, éléments finis et les intersections de ces deux grilles. Les multiplicateurs de Lagrange imposent la continuité faible entre la grille spectrale et intersectée d’une part, et la grille éléments finis et intersectée d’autre part. Cette méthode a connu de nombreuses applications, notamment en maillage non conforme mais avec des solveurs de type identique [71]. Cette méthode a été appliquée notamment dans le cadre de la correspondance de Neumann-Dirichlet (3.12).

La méthode de Robin optimisée a également été appliquée en maillage non conforme pour des volumes finis [58]. Dernièrement, J. Jaffré et al. ont simulé un modèle d’écoulement stationnaire en milieu poreux en présence d’une faille [57] en utilisant l’algorithme de Robin sans recouvrement en maillage non conforme en effectuant un choix pertinent des coefficients de Robin pour accélérer la convergence sur l’interface.

Nous allons voir à présent comment mettre en oeuvre en pratique la technique décrite

dans la section 3.3.1. Nous commençons par décrire la technique d'Aitken dans le cas des problèmes continus, discrétisés uniformément et en maillage conformes dans la section 3.4 que nous illustrons par un exemple en section 3.5.1. Puis nous décrivons les techniques permettant de travailler en maillage non conforme dans la section 3.6.

## 3.4 Accélération de la convergence de l'algorithme de Schwarz par la technique d'Aitken

Il s'agit d'une technique d'accélération de la convergence de l'algorithme de Schwarz qui repose sur l'analyse du comportement de sa convergence. L'accélération de la convergence des suites dont le comportement est purement linéaire est connu sous le nom d'accélération d'Aitken en analyse numérique [77] que nous décrivons dans la section 3.4.1. La méthode proposée par M. Garbey et D. Tromeur-Dervout [19] et étudiée théoriquement et développée numériquement dans [23] s'en inspire fortement. Elle repose sur la linéarité théorique de la convergence de l'opérateur de la méthode de Schwarz pour des opérateurs linéaires. Nous utilisons l'algorithme Neumann-Dirichlet, dont nous avons montré le comportement linéaire de la convergence dans la section 3.3.1 pour des problèmes linéaires. L'analyse que nous allons faire du procédé d'Aitken appliqué à la méthode de Schwarz est tout aussi valable pour la méthode de (N-D). Le but est d'accélérer la convergence des solutions itératives obtenues par l'algorithme de Schwarz restreintes aux interfaces. Cette technique demande une évaluation précise des valeurs de la solution aux interfaces artificielles. La précision des méthodes spectrales assure une précision suffisante des projections que nous devons effectuer. [90, 44] donnent un bon aperçu de l'état de l'art des méthodes spectrales.

### 3.4.1 Accélération de la convergence d'une suite par la technique d'Aitken

L'accélération de la convergence d'une suite par Aitken est fondée sur la convergence (ou la divergence) purement linéaire d'une suite donnée de valeurs  $x_i$

$$\lim_{i \rightarrow \infty} x_i = \xi \quad (3.46)$$

Supposons que la suite  $\{x_i\}$  converge vers  $\xi$  de manière géométrique avec un facteur  $k$ ,  $|k| < 1$  :

$$x_{i+1} - \xi = k(x_i - \xi), \quad i = 0, 1, \dots \quad (3.47)$$

Alors  $k$  et  $\xi$  sont déterminés à partir de  $x_i, x_{i+1}, x_{i+2}$  en utilisant les équations :

$$x_{i+1} - \xi = k(x_i - \xi), \quad x_{i+2} - \xi = k(x_{i+1} - \xi). \quad (3.48)$$

En soustrayant ces équations,

$$k = \frac{x_{i+2} - x_{i+1}}{x_{i+1} - x_i} \quad (3.49)$$

et par substitution dans la première équation, comme  $k \neq 1$

$$\xi = \frac{x_i x_{i+2} - x_{i+1}^2}{x_{i+2} - 2x_{i+1} + x_i} \quad (3.50)$$

Cette technique d'Aitken s'applique également au cas vectoriel. Supposons que la suite  $\{(x_{i,l})_{l=1,\dots,N} = \vec{x}_i\}$  converge vers  $(\xi)_{l=1,\dots,N} = \vec{\xi}$  de telle sorte que :

$$\vec{x}_{i+1} - \vec{\xi} = P(\vec{x}_i - \vec{\xi}), \quad i = 0, 1, \dots \quad (3.51)$$

avec un opérateur d'erreur constant  $P$  indépendant de  $i$ . Supposons qu'il existe une norme  $\|\cdot\|$  telle que  $\|P\| < 1$ . Alors  $P$  et  $\vec{\xi}$  peuvent être déterminés en quelques itérations grâce aux équations :

$$(\vec{x}_{N+1} - \vec{x}_N \quad \dots \quad \vec{x}_2 - \vec{x}_1) = P(\vec{x}_N - \vec{x}_{N-1} \quad \dots \quad \vec{x}_1 - \vec{x}_0) \quad (3.52)$$

Alors, formellement, si  $(\vec{x}_N - \vec{x}_{N-1} \dots \vec{x}_1 - \vec{x}_0)$  est inversible

$$P = (\vec{x}_{N+1} - \vec{x}_N \quad \dots \quad \vec{x}_2 - \vec{x}_1) (\vec{x}_N - \vec{x}_{N-1} \quad \dots \quad \vec{x}_1 - \vec{x}_0)^{-1} \quad (3.53)$$

Si  $\|P\| < 1$ ,  $Id - P$  est non singulier. On peut donc en déduire  $\vec{\xi}$  comme

$$\vec{\xi} = (Id - P)^{-1}(\vec{x}_{N+1} - P\vec{x}_N) \quad (3.54)$$

Nous allons à présent utiliser la technique d'Aitken pour accélérer la convergence de l'algorithme de Schwarz dans divers cas. Nous commençons par l'appliquer dans le cas de maillages réguliers conformes en 1D dans la section 3.4.2. Puis nous étendons notre champ d'application au cas 2D dans le cas de maillages réguliers conformes dans les sections 3.4.3 et 3.5.1. Enfin, nous développons une technique destinée à appliquer la technique d'Aitken sur l'algorithme de Schwarz en 2D pour des maillages non conformes dans la section 3.6.

### 3.4.2 Illustration pour l'algorithme de Schwarz dans le cas 1D

On considère le problème suivant :

$$\begin{cases} L(u) = f & \text{sur } \Omega \\ B[u] = g & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (3.55)$$

où  $L$  représente un opérateur linéaire ou non-linéaire et  $B$  formalise les conditions aux limites sur le bord du domaine  $\partial\Omega$ .

## Le cas d'une partition en deux sous-domaines 1D

On considère une partition de  $\Omega$  en deux sous-domaines se recouvrant :

$$\begin{aligned}\Omega &= \Omega_1 \cup \Omega_2, \quad \Omega_1 \cap \Omega_2 \neq \emptyset \\ \Gamma_1 &= \partial\Omega_1 \setminus (\partial\Omega \cap \Omega_1), \quad \Gamma_2 = \partial\Omega_2 \setminus (\partial\Omega \cap \Omega_2).\end{aligned}$$

L'algorithme de Schwarz multiplicatif s'écrit :

### Algorithme 3.4.1

$$\begin{cases} L(u_1^{n+1/2}) = f & \text{sur } \Omega_1 \\ B[u_1^{n+1/2}] = g & \text{sur } \partial\Omega_1 \setminus \Gamma_1 \\ u_1^{n+1/2} = u_2^n & \text{sur } \Gamma_1 \end{cases} \quad (3.56)$$

$$\begin{cases} L(u_2^{n+1}) = f & \text{sur } \Omega_2 \\ B[u_2^{n+1}] = g & \text{sur } \partial\Omega_2 \setminus \Gamma_2 \\ u_2^{n+1} = u_1^{n+1/2} & \text{sur } \Gamma_2 \end{cases} \quad (3.57)$$

L'algorithme de Schwarz multiplicatif avec recouvrement a une convergence linéaire dans le cas de problèmes linéaires, ce que l'on peut décrire comme suit :

$$\begin{aligned}u_1^{n+1+1/2}|_{\Gamma_2} - u^\infty|_{\Gamma_2} &= \delta_{1,2}(u_2^n|_{\Gamma_1} - u^\infty|_{\Gamma_1}), \\ u_2^{n+1+1/2}|_{\Gamma_1} - u^\infty|_{\Gamma_1} &= \delta_{2,1}(u_1^n|_{\Gamma_2} - u^\infty|_{\Gamma_2}).\end{aligned} \quad (3.58)$$

où  $u^\infty$  est la solution exacte du problème considéré. Exemple : On considère le problème suivant :

$$\begin{cases} -\partial^2 u / \partial x^2 = f & \text{sur } \Omega = ]0, 1[, \\ u(0) = \alpha, \quad u(1) = \beta. \end{cases}$$

et une partition de  $[0, 1] = [0, \Gamma_1] \cup [\Gamma_2, 1]$  avec  $\Gamma_1 > \Gamma_2$

L'algorithme de Schwarz multiplicatif avec recouvrement s'écrit :

$$\begin{cases} -\partial^2 u_1^{n+1/2} / \partial x^2 = f & \text{sur } [0, \Gamma_1], \\ u_1^{n+1/2}(0) = \alpha, \\ u_1^{n+1/2}|_{\Gamma_1} = u_2^n|_{\Gamma_1}, \end{cases}, \quad \begin{cases} -\partial^2 u_2^{n+1} / \partial x^2 = f & \text{sur } [\Gamma_2, 1], \\ u_2^{n+1}(1) = \beta, \\ u_2^{n+1}|_{\Gamma_2} = u_1^{n+1/2}|_{\Gamma_2} \end{cases}$$

**Proposition 3.4.1** *La convergence de l'algorithme de Schwarz multiplicatif est purement linéaire i.e. :*

$$\begin{cases} u_1^{n+1/2}|_{\Gamma_2} - u^\infty|_{\Gamma_2} &= \eta_1(u_2^n|_{\Gamma_1} - u^\infty|_{\Gamma_1}) \\ u_2^{n+1}|_{\Gamma_1} - u^\infty|_{\Gamma_1} &= \eta_2(u_1^{n+1/2}|_{\Gamma_2} - u^\infty|_{\Gamma_2}) \end{cases} \quad (3.59)$$

où  $u^\infty$  est la solution exacte du problème considéré.

Démonstration : Soit  $e_i = u_i - u^\infty$  l'erreur commise dans le domaine  $\Omega_i$ .  $e_i(x)$  satisfait les équations :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\partial^2 e_1^{n+1/2} / \partial x^2 = 0 \quad \text{sur } [0, \Gamma_1], \\ e_1^{n+1/2}(0) = 0, \\ e_1^{n+1/2}|_{\Gamma_1} = e_2^n|_{\Gamma_1}, \end{array} \right. , \quad \left\{ \begin{array}{l} -\partial^2 e_2^{n+1} / \partial x^2 = 0 \quad \text{sur } [\Gamma_2, 1], \\ e_2^{n+1}(1) = 0, \\ e_2^{n+1}|_{\Gamma_2} = e_1^{n+1/2}|_{\Gamma_2} \end{array} \right.$$

L'équation caractéristique des EDOs précédentes est  $X^2 = 0$ . Les solutions sont de la forme  $e_i(x) = (a_i x + b_i)e_0(x)$ . Les conditions aux limites satisfaites par  $e_1$  et  $e_2$  permettent de définir les constantes  $a_i$  et  $b_i$ .

$$\begin{aligned} e_1^{n+1/2}(0) = 0 &\Rightarrow b_1 = 0 \\ e_1^{n+1/2}|_{\Gamma_1} = e_2^n|_{\Gamma_1} &\Rightarrow a_1 = e_2^n|_{\Gamma_1} / \Gamma_1 \\ e_2^{n+1}(1) = 0 &\Rightarrow a_2 = -b_2 \\ e_2^{n+1}|_{\Gamma_2} = e_1^{n+1/2}|_{\Gamma_2} &\Rightarrow a_2 = e_1^{n+1/2}|_{\Gamma_2} / (\Gamma_2 - 1) \end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned} e_1^{n+1/2}|_{\Gamma_2} &= \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1} e_2^n|_{\Gamma_1} \\ e_2^{n+1}|_{\Gamma_1} &= \frac{\Gamma_1 - 1}{\Gamma_2 - 1} e_1^{n+1/2}|_{\Gamma_2} \\ \Rightarrow e_2^{n+1}|_{\Gamma_1} &= \frac{\Gamma_1 - 1}{\Gamma_2 - 1} \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1} e_2^n|_{\Gamma_1} \end{aligned}$$

Comme  $\frac{\Gamma_2}{\Gamma_1} < 1$  et  $\frac{\Gamma_1 - 1}{\Gamma_2 - 1} < 1$ , l'algorithme de Schwarz multiplicatif converge.

**Proposition 3.4.2** *L'algorithme de Schwarz multiplicatif est d'autant plus rapide que le recouvrement des sous domaines est large.*

Démonstration : Supposons un recouvrement plus large  $\Gamma'_1 > \Gamma_1$  et  $\Gamma'_2 < \Gamma_2$  alors  $\frac{\Gamma'_2}{\Gamma'_1} < \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1}$

et  $\frac{\Gamma_1 - 1}{\Gamma_2 - 1} < \frac{\Gamma'_1 - 1}{\Gamma'_2 - 1}$ .

Ainsi, il faut deux itérations pour déterminer les facteurs  $\delta_{1,2}$  et  $\delta_{2,1}$ . Si  $\delta_{1,2}\delta_{2,1} \neq 1$ , alors (3.58) implique

$$u^\infty|_{\Gamma_2} = \frac{\delta_{1,2}(u_2^{n+1/2}|_{\Gamma_1} - u_2^n|_{\Gamma_1}) - \delta_{1,2}\delta_{2,1}u_1^n|_{\Gamma_2} + u_1^{n+1/2}|_{\Gamma_2}}{1 - \delta_{1,2}\delta_{2,1}}, \quad (3.60)$$

$$u^\infty|_{\Gamma_1} = \frac{\delta_{2,1}(u_1^{n+1/2}|_{\Gamma_2} - u_1^n|_{\Gamma_2}) - \delta_{1,2}\delta_{2,1}u_2^n|_{\Gamma_1} + u_2^{n+1/2}|_{\Gamma_1}}{1 - \delta_{2,1}\delta_{1,2}}. \quad (3.61)$$

Il ne faut donc que deux itérations pour reconstituer la solution exacte sur l'interface et une troisième itération pour calculer la solution sur chaque sous-domaine.

## Le cas d'une partition en $q$ sous-domaines 1D

Soit  $\Omega_i = (x_i^l, x_i^r), i = 1, \dots, q$  une partition de  $\Omega$  avec  $x_2^l < x_1^r < x_3^l < x_2^r, \dots, x_q^l < x_{q-1}^r$ . Nous considérons l'algorithme de Schwarz additif.

$$\text{for } i = 1, \dots, q, \text{ do} \quad (3.62)$$

$$L(u_i^{n+1}) = f_i, \in \Omega_i \quad (3.63)$$

$$u_i^{n+1}(x_i^l) = u_{i-1}^n(x_i^l), u_i^{n+1}(x_i^r) = u_{i+1}^n(x_i^r), \quad (3.64)$$

$$\text{enddo} \quad (3.65)$$

Notons  $u_i^{l,n+1} = u_i^{n+1}(x_i^l)$ ,  $u_i^{r,n+1} = u_i^{n+1}(x_i^r)$  et  $\tilde{u}^n$ , (respectivement  $\tilde{u}$ ) la trace itérée (respectivement exacte) sur l'interface, c'est à dire

$$\tilde{u}^n = (u_2^{l,n}, u_1^{r,n}, u_3^{l,n}, u_2^{r,n}, \dots, u_q^{l,n}, u_{q-1}^{r,n})$$

L'opérateur  $\tilde{u}^n \rightarrow \tilde{u}^{n+1}$  est linéaire. Soit  $P$  la matrice associée.  $P$  a la structure pentadiagonale suivante :

$$\begin{pmatrix} 0 & \delta_1^r & 0 & 0 & \dots \\ \delta_2^{l,l} & 0 & 0 & \delta_2^{l,r} & \dots \\ \delta_2^{r,l} & 0 & 0 & \delta_2^{r,r} & \dots \\ & & \dots & \delta_{q-1}^{l,l} & 0 & 0 & \delta_{q-1}^{l,r} \\ & & \dots & \delta_{q-1}^{r,l} & 0 & 0 & \delta_{q-1}^{r,r} \\ & & \dots & 0 & 0 & \delta_q^r & 0 \end{pmatrix}.$$

$\delta_1^r$  et  $\delta_q^r$  peuvent être calculés comme dans le cas de deux sous-domaines. Les sous-blocs  $\begin{pmatrix} \delta_i^{l,l} & \delta_i^{l,r} \\ \delta_i^{r,l} & \delta_i^{r,r} \end{pmatrix}$ ,  $i = 2, \dots, q-1$  peuvent être calculés en trois itérations de Schwarz suivant la section 3.4.1 :

Nous avons la relation  $(u_{i-1}^{r,n+1} - \tilde{u}_{i-1}^r, u_{i+1}^{l,n+1} - \tilde{u}_{i+1}^l)^t = P_i(u_i^{l,n} - \tilde{u}_i^l, u_i^{r,n} - \tilde{u}_i^r)^t$ . Ainsi, nous avons :

$$\begin{pmatrix} u_{i-1}^{r,n+3} - u_{i-1}^{r,n+2} & u_{i-1}^{r,n+2} - u_{i-1}^{r,n+1} \\ u_{i+1}^{l,n+3} - u_{i+1}^{l,n+2} & u_{i+1}^{l,n+2} - u_{i+1}^{l,n+1} \end{pmatrix} = P_i \begin{pmatrix} u_i^{l,n+2} - u_i^{l,n+1} & u_i^{l,n+1} - u_i^{l,n} \\ u_i^{r,n+2} - u_i^{r,n+1} & u_i^{r,n+1} - u_i^{r,n} \end{pmatrix} \quad (3.66)$$

Si la matrice dans le second membre de l'équation est inversible, alors nous pouvons calculer  $P_i$ . De l'égalité  $\tilde{u}^{n+1} - \tilde{u} = P_i(\tilde{u}^n - \tilde{u})$ , on obtient, si  $\|P\| < 1$  [83] et si  $Id - P$  est inversible - c'est le cas si la méthode de Schwarz converge-, l'accélération de Aitken généralisée (3.67) :

$$\tilde{u}^\infty = (Id - P)^{-1}(\tilde{u}^{n+1} - P\tilde{u}^n) \quad (3.67)$$

L'algorithme de résolution de Aitken-Schwarz est alors :

1. Calculer trois itérations de l'algorithme de Schwarz,

2. Calculer de manière numérique tous les sous-blocs  $P_i$  grâce à (3.66),
3. Appliquer une itération de la méthode de Schwarz,
4. Appliquer l'accélération de Aitken-Schwarz (3.67) pour  $n=0$ ,
5. Calculer la solution "convergée" dans chaque sous-domaine.

### 3.4.3 Illustration pour l'algorithme de Schwarz dans le cas 2D

#### Le problème continu

Nous allons illustrer le cas 2D dans le cas de l'équation de convection-diffusion à coefficients constants suivante :

$$(CDC) \begin{cases} -A\Delta u(x, y) + c \cdot \nabla u(x, y) + \lambda u(x, y) = 0, \forall (x, y) \in \Omega = ]-\infty, \infty[ \times ]0, 1[ \\ u(x, 0) = 0 = u(x, 1), \forall x \end{cases}$$

où  $c = (0, c_y)^t$ ,  $c_y > 0$ ,  $\lambda > 0$ . Le procédé d'Aitken nécessite un comportement purement linéaire de l'erreur. Malheureusement, dans l'espace physique en 2D, la convergence par point n'est pas linéaire du fait de la distribution spatiale. On se place donc dans une base orthonormale pour obtenir la linéarité de la convergence des modes (composantes) dans cette base. Cela permet d'éviter l'influence spatiale sur la convergence. Nous nous ramenons au cas 1D en appliquant la technique de Fourier.

Cherchons la solution rendue périodique sur le domaine  $\tilde{\Omega}$ . Nous décomposons l'inconnue recherchée dans sa base de Fourier :  $u(x, y) = \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \hat{u}_k(y) \exp(ikx)$ . On applique alors l'algorithme de Schwarz additif sur  $[0, 1] = [0, \Gamma_1] \cup [\Gamma_2, 1]$  avec  $\Gamma_1 > \Gamma_2$ . Les erreurs commises sur chaque sous-domaine satisfont pour chaque mode  $k$  :

$$\begin{aligned} -\frac{\partial^2 \hat{e}_{1,k}^{n+1}}{\partial y^2} + c_y A^{-1} \frac{\partial \hat{e}_{1,k}^{n+1}}{\partial y} + (k^2 + \lambda A^{-1}) \hat{e}_{1,k}^{n+1} &= 0, \text{ dans } \tilde{\Omega}_1; \hat{e}_1^{n+1}|_{\Gamma_1} = \hat{e}_2^n|_{\Gamma_1} \\ -\frac{\partial^2 \hat{e}_{2,k}^{n+1}}{\partial y^2} + c_y A^{-1} \frac{\partial \hat{e}_{2,k}^{n+1}}{\partial y} + (k^2 + \lambda A^{-1}) \hat{e}_{2,k}^{n+1} &= 0, \text{ dans } \tilde{\Omega}_1; \hat{e}_2^{n+1}|_{\Gamma_2} = \hat{e}_1^n|_{\Gamma_2} \end{aligned} \quad (3.68)$$

Dans notre cas,  $\Delta = (c_y A^{-1})^2 + 4(k^2 + \lambda A^{-1}) > 0$ , alors la solution générale est :  $\hat{e}_{i,k}^{n+1}(y) = C_{i,1} \exp(\frac{c_y A^{-1} + \sqrt{\Delta}}{2} y) + C_{i,2} \exp(\frac{c_y A^{-1} - \sqrt{\Delta}}{2} y)$ ,  $i = 1, 2$ . Il reste à fixer les constantes grâce aux conditions limites.

$$\begin{cases} \hat{e}_{1,k}^{n+1}(0) = 0 & \Rightarrow C_{1,1} = -C_{1,2} \\ \hat{e}_{1,k}^{n+1}(\Gamma_1) = \hat{e}_{2,k}^n(\Gamma_1) & \Rightarrow C_{1,1} = \hat{e}_{2,k}^n(\Gamma_1) / (2 \exp(\frac{c_y}{2} A^{-1}) \sinh(\frac{\sqrt{\Delta}}{2} \Gamma_1)) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{e}_{2,k}^{n+1}(1) = 0 \\ \hat{e}_{2,k}^{n+1}(\Gamma_2) = \hat{e}_{1,k}^n(\Gamma_2) \end{cases} \Rightarrow \begin{pmatrix} e^{\frac{c_y A^{-1} + \sqrt{\Delta}}{2}} & e^{\frac{c_y A^{-1} - \sqrt{\Delta}}{2}} \\ e^{\frac{c_y A^{-1} + \sqrt{\Delta}}{2} \Gamma_2} & e^{\frac{c_y A^{-1} - \sqrt{\Delta}}{2} \Gamma_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{2,1} \\ C_{2,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \hat{e}_{1,k}^n(\Gamma_2) \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} C_{2,1} = \hat{e}_{1,k}^n(\Gamma_2) \frac{e^{(-\frac{c_y}{2} A^{-1} \Gamma_2 - \frac{\sqrt{\Delta}}{2})}}{2 \sinh(\frac{\sqrt{\Delta}}{2}(\Gamma_2 - 1))} \\ C_{2,2} = \hat{e}_{1,k}^n(\Gamma_2) \frac{e^{(-\frac{c_y}{2} A^{-1} \Gamma_2 + \frac{\sqrt{\Delta}}{2})}}{2 \sinh(\frac{\sqrt{\Delta}}{2}(\Gamma_2 - 1))} \end{cases}$$

On obtient finalement les relations (3.69)–(3.70) :

$$\hat{e}_{1,k}^{n+1}(\Gamma_2) = \frac{e^{\frac{c_y}{2} A^{-1} \Gamma_2} \sinh(\frac{\sqrt{\Delta}}{2} A^{-1} \Gamma_2)}{e^{\frac{c_y}{2} A^{-1} \Gamma_1} \sinh(\frac{\sqrt{\Delta}}{2} A^{-1} \Gamma_1)} \hat{e}_{2,k}^n(\Gamma_1) \quad (3.69)$$

$$\hat{e}_{2,k}^{n+1}(\Gamma_1) = \frac{e^{\frac{c_y}{2} A^{-1}(\Gamma_1 - 1)} \sinh(\frac{\sqrt{\Delta}}{2} A^{-1}(\Gamma_1 - 1))}{e^{\frac{c_y}{2} A^{-1}(\Gamma_2 - 1)} \sinh(\frac{\sqrt{\Delta}}{2} A^{-1}(\Gamma_2 - 1))} \hat{e}_{1,k}^n(\Gamma_2) \quad (3.70)$$

Nous avons donc bien une expression linéaire de la fonction transfert de l'erreur sur les interfaces dans l'espace des modes. La matrice associée est de la forme

$$\begin{pmatrix} 0 & \delta_{k_{12}} \\ \delta_{k_{21}} & 0 \end{pmatrix}$$

Ici, chaque mode de Fourier possède sa propre matrice de transfert de l'erreur. Nous pouvons donc dans ce cas découpler les modes. Comme  $\Gamma_1 > \Gamma_2$  les fonctions  $k \rightarrow \delta_{12}$  et  $k \rightarrow \delta_{21}$  sont des fonctions croissantes en  $k$ . Donc l'erreur sur les hauts modes de la solutions est réduite plus rapidement que les bas modes avec l'algorithme de Schwarz lorsque l'algorithme converge.

### Le cas d'une décomposition en maillage conforme et régulier pour plusieurs sous-domaines lorsque l'opérateur est séparable

Pour exposer le principe, nous nous plaçons d'abord dans le cadre d'un maillage régulier et conforme. Nous pouvons résoudre par exemple par la méthode des différences finies. Considérons une décomposition (N-D) sans recouvrement en  $q$  sous-domaines, pour  $\theta = 1$ , appliquée au problème de convection-diffusion (CDC). A partir des coefficients de Fourier des traces des solutions itérées de Schwarz, on construit la matrice de l'opérateur de transfert de l'erreur entre les sous-domaines. Dans ce cas linéaire et séparable, ceci nous conduit au découplage des modes de Fourier, c'est à dire que chaque mode de Fourier possède sa propre matrice de transfert de l'erreur. Considérons le cas de  $M + 1$  modes de Fourier. Soit la suite  $\hat{v}_k^n = (\hat{u}_{k,1|\Gamma_1}^n, \dots, \hat{u}_{k,q-1|\Gamma_{q-1}}^n)^t$   $k = 0, \dots, M$ . L'opérateur  $T_k$ ,

$$(\hat{u}_{k,1|\Gamma_1}^n - \hat{u}_{k,1|\Gamma_1}^\infty, \dots, \hat{u}_{k,q-1|\Gamma_{q-1}}^n - \hat{u}_{k,q-1|\Gamma_{q-1}}^\infty) \rightarrow (\hat{u}_{k,1|\Gamma_1}^{n+1} - \hat{u}_{k,1|\Gamma_1}^\infty, \dots, \hat{u}_{k,3|\Gamma_{q-1}}^{n+1} - \hat{u}_{k,3|\Gamma_{q-1}}^\infty)$$

est linéaire. Soit la matrice  $P_k$ ,  $k = 0, \dots, M$  associée à l'opérateur  $T_k$ . (3.84) implique :

$$\hat{v}_k^{i+2} - \hat{v}_k^{i+1} = P_k(\hat{v}_k^{i+1} - \hat{v}_k^i), \quad i = n-1, n, \quad k = 0, \dots, M. \quad (3.71)$$

Pour chaque mode, si  $u_0$  est différent de la solution, il faut au plus  $q-1$  itérations pour déterminer  $P_k$  grâce à (3.85). Ensuite, si l'opérateur  $Id - P_k$  n'est pas singulier, l'accélération d'Aitken s'écrit ainsi pour chaque mode :

$$\hat{v}_k^\infty = (Id - P_k)^{-1}(\hat{v}_k^{n+1} - P_k \hat{v}_k^n), \quad k = 0, \dots, M. \quad (3.72)$$

Cela conduit à l'algorithme suivant :

1. calculer  $n_0$  itérations de l'algorithme Neumann-Dirichlet,
2. calculer les modes  $\hat{u}_k^i$ ,  $k = 0, \dots, M$ ,  $i = 0, \dots, n_0$  par FFT [82],
3. calculer numériquement la matrice de transfert d'erreur  $P_k$  pour chaque  $k$ ,
4. déterminer  $\hat{v}_k^\infty$  pour chaque  $k$ ,
5. recomposer la trace physique "convergée"  $v^\infty$ ,
6. appliquer une itération supplémentaire de l'algorithme Neumann-Dirichlet.

Dans le cas d'une équation de convection-diffusion à coefficients constants, il est aisé de constater que le taux de convergence est d'autant plus élevé que le mode est élevé. Comme l'algorithme de Schwarz diminue naturellement les hauts modes, (convergence exponentielle dans l'équation qui nous intéresse), il suffit d'appliquer le procédé d'Aitken aux bas modes.

Pour chaque  $k \geq 0$ , La construction de  $P_k$  nécessite au moins  $q + 1$  itérations si les composantes de l'erreur sont liées. La réduction du nombre d'itérations de Schwarz pour construire  $P_k$  peut se réaliser de deux façons. La première consiste à approximer  $P_k$  par une matrice bande et de calculer cette approximation par blocs (avec moins d'itérations) [27, 28, 29]. La seconde peut être dans certains cas décrire cette erreur dans une base fonctionnelle où les modes (composantes) sont découplés ou faiblement couplés [23].

Le cas des problèmes non linéaires a également été abordé. Même pour un problème non linéaire, la méthode de Schwarz multiplicative a une convergence géométrique. La démonstration est faite dans [24] pour des problèmes non linéaires elliptiques. Le problème de Bratu (dont les références sont indiquées dans [78]) a été ainsi résolu par l'algorithme de Aitken-Schwarz [23]. Le principe a été de l'appliquer de manière itérative et de résoudre chaque sous-problème par la technique de Newton en approximant la matrice de transfert de l'erreur  $P$  par une matrice bande par exemple. Une autre stratégie a été utilisée pour résoudre des problèmes p-Laplacien : se placer dans un cadre linéaire. Ainsi, l'algorithme d'Aitken-Schwarz a été utilisé en tant que solveur linéaire pour le problème linéarisé généré par une itération de l'algorithme de Newton [23].

Revenons à présent dans le cadre de notre étude. Nous allons illustrer dans la section suivante l'algorithme de Aitken-Schwarz dans le cas d'un maillage conforme, appliqué au modèle (2.28)–(2.33) développé dans la partie simulation.

## 3.5 Exemple en 2D dans le cas d'un maillage conforme

Dans cette section, nous montrons un exemple d'accélération de la convergence de la méthode de Schwarz par la technique d'Aitken dans le cas d'une discrétisation régulière appliquée au problème évolutif en temps (2.28)–(2.33) issu du développement asymptotique d'ordre 1 obtenu dans le chapitre 2. Nous prenons des conditions aux limites périodiques en  $x$ , ce qui nous incite à simuler le problème par la méthode de Fourier. Le problème (2.28)–(2.33) se caractérise par des sauts de flux, alors que la méthode de Fourier requiert des solutions de classe  $C^1$ . Nous allons donc utiliser une décomposition de domaine sans recouvrement dont les interfaces coïncident avec les sauts de flux. La problématique du problème (2.11)–(2.13) est rigoureusement identique et nous pourrions appliquer la même technique de simulation. Mais l'hypothèse de conditions aux limites périodiques n'est guère réaliste et nous ne prétendons donc pas ici effectuer une simulation réaliste de problèmes définis dans le chapitre 2. Nous voulons surtout ici illustrer que la technique d'Aitken fonctionne effectivement très bien dans le cas d'un maillage conforme, malgré les sauts de flux aux interfaces. Simuler le problème (2.28)–(2.33) plutôt que le problème (2.11)–(2.13) nous permet d'illustrer le cas d'une décomposition de domaines en plus de deux sous-domaines. Nous nous servons ici de méthodes spectrales que nous utilisons dans les deux applications que nous présentons dans les chapitres 4 et 5.

### 3.5.1 L'algorithme de Schwarz appliqué à (2.28)–(2.33)

Nous allons utiliser un schéma implicite en temps pour traiter le terme diffusif et un schéma explicite pour le terme convectif. Nous obtenons le schéma semi-implicite d'Euler suivant :

$$\omega^{nh} \frac{c_\varepsilon^{0m+1} - c_\varepsilon^{0m}}{\Delta t} - \nabla \cdot (A^{nh} \nabla) c_\varepsilon^{0m+1} + \lambda \omega^{nh} c_\varepsilon^{0m+1} = -(v^{nh} \cdot \nabla) c_\varepsilon^{0m} \quad \text{dans } G_\varepsilon \times [0, T] \quad (3.73)$$

où  $m$  est le pas de temps.

Nous souhaitons utiliser la méthode pseudo-spectrale car elle se prête naturellement à une parallélisation à mémoire distribuée par une distribution des résolutions des modes selon les processeurs disponibles. Considérons le cas où les conditions aux limites dans la direction  $x$  sont périodiques. Alors nous pouvons utiliser une décomposition de Fourier dans cette direction. En revanche, dans la direction  $y$ , en raison des conditions de Neumann, nous utilisons une discrétisation de Chebychev. D'après (3.86) la fonction  $c_\varepsilon^0$  est approchée par :

$$P_M c_\varepsilon^0(x_i, y_j) = \sum_{0 \leq k \leq M} \hat{c}_k(y_j) \exp(kx_i),$$

où  $\hat{c}_k(y_j) = \sum_{0 \leq l \leq N} \hat{\hat{c}}_{k,l} T_l(y_j)$ ,  $x_i = \frac{2i\Pi}{M}$ ,  $i = 0, \dots, M$  et  $y_j = \cos(\frac{j\Pi}{N})$ ,  $j = 0, \dots, N$ .

On est alors amené à résoudre pour chaque mode  $k$  le système linéaire suivant :

$$-(A^{nh}k^2 + (\lambda + \frac{1}{\Delta t})\omega^{nh})\hat{u}_k(y_j) = \hat{f}_k(y_j) \quad (3.74)$$

où  $\hat{f}_k(y_j) = \frac{\omega^{nh}}{\Delta t} \hat{c}_k^m - (v^{nh} \cdot \widehat{\nabla} c_\varepsilon^{0m})_k$ ,  $j = 0, \dots, N$  avec les conditions aux limites relatives à chaque sous-domaine. Nous allons utiliser une méthode de Schwarz itérative sans recouvrement pour pouvoir prendre en compte les sauts. La Figure 3.2 représente la décomposition de domaine de niveau 2 utilisée. Soit  $c_{2,i} = c_\varepsilon^0|_{\Omega_{2,i}}$ ,  $i = 1, \dots, 3$ . L'algorithme de Schwarz

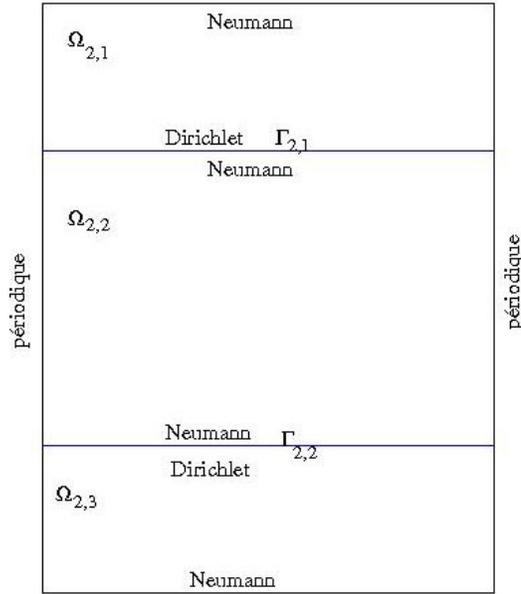


FIG. 3.2 – Décomposition de domaine de niveau 2 utilisée pour la simulation du terme d'ordre 0 de l'expansion asymptotique

utilisé est le suivant :

$$-\nabla \cdot (A\nabla c_{2,1}^{m+1,n+1}) + (\lambda + \frac{1}{\Delta t})\omega^{nh}c_{2,1}^{m+1,n+1} = -v_{2,1}^m \cdot \nabla c_{2,1}^m \quad \text{dans } \Omega_{2,1} \quad (3.75)$$

$$\frac{\partial}{\partial n}c_{2,1}^{m+1,n+1} = -\frac{\partial}{\partial n}c_1^m \quad \text{sur } \Gamma_{2,1} \quad (3.76)$$

$$c_{2,1}^{m+1,n+1} = c_{2,2}^{m+1,n+1/2} \quad \text{sur } \Gamma_{2,1} \quad (3.77)$$

$$\frac{\partial}{\partial n}c_{2,2}^{m+1,n+1/2} = -\frac{\partial}{\partial n}c_{2,1}^{m+1,n} + \text{saut} \quad \text{sur } \Gamma_{2,1} \quad (3.78)$$

$$-\nabla \cdot (A\nabla c_{2,2}^{m+1,n+1/2}) + (\lambda\omega^{nh} + \frac{1}{\Delta t})c_{2,2}^{m+1,n+1} = -v_{2,2}^m \cdot \nabla c_{2,2}^m \quad \text{dans } \Omega_{2,2} \quad (3.79)$$

$$\frac{\partial}{\partial n}c_{2,2}^{m+1,n+1/2} = -\frac{\partial}{\partial n}c_{2,3}^{m+1,n} + \text{saut} \quad \text{sur } \Gamma_{2,2} \quad (3.80)$$

$$-\nabla \cdot (A\nabla c_{2,3}^{m+1,n+1}) + (\lambda + \frac{1}{\Delta t})\omega^{nh} + \frac{1}{\Delta t}c_{2,3}^{m+1,n+1} = -v_{2,3}^m \cdot \nabla c_{2,3}^m \quad \text{dans } \Omega_{2,3} \quad (3.81)$$

$$c_{2,3}^{m+1,n+1} = c_{2,2}^{m+1,n+1/2} \quad \text{sur } \Gamma_{2,3} \quad (3.82)$$

$$\frac{\partial}{\partial n}c_{2,3}^{m+1,n+1} = -\frac{\partial}{\partial n}c_3^m \quad \text{sur } \Gamma_3 \quad (3.83)$$

### 3.5.2 La technique d'Aitken appliquée à l'algorithme de Schwarz (3.75)–(3.83)

Nous allons utiliser la technique d'Aitken pour accélérer la convergence de cet algorithme (cf. [23]). Ici, le comportement linéaire de l'erreur modale (norme  $L^\infty$  de la différence entre deux itérations de Schwarz successives pour chaque mode) de Schwarz est respecté. Toutefois, en raison des valeurs de la solution sur les interfaces dûes aux sauts de flux du modèle, il est préférable de coupler les interfaces pour chaque mode. Précisons le procédé d'Aitken dans le cadre de la décomposition de domaine. A partir des coefficients de Fourier des traces des solutions itérées de (N-D), on construit la matrice de l'opérateur de transfert de l'erreur entre les sous-domaines. L'opérateur que nous considérons dans un premier temps est linéaire à coefficients constants (coefficient de diffusion constant dans la couche d'argile). Ceci nous conduit au découplage des modes de Fourier, c'est à dire que chaque mode de Fourier possède sa propre matrice de transfert de l'erreur. D'autre part, en raison de la faible distance qui les sépare, les erreurs sur interfaces artificielles sont couplées. Considérons le cas de  $M + 1$  modes de Fourier. Soit la suite  $\hat{u}_k^n = (\hat{u}_{k,1|\Gamma_1}^n, \hat{u}_{k,3|\Gamma_2}^n)^t$   $k = 0, \dots, M$ . L'opérateur  $T_k$ ,

$$(\hat{u}_{k,1|\Gamma_1}^n - \hat{u}_{k,1|\Gamma_1}^\infty, \hat{u}_{k,3|\Gamma_2}^n - \hat{u}_{k,3|\Gamma_2}^\infty) \rightarrow (\hat{u}_{k,1|\Gamma_1}^{n+1} - \hat{u}_{k,1|\Gamma_1}^\infty, \hat{u}_{k,3|\Gamma_2}^{n+1} - \hat{u}_{k,3|\Gamma_2}^\infty) \quad (3.84)$$

est linéaire. Si les erreurs aux interfaces sont couplées, la matrice  $P_k$ ,  $k = 0, \dots, M$ , associée à  $T_k$  a la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} \delta_{k11} & \delta_{k12} \\ \delta_{k21} & \delta_{k22} \end{pmatrix}$$

(3.84) implique :

$$\hat{u}_k^{i+2} - \hat{u}_k^{i+1} = P_k(\hat{u}_k^{i+1} - \hat{u}_k^i), \quad i = n - 1, n, \quad k = 0, \dots, M. \quad (3.85)$$

Pour chaque mode, il faut trois itérations pour déterminer  $\delta_{k_{11}}, \delta_{k_{12}}, \delta_{k_{21}}, \delta_{k_{22}}$  grâce à (3.85). Ensuite, si l'opérateur  $Id - P_k$  n'est pas singulier, nous appliquons la relation (3.72).

Nous avons simulé le terme  $c_\varepsilon^0$  par éléments spectraux pour une itération en temps et 100 itérations en temps avec un tenseur de diffusion constamment égal à  $510^{-7} \text{m}^2 \cdot \text{an}^{-1}$  et une convection de  $10^{-4} \text{m} \cdot \text{an}^{-1}$  dans la direction horizontale et un saut d'une valeur constante de 1. Nous prenons un pas de temps constant égal à 50 ans. Ces valeurs n'ont pas la prétention d'être réalistes et servent uniquement à tester le code. Une accélération de Aitken sur le mode 0 de l'erreur de Schwarz au bout de 4 itérations de Schwarz est représentée en Figure 3.3. Le résultat est tout à fait satisfaisant puisque nous passons d'une erreur itérative de  $10^4$  à une erreur itérative  $5 \cdot 10^{-4}$ . Les Figures 3.4 et 3.5 représentent respectivement les isovaleurs et représentations 3D de l'ordre 0 pour une simulation à une itération de temps et 100 itérations de temps.

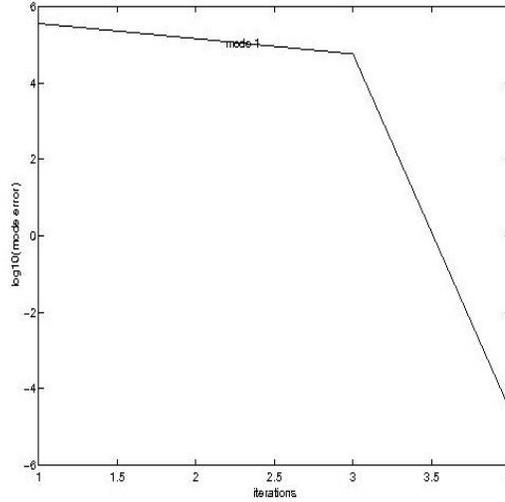


FIG. 3.3 – Accélération de la convergence de Schwarz par Aitken appliquée au mode 0 pour le problème (2.28)–(2.33)

Cette technique est très performante lorsqu'il s'agit de maillage régulier conforme pour des opérateurs linéaires. Notre objectif est d'étendre cette méthodologie pour des maillages non conformes.

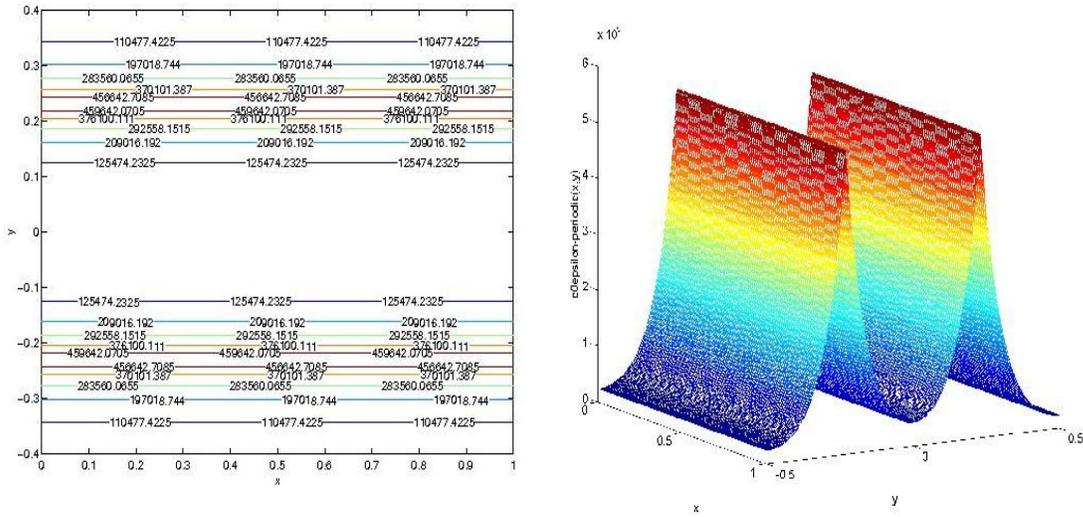


FIG. 3.4 – Isovaleurs et représentation 3D de l’ordre 0 obtenues pour un pas de temps avec l’algorithme ES

### 3.6 Traitement d’une décomposition de domaine en maillage non conforme

Nous souhaitons étendre l’accélération de la méthode de Schwarz par la technique d’Aitken au cas d’une décomposition de domaine en maillage non conforme. Jusqu’ici, c’est à dire dans le cadre de problèmes linéaires à coefficients constants dans un pavé avec un maillage régulier, nous avons appliqué la technique d’Aitken et obtenu directement la trace exacte sur l’interface artificielle. Mais ce n’est pas toujours le cas. Un algorithme heuristique, que nous utilisons dans nos travaux, a été développé pour faire face à ce type de situation. Il s’agit tout simplement d’appliquer itérativement le procédé d’Aitken-Schwarz, jusqu’à convergence le cas échéant. Cette méthode a déjà été appliquée avec succès à des problèmes divers comme le problème de Poisson dans un domaine de définition non convexe [23] ou des problèmes elliptiques linéaires à coefficients bornés non constants [19].

La méthodologie que nous développons utilise des méthodes de résolution différentes selon les sous-domaines. D’une part, nous voulons utiliser des solveurs adaptés aux propriétés des couches géologiques dans le cas du modèle de convection-diffusion. D’autre part, nous sommes contraints pour des raisons techniques d’utiliser deux solveurs différents dans le cadre de la résolution d’un problème diffusif non convexe. Cela nous mène à avoir des discrétisations différentes selon les sous-domaines. Nous rencontrons deux typologies de non conformité :

(a) maillage régulier vs maillage structuré non régulier : dans un sous-domaine, une

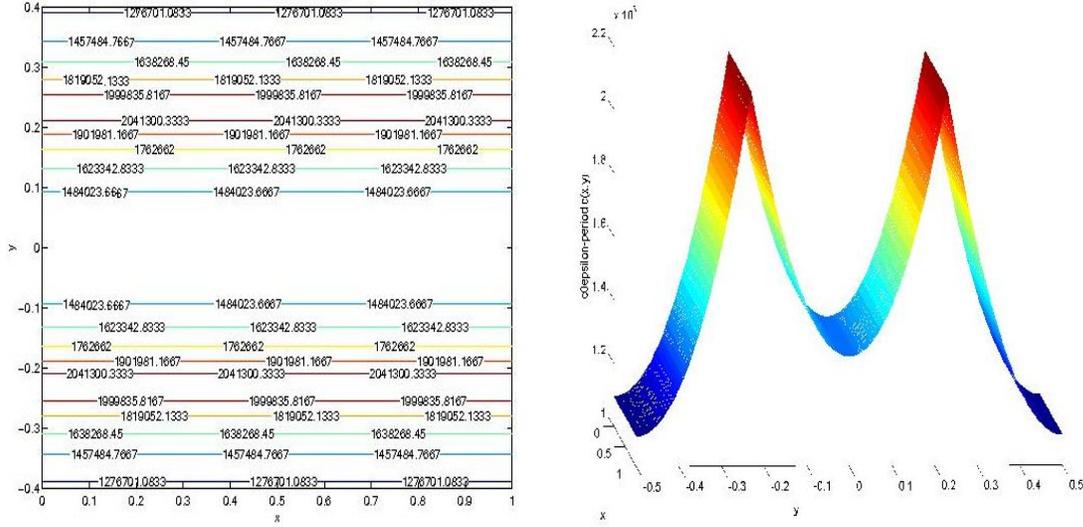


FIG. 3.5 – Isovaleurs et représentation 3D de l'ordre 0 obtenues pour 100 pas de temps avec l'algorithme ES

discrétisation régulière, avec des conditions aux limites périodiques nous permet d'utiliser la méthode de Fourier. Dans l'autre sous-domaine, nous simulons par la méthode de Chebychev par collocation sur une grille structurée non régulière. Nous avons affaire à deux méthodes spectrales par collocation. La précision de la projection spectrale dépend exponentiellement de la régularité des solutions, cf. les formules (3.90) et (3.92). Or la méthode de Neumann-Dirichlet a pour propriété de régulariser la trace sur l'interface au fur et à mesure des itérations dans le cas des opérateurs elliptiques. La précision de la projection spectrale va nous permettre de transmettre des informations entre les sous-domaines tout en conservant la linéarité de l'erreur itérative sur l'interface dans le cas discret et donc d'appliquer la technique d'accélération de la convergence par la technique d'Aitken développée dans la section 3.4.

- (b) maillage structuré non régulier vs maillage non structuré : nous simulons d'un côté par la méthode spectrale de Chebychev en raison de la régularité des coefficients et du domaine rectangulaire convexe, et de l'autre par éléments finis mixtes hybrides, afin de tenir compte de l'hétérogénéité des coefficients. Nous souhaitons également accélérer la convergence l'algorithme (N-D). A cette fin, nous introduisons une troisième grille, régulière, dans laquelle nous accélérons la convergence de la trace de l'erreur sur l'interface. Une fois de plus, cela est réalisé grâce au concours de la précision spectrale et des propriétés régularisantes de (N-D).

Pour le problème discret, nous devons considérer, en plus de l'erreur due à la décomposition de Schwarz sur l'interface, l'erreur de discrétisation sur l'interface. La technique d'Aitken requiert une évaluation très précise de la trace de la solution sur

les interfaces. Or nous nous plaçons dans le cadre d'un maillage non conforme. D'autre part, nous avons toujours considéré jusqu'à présent le cas de conditions aux limites homogènes afin de pouvoir considérer les modes de la solution sans problèmes. Ce n'est plus forcément le cas dans nos deux applications et nous devons gérer ce problème supplémentaire pour pouvoir appliquer la technique d'Aitken en 2D. Voici quelle est, très concrètement, notre approche de l'accélération de la méthode de Schwarz par la technique d'Aitken en maillage non conforme :

- (a) La procédure (b)–(d) est heuristiquement utilisée de manière itérative jusqu'à convergence :
- (b) La trace de la solution itérée est calculée sur un maillage structuré, régulier ou non, par une méthode spectrale.
- (c) La trace de la solution itérée est projetée spectralement, le cas échéant, sur une grille régulière  $M_{reg}$ . La projection spectrale nous permet de ne pas perdre trop d'informations et de préserver ainsi la linéarité de l'erreur sur l'interface. Les détails de cette projection sont exposés dans la section 3.6.2. Si cette grille n'existe pas a priori, comme dans le cas d'un couplage éléments finis / méthode spectrale de Chebychev, elle est introduite en tant que grille intermédiaire.
- (d) Nos conditions aux limites ne sont pas forcément homogènes. Pour pouvoir calculer les modes de la solution itérée exprimée dans une grille régulière, nous utilisons une technique d'extension de la solution sur un domaine fictif périodique décrite dans la section 3.6.3. Elle a la propriété de garantir une certaine régularité à la solution étendue, indispensable dans le cadre spectral.
- (e) La solution est alors décomposée dans la base discrète  $V = \{\exp(ikx_j), x_j = \frac{2\pi j}{M+1}, j = 0, \dots, M\}$  pour chaque mode  $k = 0, \dots, M$  et l'accélération par la technique d'Aitken est appliquée aux modes de la solution, comme décrit dans la section 3.5.2.

Une autre approche est effectuée dans [28, 29, 30]. On part d'un maillage  $M$  non structuré et d'un opérateur  $O$  dans l'espace physique muni du produit scalaire euclidien. La matrice de transfert d'erreur  $P$  est approchée par une matrice bande dont est déduite la base de vecteurs propres  $V$ . Le développement est effectué dans cette base pour accélérer par Aitken.

Nous avons un maillage non uniforme  $M$  et l'espace de Fourier ou de Chebychev 1D muni du produit scalaire associé avec une base orthonormée  $V$  pré-existante. Nous en déduisons une matrice  $P$  de transfert d'erreur dans cette base  $V$  et nous accélérons la trace dans cette base.

Notre fil conducteur va être d'exploiter la précision de la projection spectrale. Nous utilisons dans notre travail deux types d'approximations spectrales, soit la méthode Fourier, soit la méthode de Chebychev.

### 3.6.1 Cas d'un transfert d'un maillage régulier vers un maillage structuré non régulier ou un maillage non structuré

Rappelons brièvement les principes et les propriétés dans le cas de la méthode de Fourier. Soit  $L^2[0, 2\pi]$  l'espace de Hilbert muni du produit scalaire  $(u, v) = \int_0^{2\pi} u(x)v(\bar{x})dx$ , de norme associée  $\|u\| = (\int_0^{2\pi} |u(x)|^2 dx)^{1/2}$ . Soit  $S_N = \text{span}\{e^{ikx}, -N/2 \leq k \leq N/2 - 1\}$  de produit scalaire discret associé  $(u, v)_N = \frac{2\pi}{N} \sum_{j=0}^{N-1} u(x_j)v(\bar{x}_j)$  Le principe de base repose sur un développement en série dans la base orthogonale  $[x \rightarrow \exp(ikx)]_{k=-\infty, \dots, +\infty}$  de la fonction  $u : [0, 2\pi] \rightarrow \mathcal{C}$ ,  $u \in L^2([0, 2\pi])$ . Le k-ème coefficient du développement diminue plus rapidement que  $1/k$  si u est une fonction indéfiniment différentiable et périodique. Cela implique que la série de Fourier tronquée fournit rapidement, c'est à dire pour peu de termes, une bonne approximation de u. Notons par  $P_N u$  la série de Fourier tronquée d'ordre N aux noeuds  $x_j = \frac{2\pi j}{N}$  (3.86).

$$P_N u(x_j) = \sum_{k=-N/2}^{k=N/2-1} \hat{u}_k \exp(ikx_j) \quad (3.86)$$

$P_N$  est en fait la projection orthogonale de  $u$  dans  $S_N$  muni de  $(\cdot, \cdot)_N$ . Soit la série de Fourier discrète  $I_N u$  :

$$I_N u(x) = \sum_{k=-N/2}^{k=N/2-1} \tilde{u}_k \exp(ikx) \quad (3.87)$$

Un nombre fini de valeurs de ces coefficients peut être calculé en utilisant un nombre fini de points. Par un choix approprié de formules de quadratures, la série finie formée par la transformée de Fourier discrète est en fait l'interpolée de u aux noeuds de quadrature. Les coefficients de Fourier peuvent se calculer par la formule de collocation aux noeuds  $x_j = \frac{2\pi j}{N}$  (3.88) :

$$\tilde{u}_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{j=N} u(x_j) \exp(-ikx_j), \quad k = -N/2, \dots, k = N/2 - 1 \quad (3.88)$$

Pour toute fonction u continue, nous avons  $(I_N u, v)_N = (u, v)$ ,  $\forall v \in S_N$  Alors nous projetons la trace itérée par exemple sur l'interface aux noeuds de Gauss-Lobatto  $\tilde{x}_l = \cos\left(\frac{\pi l}{N_2}\right)$ ,  $l = 0, \dots, N_2$  par :

$$I_N u(\tilde{x}_l) = \sum_{k=-N/2}^{k=N/2-1} \hat{u}_k \exp(ikh^{-1}(\tilde{x}_l)) \quad (3.89)$$

où  $h^{-1}$  est le mapping linéaire de  $[-1, 1]$  sur  $[0, 2\pi]$ . Cette projection est naturellement également valable pour n'importe quel point, et en particulier par l'intersection d'une grille non régulière et de l'interface artificielle. Naturellement, l'un des intérêts numériques de l'emploi de la méthode de Fourier réside dans le calcul de l'évaluation soit des coefficients, soit de la valeur de la fonction en un point grâce à la transformée de Fourier rapide (FFT) [82]. Ce calcul requiert  $5N \log_2(N)$  opérations dans le cas complexe. Comme nous l'avons déjà dit, l'un des intérêts majeurs des méthodes spectrales réside dans leur précision exponentielle en fonction de la régularité de la fonction. Si on considère le polynôme interpolant la fonction  $u$  de classe  $C^m$  aux noeuds  $x_j = \frac{2\pi j}{N}$ , nous pouvons décrire l'erreur d'interpolation dans  $L^2([0, 2\pi])$  par l'inégalité (3.90).

$$\|u - I_N(u)\|_{L^2([0, 2\pi])} \leq CN^{-m} \|u^{(m)}\|_{L^2([0, 2\pi])} \quad (3.90)$$

Ainsi l'erreur de discrétisation sera exponentiellement décroissante sur l'interface et à partir d'une discrétisation suffisamment fine, elle sera négligeable par rapport à l'erreur de Schwarz sur l'interface. Nous conservons ainsi dans le cas discret avec un maillage régulier un comportement de l'erreur itérative sur l'interface linéaire.

### 3.6.2 Cas d'un transfert structuré non régulier vers un maillage structuré régulier

Notre principe a été de conserver un maillage régulier pour appliquer la technique d'Aitken via la méthode Fourier. Nous avons donc introduit une grille régulière sur laquelle nous travaillons pour appliquer la technique d'Aitken. Une fois de plus, la précision de la projection spectrale va nous permettre de conserver la linéarité de l'erreur itérative discrète de Schwarz sur l'interface.

Le principe général de la méthode de Chebychev par collocation est exactement le même que celui de la méthode de Fourier.

Soit l'espace  $L^2([-1, 1]_w)$  muni du produit scalaire associé au poids  $w = (1 - x^2)^{-1/2}$  :

$$(u, v)_w = \int_{-1}^{+1} u(x)v(x)w(x)dx.$$

Soit la norme associée

$$\|u\|_w = \left( \int_{-1}^{+1} u(x)^2 w(x) dx \right)^{1/2}.$$

Soit la fonction  $u$  continue sur  $[-1, 1]$ . Elle est approximée par une somme finie de polynômes de Chebychev :

$$u_N = \sum_{0 \leq i \leq N} a_i T_i(x)$$

où  $T_i(x) = \cos(i \arccos(x))$ . Alors, l'espace discret est défini par

$$X_N = \left\{ v \mid v = \sum_{0 \leq i \leq N} a_i T_i(x), \forall a_i \right\}.$$

Les coefficients  $a_i$  sont obtenus par collocation de la solution aux points  $(x_i)$ , dits noeuds de Gauss-Lobatto, définis par :

$$x_i = \cos\left(\frac{\pi i}{N}\right).$$

Les points de collocation sont les zéros des polynômes de Chebychev. Posons le produit scalaire discret pour tout  $u, v$  continues sur  $[-1, 1]$  :

$$(u, v)_N = \sum_{j=0}^N u(x_j)v(x_j)w_j.$$

tel que :

$$w_j = \begin{cases} \frac{\pi}{N}, & \text{si } 1 \leq j \leq N-1 \\ \frac{\pi}{2N}, & \text{si } j = 0, N \end{cases}$$

Soit  $I_N u \in \mathcal{P}_N$  la transformée de Chebychev discrète.

$$I_N u(x) = \sum_{i=0}^N u_i^* T_i(x), \quad u_i^* = (u, T_i)_N$$

Par le choix des formules de quadrature de Gauss, la série finie formée par la transformée de Chebychev discrète est en fait l'interpolée de  $u$  aux noeuds de Gauss-Lobatto. Pour toute fonction  $u$  continue, nous avons  $(I_N u, v)_N = (u, v)_w, \forall v \in X_N$ . Alors nous projetons la trace itérée sur l'interface aux noeuds de la grille régulière  $\tilde{x}_l = \frac{2\pi l}{N_2}, l = 0, \dots, N_2$  par :

$$I_N u(\tilde{x}_l) = \sum_{k=0}^{k=N} u_k^* T_k(h^{-1}(\tilde{x}_l)) \quad (3.91)$$

où  $h^{-1}$  est le mapping linéaire de  $[0, 2\pi]$  sur  $[-1, 1]$ . Si on considère le polynôme interpolant la fonction  $u$  de classe  $C^m$  aux noeuds  $x_j = \cos\left(\frac{\pi j}{N}\right)$ , nous pouvons décrire l'erreur d'interpolation dans  $L^2([-1, 1]_w)$  par l'inégalité (3.92).

$$\|u - I_N(u)\|_{L^2_w([-1, 1])} \leq CN^{-m} \|u^{(m)}\|_{L^2[-1, 1]_w} \quad (3.92)$$

### 3.6.3 Calcul des modes de la trace itérée sur l'interface

Une fois que la trace est exprimée dans un maillage régulier, nous voulons calculer sa transformée de Fourier. Nous n'avons pas forcément des conditions aux limites homogènes dans le sens orthogonal à l'interface. Nous devons prolonger de manière périodique la trace sur un domaine  $\tilde{\Gamma}$ . Plus nous aurons une trace sur l'interface régulière, exponentiellement meilleure sera la qualité de notre projection d'après (3.90) et (3.92). La plupart du temps, les conditions aux bords des interfaces ne sont pas périodiques. Nous devons donc étendre

fictivement la solution  $u$  sur l'interface artificielle  $\Gamma$  à une solution  $\tilde{u}$  périodique sur  $\tilde{\Gamma}$ . Le jeu sera alors dans nos applications de développer des stratégies permettant que la régularité de  $\tilde{u}$  sur  $\tilde{\Gamma}$  soit suffisante. Nous utilisons en fait deux solutions techniques à notre disposition :

- (a) dans l'espace physique, nous prolongeons la solution itérée par un polynôme d'Hermite d'ordre 5 [81]. Les dérivées première et troisième sont calculées par différences finies décentrées d'ordre élevé. Il est vrai que cette méthode peut conduire à une dérivée troisième discontinue aux points de transition entre le domaine physique et l'extension [45]. Cela nous conduit à une solution  $\tilde{u}$  de classe  $C^2(\tilde{\Gamma})$  qui nous impose de travailler avec une discrétisation fine. Mais elle bénéficie d'une mise en application simple et elle est employée dans [21, 20] en donnant des résultats satisfaisants.
- (b) dans l'espace des modes, nous appliquons un filtre [48] aux modes de la solution itérée prolongée.

**Proposition 3.6.1** *Soit les  $M + 1$  modes de Fourier d'une fonction  $f$  de classe  $C^q$  ayant une discontinuité en  $\xi$ . Alors le filtre  $\sigma : R^+ \Rightarrow R$  est tel que :*

$$f_M^\sigma(x) = \sum_{-M/2 \leq k \leq +M/2} \hat{f}_k \sigma\left(\frac{k}{M}\right) e^{ikx}$$

*converge plus rapidement vers  $f(x)$  lorsque  $M$  tend vers l'infini que la somme de Fourier originelle*

$$f_M(x) = \sum_{-M/2 \leq k \leq +M/2} \hat{f}_k e^{ikx}$$

*pour  $x \in [0, 2\pi]$ .*

Il existe plusieurs filtres différents. A priori, nous aurions plutôt besoin d'un filtre d'ordre élevé. De fait, nous avons eu besoin d'un filtre au fort pouvoir "lissant" au niveau des singularités. C'est pourquoi nous avons choisi le filtre de classe  $C^2$  :  $\sigma(\xi) = \frac{1}{2}(1 + \cos(\pi\xi))$

Nous appliquerons cette stratégie de régularisation dans les deux applications que nous présentons. D'une part, nous l'utilisons dans le cadre d'une équation de convection-diffusion simulée par un couplage éléments finis / méthodes spectrales : elle permet alors d'étendre alors la trace sur l'interface artificielle à un domaine périodique pour pouvoir calculer les modes de cette trace (cf. section 4.3.2). D'autre part, nous l'utilisons dans le cadre de la simulation d'un problème non convexe par méthode spectrale par collocation. Nous serons contraints d'appliquer une régularisation au second membre de l'équation (cf. section 5.3.1).

## 3.7 Conclusion

Notre méthodologie consiste à accélérer la convergence de la méthode de Neumann-Dirichlet en maillage non conforme et sans recouvrement par la technique d'Aitken. Des

problèmes linéaires 2D dont les conditions aux limites ne sont pas forcément homogènes sont résolus par cette méthode.

Nous avons vu que la méthode de Neumann-Dirichlet repose sur des conditions de transmission sur l'interface artificielle, qui à une condition de Dirichlet donnée sur l'interface associe une dérivée unique sur cette même interface. Cela permet à l'algorithme de reposer sur des conditions indispensables pour converger. Nous avons démontré par ailleurs que dans le cadre de problèmes linéaires, la convergence de cet algorithme est purement linéaire. Cela nous permet de lui appliquer l'accélération d'Aitken.

Dans le cas discret, cette technique a déjà été appliquée avec succès dans le cas d'un maillage conforme sur l'interface avec des conditions aux limites homogènes dans [19]. La technique que nous avons développé permet d'étendre l'accélération de la convergence de la méthode de Neumann-Dirichlet au maillage non conforme sur l'interface avec des conditions aux limites non homogènes. Nous comptons nous appuyer sur la projection spectrale pour que l'erreur discrète sur l'interface converge linéairement vers 0. D'autre part, nous devons prolonger la trace itérée de manière périodique afin de pouvoir calculer la décomposition discrète de Fourier de la trace. Nous obtenons une fonction prolongée périodique  $\tilde{u}$  de classe  $C^2$  avec la méthodologie que nous utilisons cf. section 3.6.3. Nous devons donc utiliser une discrétisation suffisamment fine pour compenser la faiblesse relative de la régularité de cette fonction prolongée. En contrepartie, cette procédure est facile à implémenter, de même que la procédure d'application de la technique d'Aitken. Elles peuvent aisément être introduites sous forme modulaire sans bouleversement d'un code pré-existant.

Nous allons appliquer notre méthode à la résolution d'un problème de convection-diffusion en milieu poreux avec des caractéristiques physiques hétérogènes tant au niveau de la diffusion que de la convection. Nous l'appliquerons ensuite à un problème plus théorique de résolution d'un problème non convexe par des méthodes spectrales qui requièrent a priori la condition de convexité.

Nous avons enfin remarqué que le comportement de Schwarz généralisé converge également de manière purement linéaire en cas de problèmes linéaires. Sa convergence est donc susceptible d'être accélérée par la technique d'Aitken. Cela permettrait d'avoir des sous-problèmes toujours bien posés. C'est une voie que nous n'avons pas pu explorer, faute de temps, mais qui mérite, à nos yeux, toute notre attention.





# Chapitre 4

## Application d'Aitken-Schwarz sur des domaines non conformes pour la résolution d'une EDP de convection-diffusion

### 4.1 Introduction

Dans ce chapitre nous illustrons la mise en oeuvre de la décomposition de domaines de type Aitken-Schwarz sur des maillages non conformes par les techniques décrites au chapitre précédent.

Le problème que nous traitons est celui d'une équation aux dérivées partielles de transport par diffusion ou convection. Ces deux paramètres peuvent différer suivant les domaines représentant des couches. Ce type d'équation est à la base de la construction d'opérateurs pour le transport des contaminants dans des milieux poreux. Dans la perspective du stockage des déchets, le site de stockage est enfoui dans une couche géologique relativement homogène. Cette couche homogène est elle même encadrée par des couches géologiques beaucoup plus hétérogènes pouvant contenir des inclusions rocheuses de perméabilité extrêmement faible ou des cavités modélisées par une très forte perméabilité. La nature même de ces couches, influe naturellement sur le choix du type d'approximation pour représenter la solution. D'une part, l'approximation du contaminant doit être très précise dans la couche homogène où se situe sa source de production. D'autre part, l'approximation de la couche hétérogène doit être à même de gérer les géométries non structurées. Ces contraintes conduisent naturellement à vouloir approximer la solution par des méthodes spectrales dans la couche homogène, permettant ainsi de disposer de structures de données régulières bien adaptées à la hiérarchie mémoire des architectures des processeurs modernes, et par des approximations par éléments finis dans la couche hétérogène. Les méthodes récentes d'éléments finis utilisent l'adaptation du maillage ou des polynômes d'approximation d'ordre supérieur, ce qui peut renforcer la non conformité des maillages au niveau des interfaces entre les couches. Nous sommes donc dans le cadre

d'application de la méthodologie Aitken-Schwarz décrite dans le chapitre précédent.

Les sections suivantes vont décrire les approximations éléments finis mixtes hybrides et par des polynômes de Chebychev. Chacune de ces discrétisations nous a conduit à développer des solveurs spécifiques de type décomposition de domaine avec grille grossière pour les éléments finis, et de type méthode de Krylov accélérée pour les méthodes spectrales. Nous présentons les différentes stratégies de parallélisation de ces solveurs de sous-domaine et l'impact de l'architecture de calcul sur leur performance. Enfin des résultats de performance sur l'accélération de Schwarz par la technique Aitken permettront de valider notre approche.

## 4.2 Formulation et discrétisations du modèle

Cette section s'attache à décrire la formulation mathématique du problème et notamment des termes de couplages aux interfaces entre les sous-domaines de la décomposition (N-D) que constituent les couches géologiques.

### 4.2.1 Formulation variationnelle du modèle mathématique

Nous considérons le problème elliptique suivant, modélisant le transport stationnaire avec une vitesse  $\mathcal{C}$  et la diffusion avec un opérateur de diffusion  $\mathcal{D}$  d'un contaminant  $u$ .

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\mathcal{D}\nabla u) + (\mathcal{C} \cdot \nabla)u + u &= g \text{ dans } \Omega, \\ u &= 0 \text{ sur } \Gamma_0, \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} &= g_1 \text{ sur } \Gamma_1, \end{aligned} \quad (4.1)$$

où  $\Omega$  est un domaine polygonal borné dans  $\mathbb{R}^2$ , avec la frontière  $\partial\Omega$ ,  $\Gamma_0 \subset \partial\Omega$ ,  $\Gamma_1 = \partial\Omega \setminus \Gamma_0$ ,  $g_1 \in L^2(\Gamma_1)$ ,  $g \in L^2(\Omega)$ .

Pour des raison d'existence de la solution nous considérons que  $\mathcal{D}(x)$  est un tenseur symétrique défini positif :

$$\xi^T \mathcal{D}(x) \xi \geq a_0 \xi^T \xi, \quad x \in \Omega, \xi \in \mathbb{R}^2, \quad a_0 > 0,$$

$\mathcal{C}(x)$  est une fonction vecteur bornée.

La formulation faible de (4.1) est de trouver  $u \in H_{\Gamma_0}(\Omega)$

$$(\mathcal{D}u, h) + ((\mathcal{C} \cdot \nabla)u, h) + (u, h) = (g, h) + (g_1, h)_{\Gamma_1} \quad \forall h \in H_{\Gamma_0}(\Omega) \quad (4.2)$$

où  $H_{\Gamma_0}(\Omega) = \{\phi \in L^2(\Omega) : \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), i = 1, 2, (\phi)|_{\Gamma_0} = 0\}$ ,  $(u, h) = \int_{\Omega} uh \, dx$ ,  $(g_1, h)_{\Gamma_1} =$

$$\int_{\Gamma_1} g_1 h \, ds.$$

Le problème (4.1) est reformulé sous une forme duale mixte. Dans le cas des équations de transport, elle permet de rechercher à la fois la concentration et son flux. Soit  $\sigma_1 \in (L^2(\Omega))^2$  tel que  $\nabla \cdot \sigma_1 \in L^2(\Omega)$ ,  $(\sigma_1, \nu_{\Gamma_1}) = g_1$  sur  $\Gamma_1$  et

$$V = \{v \in (L^2(\Omega))^2 : \nabla \cdot v \in L^2(\Omega), (v, \nu) = 0 \text{ sur } \Gamma_1\}, \quad W = L^2(\Omega).$$

Posons  $\sigma = \mathcal{D}\nabla u$ ,  $\sigma \in V$ . La formulation mixte s'exprime par :  
trouver la paire  $(\sigma - \sigma_1, u) \in V \times W$  :

$$\begin{aligned} (\mathcal{D}^{-1}(\sigma - \sigma_1), v) - (u, \nabla \cdot v) &= 0 \quad \forall v \in V, \\ -(\nabla \cdot (\sigma - \sigma_1), w) + (\mathcal{C}\mathcal{D}^{-1}(\sigma - \sigma_1), w) - (u, w) &= -(g, w) \quad \forall w \in W. \end{aligned} \quad (4.3)$$

La formulation (4.3) est la base pour une approximation éléments finis mixtes de (4.1).

## 4.2.2 Maillages utilisés pour les discrétisations

L'hypothèse selon laquelle le domaine de calcul est séparé en deux sous-domaines avec différentes techniques de résolution suggère l'utilisation de diverses grilles de calcul. Le sous-domaine sur lequel est localisée la solution la plus régulière est associé à une résolution spectrale et donc est couvert par une grille structurée rectangulaire. Comme la discrétisation est basée sur les polynômes de Chebychev, les points de collocation seront associés aux zéros de ces polynômes. Nous avons choisi en l'occurrence des noeuds de Gauss-Lobatto. Cela a pour conséquence un raffinement du maillage sur les frontières du domaine. Le sous-domaine sur lequel la solution est moins régulière sera couvert par un maillage triangulaire irrégulier. Nous défendons ce choix par la grande flexibilité des maillages triangulaires. Ils peuvent être raffinés localement au voisinage des particularités des solutions ; ils peuvent approximer des frontières intérieures telles des inclusions d'autres matériaux, des tunnels,... De plus, les maillages triangulaires peuvent être combinés avec une approximation simple et conservative, la méthode des éléments finis mixtes.

Nous pouvons noter que les deux maillages ne coïncident pas de part et d'autre de l'interface, comme l'indique la Figure 4.1. Ainsi, la solution discrète doit satisfaire certaines conditions de conformité sur l'interface. Nous ajoutons à cet effet une troisième grille régulière 1D, qui servira de base pour nos conditions de conformité.

## 4.2.3 Méthodes éléments finis mixtes et éléments finis mixtes hybrides

La méthode des éléments finis mixtes [54, 66] est très populaire dans le domaine des écoulements en milieu poreux. Dans un cadre hétérogène, elle permet de résoudre à la fois la charge et la vitesse d'écoulement dans le même ordre de convergence [67]. En milieu poreux, elle permet d'avoir une bonne précision pour la vitesse de Darcy que l'on introduit dans le modèle de transport de contaminants. Elle est surtout bien adaptée aux tenseurs de perméabilité très hétérogènes et très robuste face aux maillages irréguliers. Nous utilisons un espace d'approximation classique dans notre étude, l'espace de Raviart-Thomas de plus bas degré [53, 54]. La méthode des éléments finis mixtes conduit néanmoins à une matrice non symétrique définie positive pour le modèle d'écoulement en régime permanent. Une nouvelle formule a été introduite conduisant à une hybridation de la méthode [64]. Des multiplicateurs de Lagrange sont introduits, servant à imposer la continuité des flux à travers les éléments.

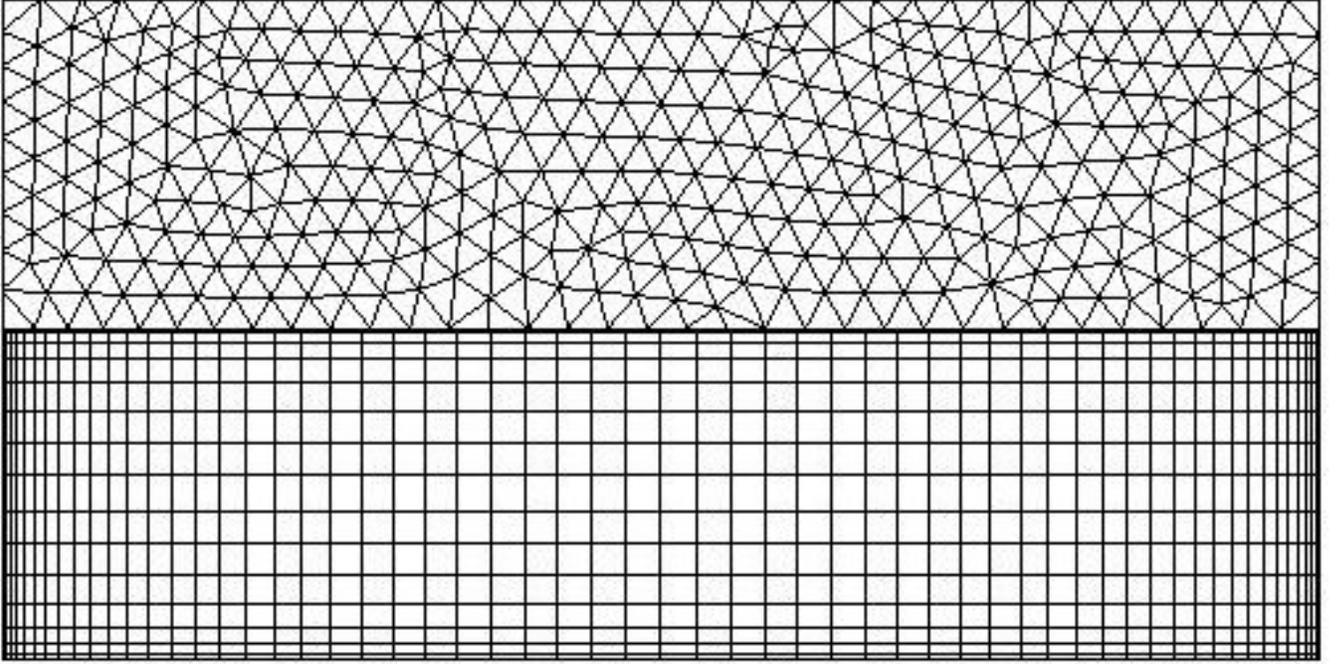


FIG. 4.1 – *Le maillage EFM non structuré et la grille ES rectangulaire.*

La méthode des éléments finis mixtes est utilisée dans les modèles de transport à la fois pour calculer la concentration, en l'occurrence des contaminants, et le flux. C'est une méthode particulièrement adaptée au cas des décompositions de domaine sans recouvrement qui nécessitent le calcul des deux quantités. Il faut noter qu'en cas de convection dominante, la partie convective peut induire des oscillations non physiques avec une approche EFMH [65]. Nous utilisons la version hybride puisque nous avons conservation du flux au moins à l'intérieur du domaine. Dans la mesure où notre décomposition est en maillage non conforme, nous ne pouvons malheureusement pas conserver cette propriété sur l'interface artificielle. En contrepartie, ne l'oublions pas, la qualité de l'approximation de la concentration dans le sous domaine contenant théoriquement la source sera meilleure grâce à l'approximation spectrale.

Soit un maillage triangulaire conforme  $\Omega^h$  de  $\Omega$ . Soit

$$V^h = \{v \in V, v|_E \in \mathcal{P}_1(E), E \in \Omega^h\}$$

et

$$W^h = \{w \in L^2(\Omega), w|_E \in \mathcal{P}_0(E), E \in \Omega^h\}$$

où  $\mathcal{P}_n(E)$  est l'espace des polynômes de degré  $n$  définis sur  $E$ . Nous approximations (4.1) par la méthode éléments finis mixtes [53] :

Trouver  $(\sigma^h - \sigma_1^h, u^h) \in V^h \times W^h$  :

$$(\mathcal{B}^h(\sigma^h - \sigma_1^h), v) - (u^h, \nabla \cdot v) = 0 \quad \forall v \in V^h, \quad (4.4)$$

$$-(\nabla \cdot (\sigma^h - \sigma_1^h), w) + (\mathcal{C}^h \mathcal{B}^h(\sigma - \sigma_1), w) - (u^h, w) = -(g, w) \quad \forall w \in W^h, \quad (4.5)$$

où  $\mathcal{B}^h = \mathcal{P}^h \mathcal{D}^{-1}$  (composant par composant),  $\mathcal{C}^h = \mathcal{P}^h \mathcal{C}$ ,  $\mathcal{P}^h$  est la projection  $L^2$  sur  $W^h$ . Les espaces  $V^h(E), W^h(E)$  sont les espaces de Raviart-Thomas de plus faible ordre définis via les restrictions de  $V^h, W^h$  sur le triangle  $E$  :

$$\begin{aligned} V^h(E) &= J_{\hat{E} \rightarrow E}(V^h(\hat{E})), \\ W^h(E) &= P_0(E), \\ V^h(\hat{E}) &= (P_0(\hat{E}))^2 \oplus ((x, y)P_0(\hat{E})). \end{aligned} \quad (4.6)$$

Ici,  $J_{\hat{E} \rightarrow E}(V^h(\hat{E}))$  est un mapping linéaire de l'espace de Raviart-Thomas. Soit  $\sigma_1^h$  l'approximation discrète  $\sigma_1$  dans  $V^h$ .

Le problème (4.4)-(4.5) est reformulé sous une forme hybride. A cette fin, on définit les espaces

$$\begin{aligned} \tilde{V}^h &= \{v \in (L^2(\Omega))^3 : v|_E \in V^h(E), \text{ pour chaque } E \in \Omega^h\}, \\ L^h &= \left\{ \mu \in L^2 \left( \bigcup_{f \in \partial\Omega^h} f \right) : \mu|_f \in V^h \cdot \nu|_f, \text{ pour chaque } f \in \partial\Omega^h \right\}. \end{aligned}$$

Ici  $\partial\Omega^h$  dénote l'ensemble de tous les bords intérieurs,  $\nu|_f$  dénote la normale unitaire à  $f$ . La forme hybride de la méthode mixte est :

Trouver le triplet  $(\sigma^h, u^h, \lambda^h) \in \tilde{V}^h \times W^h \times L^h$  :

$$(\mathcal{B}^h \sigma^h, v) - \sum_{E \in \Omega^h} [(u^h, \nabla \cdot v)_E - (\lambda^h, v \cdot \nu_E)_{\partial E \setminus \partial\Omega}] = 0 \quad \forall v \in \tilde{V}^h, \quad (4.7)$$

$$- \sum_{E \in \Omega^h} (\nabla \cdot \sigma^h - \mathcal{C}^h \mathcal{B}^h \sigma^h, w)_E - (u^h, w) = -(g, w) \quad \forall w \in W^h, \quad (4.8)$$

$$\sum_{E \in \Omega^h} (\sigma^h \cdot \nu_E, \mu)_{\partial E \setminus \partial\Omega} = (g_1, \mu) \quad \forall \mu \in L^h, \quad (4.9)$$

où  $\nu|_E$  dénote la normale unitaire extérieure au triangle  $E$ . Notons que la forme hybride ne nécessite pas  $\sigma_1^h$ .

Sous des hypothèses de régularité, l'erreur de la solution pour (4.7) satisfait l'estimation a priori suivante [53] :

$$\|u - u^h\|_W + \|\sigma - \sigma^h\|_V + \|\lambda - \lambda^h\|_L \leq ch.$$

La forme de la matrice de (4.7)-(4.9) est le système (4.10)

$$\begin{pmatrix} A & B & C \\ B_K^T & -D & O \\ C^T & O & O \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma \\ u \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} O \\ -G_F \\ G_\sigma \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

La structure bloc des matrices  $A$  et  $B_K^T A^{-1} B + D$  nous permet d'éliminer  $u$  et  $\sigma$  de (4.10) et de réduire (4.10) au système plus petit suivant

$$\left[ -C^T A^{-1} B (B_K^T A^{-1} B + D)^{-1} B_K^T A^{-1} C + C^T A^{-1} C \right] \lambda = C^T A^{-1} B (B_K^T A^{-1} B + D)^{-1} G_F - G_\sigma,$$

ou

$$M\lambda = G'. \quad (4.11)$$

La matrice  $M$  est creuse (il y a au maximum cinq valeurs non nulles par ligne). Elle est symétrique et définie positive lorsque  $C = (0, 0)^T$ . Son ordre est égal au nombre de bords dans  $\partial\Omega^h$ .

**Remarque.** Dans le cas de conditions aux limites de Dirichlet non homogènes dans (4.1),  $u = g_0$  sur  $\Gamma_0$ , le système (4.11) change son second membre  $G' := G' + MG_\lambda$ , avec

$$G_\lambda = \begin{cases} \int f g_0 ds / \int f 1 ds, & f \in \Gamma_0, \\ 0, & f \notin \Gamma_0. \end{cases}$$

#### 4.2.4 Discrétisation spectrale par des polynômes de Chebychev

Soit un rectangle  $\Xi$  représentant un milieu homogène avec un tenseur de diffusion diagonal  $\mathcal{D}$ . L'équation de diffusion avec les flux prescrits et le terme source est donné par (4.12).

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\mathcal{D}\nabla\chi) + \chi &= \xi \text{ dans } \Xi, \\ \frac{\partial\chi}{\partial\nu_{\partial\Xi}} &= \xi_1 \text{ sur } \partial\Xi, \end{aligned} \quad (4.12)$$

où  $\xi_1(x) \in L^2(\partial\Xi)$ ,  $\xi(x) \in L^2(\Xi)$ . Dans la méthode spectrale, la fonction solution  $\chi$  est approximée par une somme finie de polynômes de Chebychev :

$$\chi_N = \sum_{0 \leq i \leq N_x} \sum_{0 \leq j \leq N_y} a_{i,j} T_i(h_x^{-1}(x)) T_j(h_y^{-1}(y))$$

où  $T_i(h_x^{-1}(x)) = \cos(i \arccos(x))$  et  $T_j(h_y^{-1}(y)) = \cos(j \arccos(y))$ . Ici,  $h^{-1}(x)$  et  $h^{-1}(y)$  sont le mappings de  $x$ -  $y$ - intervalles sur  $[-1, 1]$ . Alors, l'espace discret est défini par

$$X_N = \left\{ v \mid v = \sum_{0 \leq i \leq N_x} \sum_{0 \leq j \leq N_y} a_{i,j} T_i(h_x^{-1}(x)) T_j(h_y^{-1}(y)), \forall a_{i,j} \right\}.$$

Les coefficients  $a_{i,j}$  sont obtenus par collocation de la solution aux points  $(x_i, y_j)$  définis par :

$$h_x^{-1}(x_i) = \cos\left(\frac{\pi i}{N_x}\right); \quad h_y^{-1}(y_j) = \cos\left(\frac{\pi j}{N_y}\right), \quad i = 0, \dots, N_x, \quad j = 0, \dots, N_y.$$

Les points de collocation sont les zéros des polynômes de Chebychev. Les points de collocation définissent la grille  $\Xi^h$ . La méthode spectrale de Chebychev se décrit comme suit : trouver  $\chi_N \in X_N$

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\mathcal{D}\nabla\chi_N(r)) + \chi_N(r) &= \xi(r), \quad r \in \Xi^h \setminus \partial\Xi^h, \\ \mathcal{D}\frac{\partial\chi_N(r)}{\partial\nu_{\partial\Xi}} &= \xi_1(r), \quad r \in \partial\Xi^h. \end{aligned} \quad (4.13)$$

La méthode (4.13) se réduit au système (4.14).

$$Sa = b \quad (4.14)$$

avec la matrice non singulière  $S$  qui a  $(N_x + 1)(N_y + 1)(N_x + N_y)$  valeurs non nulles.

Précisons un peu l'obtention de la matrice de différentiation de Chebychev [43]. Par souci de simplicité, nous exposons le cas 1D qui se généralise sans difficulté au cas 2D.

$\chi' = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{\chi}_k^{(1)} T_k$  où  $\hat{\chi}_k^{(-1)} = \frac{2}{c_k} \sum_{p=k+1}^{\infty} p \hat{\chi}_p$ . Les coefficients de la dérivée seconde sont :  $\hat{\chi}_k^{(2)} = \frac{1}{c_k} \sum_{p=k+2, p+k \text{ impaire}}^{\infty} p(p^2 - k^2) \hat{\chi}_p$ . La dérivée de Chebychev par collocation de  $\chi$  exprimée aux noeuds de Gauss-Lobatto est définie comme la dérivée de la série discrète de Chebychev de  $\chi$  aux mêmes noeuds :

$$D_N\chi = (I_N\chi)' \quad (4.15)$$

La dérivée de Chebychev par collocation peut aussi être représentée sous une forme matricielle aux noeuds de Gauss-Lobatto.

$$D_N\chi(x_l) = \sum_{j=0}^N (D_N)_{lj} \chi(x_j) \quad (4.16)$$

où

$$(D_N)_{lj} = \begin{cases} \frac{\bar{c}_l (-1)^{l+j}}{\bar{c}_j x_l - x_j}, & l \neq j \\ \frac{-x_j}{2(1-x-j^2)}, & 1 \leq l = j \leq N-1 \\ \frac{2N^2+1}{6}, & l = j = 0 \\ -\frac{2N^2+1}{6}, & l = j = N \end{cases} \quad (4.17)$$

Remarquons que la matrice de différentiation de Chebychev est une matrice pleine. D'autre part, le conditionnement des matrices de différentiation de Chebychev est de l'ordre  $O(N^{2p})$ , où  $p$  est l'ordre de la différentielle [44]. Cela a nécessairement des conséquences sur la résolution du système linéaire associé à cette méthode. Nous étudierons cela dans la section 4.4.2.

### 4.3 Couplage éléments finis mixtes / éléments spectraux

Soit le domaine rectangulaire  $\Xi$  et le domaine polygonal  $\Omega$  partageant l'interface commune  $\Sigma$ . Supposons que le vecteur convection soit tangentiel à l'interface, c'est à dire,

$$(\mathcal{C}(x), \nu_\Sigma) = 0,$$

où  $\nu_\Sigma$  représente la normale unitaire extérieure (pour  $\Omega$ ) à  $\Sigma$ . Alors les conditions de couplage sur l'interface fournissent la continuité de la charge et la continuité des flux diffusifs. Ces conditions ont une représentation simple lorsque l'une des formulations est la formulation éléments finis est mixte [15] :

trouver un triplet  $(\sigma - \sigma_1, u, \tilde{u}) \in V \times W \times H(\Xi)$

$$(\mathcal{D}^{-1}(\sigma - \sigma_1), v) - (u, \nabla \cdot v) - (v \cdot \nu_\Sigma, \tilde{u})_\Sigma = 0, \quad \forall v \in V, \quad (4.18)$$

$$-(\nabla \cdot (\sigma - \sigma_1), w) + (\mathcal{C}\mathcal{D}^{-1}(\sigma - \sigma_1), w) - (u, w) = -(g, w), \quad \forall w \in W, \quad (4.19)$$

$$(\mathcal{D}\tilde{u}, h)_\Xi + (\tilde{u}, h)_\Xi + (\sigma \cdot \nu_\Sigma, h)_\Sigma = (\xi, h) + (\xi_1, h)_{\partial\Xi \setminus \Sigma}, \quad \forall h \in H(\Xi) \quad (4.20)$$

Nous pouvons formuler trois remarques importantes. Premièrement, les deux formulations sont couplées via deux intégrales sur l'interface, représentant les projections  $L^2$  du flux  $\sigma$  et de la solution  $\tilde{u}$ . Deuxièmement, la nature de la projection  $L^2$  nous autorise à utiliser des discrétisations indépendantes dans les domaines  $\Omega$  et  $\Xi$  et de surcroît non conformes. Troisièmement, supposons qu'une discrétisation de (4.20) fournisse une approximation satisfaisante  $\tilde{u}$  sur les noeuds de l'interface qui soit différents des traces des deux maillages. Alors l'erreur supplémentaire introduite par cette troisième grille est attribuable uniquement à la précision de la projection  $L^2$  dans  $(v \cdot \nu_\Sigma, \tilde{u})_\Sigma$  [16].

Le problème couplé discret est obtenu en remplaçant l'espace  $V \times W$  par l'espace de Raviart-Thomas de plus faible ordre, en ré-écrivant (4.18)-(4.19) sous forme hybride, et en utilisant l'approximation spectrale de Chebychev par collocation(4.20) :

Trouver  $(\sigma^h, u^h, \lambda^h, \chi_N) \in \tilde{V}^h \times W^h \times L^h \times X_N$  :

$$(\mathcal{B}^h \sigma^h, v) - \sum_{E \in \Omega^h} [(u^h, \nabla \cdot v)_E - (\lambda^h, v \cdot \nu_E)_{\partial E \setminus \partial\Omega} + (v \cdot \nu_\Sigma, \chi_N)_{\partial E \cap \Sigma}] = 0 \quad \forall v \in \tilde{V}^h, \quad (4.21)$$

$$- \sum_{E \in \Omega^h} (\nabla \cdot \sigma^h - \mathcal{C}^h \mathcal{B}^h \sigma^h, w)_E - (u^h, w) = -(g, w) \quad \forall w \in W^h, \quad (4.22)$$

$$\sum_{E \in \Omega^h} (\sigma^h \cdot \nu_E, \mu)_{\partial E \setminus \partial\Omega} = (g_1, \mu) \quad \forall \mu \in L^h, \quad (4.23)$$

$$-\nabla \cdot (\mathcal{D}\nabla \chi_N(r)) + \chi_N(r) = \xi(r), \quad r \in \Xi^h \setminus \partial\Xi^h, \quad (4.24)$$

$$\mathcal{D} \frac{\partial \chi_N(r)}{\partial \nu_{\partial\Xi}} = \xi_1(r), \quad r \in \partial\Xi^h \setminus \Sigma, \quad (4.25)$$

$$\mathcal{D} \frac{\partial \chi_N(r)}{\partial \nu_{\partial\Xi}} = (\sigma^h \cdot \nu_\Sigma)(r), \quad r \in \partial\Xi^h \cap \Sigma \quad (4.26)$$

Il est à remarquer que du point de vu discret le problème couple une formulation variationnelle élément fini avec une formulation forte par collocation. La trace de  $\sigma^h$  doit donc être projetée sur les points la grille  $\partial\Xi^h$ .

### 4.3.1 Solution itérative des systèmes couplés EFM / ES

La solution itérative du système couplé (4.21)-(4.26) est réalisée sous la forme de l'algorithme de Neumann-Dirichlet [14] décrite au chapitre précédent. Soit  $\Sigma^h$  une grille régulière sur l'interface avec des intervalles  $e_j$  et des noeuds  $t_i$ ,  $i = 0, \dots, N_\Sigma$  et

$$\Pi^h := \{v \mid v \in C(\Sigma), v \in P_1(e_j), \forall e_j \in \Sigma^h\}.$$

La fonction sur l'interface  $\pi^h \in \Pi^h$  est associée aux valeurs sur  $\chi_N$  aux noeuds de  $\Sigma^h$ . Le processus de couplage itératif utilise la solution des problèmes découplés et une procédure de relaxation. Soit le paramètre initial  $\pi_0^h \in \Pi^h$  et le paramètre de relaxation  $\theta$ , résoudre pour  $k \geq 0$  :

1. Trouver  $(\sigma^h, u^h, \lambda^h) \in \tilde{V}^h \times W^h \times L^h$

$$\begin{aligned} (\mathcal{B}^h \sigma^h, v) - \sum_{E \in \Omega^h} [(u^h, \nabla \cdot v)_E - (\lambda^h, v \cdot \nu_E)_{\partial E \setminus \partial \Omega}] + \\ \sum_{E \in \Omega^h} [(v \cdot \nu_\Sigma, \pi_k^h)_{\partial E \cap \Sigma}] = 0 \quad \forall v \in \tilde{V}^h, \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$- \sum_{E \in \Omega^h} (\nabla \cdot \sigma^h - \mathcal{C}^h \mathcal{B}^h \sigma^h, w)_E - (u^h, w) = -(g, w) \quad \forall w \in W^h, \quad (4.28)$$

$$\sum_{E \in \Omega^h} (\sigma^h \cdot \nu_E, \mu)_{\partial E \setminus \partial \Omega} = (g_1, \mu) \quad \forall \mu \in L^h. \quad (4.29)$$

2. Trouver  $\chi_N \in X_N$

$$-\nabla \cdot (\mathcal{D} \nabla \chi_N(r)) + \chi_N(r) = \xi(r), \quad r \in \Xi^h \setminus \partial \Xi^h, \quad (4.30)$$

$$\mathcal{D} \frac{\partial \chi_N(r)}{\partial \nu_{\partial \Xi}} = \xi_1(r), \quad r \in \partial \Xi^h \setminus \Sigma, \quad (4.31)$$

$$\mathcal{D} \frac{\partial \chi_N(r)}{\partial \nu_{\partial \Xi}} = (\sigma^h \cdot \nu_\Sigma)(r), \quad r \in \partial \Xi^h \cap \Sigma. \quad (4.32)$$

3. Mettre à jour  $\pi_k$  :

$$\pi_{k+1}^h(t_i) = \theta \chi_N(t_i) + (1 - \theta) \pi_k^h(t_i), \quad i = 0, \dots, N_\Sigma. \quad (4.33)$$

La convergence des itérations de Neumann-Dirichlet est conditionnée par un choix approprié du paramètre  $\theta$ . Sa valeur dépend des bornes spectrales de l'opérateur de Steklov-Poincaré préconditionné [14]. Les bornes dépendent de la géométrie des sous-domaines, des coefficients de l'opérateur elliptique, et des discrétisations des sous-domaines. En pratique, les valeurs de  $\theta$  sont empiriques.

### 4.3.2 Solution du couplage EFM / ES par l'accélération par la technique d' Aitken

Dans certains cas, le taux de convergence de la méthode de Neumann-Dirichlet peut être détérioré en raison des valeurs faibles du paramètre de relaxation  $\theta$ . La technique de l'accélération par Aitken [19, 23], que nous avons décrite dans la section 3.4, donne un outil pour supprimer de nombreuses itérations.

La technique d'accélération par Aitken dans le cadre de notre couplage peut se présenter comme suit. Soit  $E(\pi^a)$ ,  $E(\pi^b)$ ,  $E(\pi^c)$  trois itérations successives de la solution étendue sur l'interface. Supposons ces trois fonctions nulles aux extrémités de l'intervalle. Considérons les coefficients de Fourier  $\mathcal{F}_i^a$ ,  $\mathcal{F}_i^b$ ,  $\mathcal{F}_i^c$  et  $\mathcal{F}_i$  des itérations et la solution. Chaque valeur propre de l'opérateur itératif peut être développée en modes de Fourier et la contribution de chaque valeur propre à l'erreur est contrôlée par son propre facteur coefficient  $f_i$  lié au mode  $i$  par (4.34) :

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_i^b - \mathcal{F}_i &= f_i(\mathcal{F}_i^a - \mathcal{F}_i), \\ \mathcal{F}_i^c - \mathcal{F}_i &= f_i(\mathcal{F}_i^b - \mathcal{F}_i).\end{aligned}\tag{4.34}$$

En éliminant le coefficient  $f_i$  de (4.34), nous obtenons l'expression pour  $\mathcal{F}_i$  :

$$\mathcal{F}_i = \frac{\mathcal{F}_i^a \cdot \mathcal{F}_i^c - \mathcal{F}_i^b \cdot \mathcal{F}_i^b}{\mathcal{F}_i^c - 2 \cdot \mathcal{F}_i^b + \mathcal{F}_i^a}.\tag{4.35}$$

A partir des coefficients  $F_i$ , nous obtenons une approximation de la solution étendue exacte. La restriction de notre approximation sur l'interface mène à l'approximation désirée, c'est à dire celle de la solution sur l'interface. La précision de l'approximation est conditionnée par la régularité des extensions  $E(\pi^a)$ ,  $E(\pi^b)$ ,  $E(\pi^c)$  dont la réalisation est décrite section 3.4.

Dans ce travail, nous supposons que l'itération sur l'interface est associée à une grille uniforme. Les traces de  $\Xi^h$  et  $\Omega^h$  ne sont pas uniformes. Alors l'usage d'une troisième grille est inévitable. Heureusement la technique d'approximation nous autorise à implémenter les itérations de Neumann-Dirichlet pour des vecteurs associés à une troisième grille.

## 4.4 Méthodes de résolution dans les sous-domaines

La résolution de type Neumann-Dirichlet de notre problème de convection-diffusion nécessite à chaque itération l'obtention de la solution dans chaque sous-domaine représentant une couche géologique. Il est donc essentiel de développer des solveurs associés à chacun de ces sou-domaines qui soient rapides, robustes et efficaces. Par conséquent, ils doivent être parallèles, introduisant un parallélisme de deuxième niveau par rapport à celui de premier niveau que constitue la décomposition de domaine de type

Neumann-Dirichlet. Différentes techniques de décompositions de domaines ou de partitionnement de données sont mises en oeuvre pour accélérer des méthodes de résolution de type Krylov.

#### 4.4.1 Résolution des systèmes EFM

##### GMRES préconditionnée par Schwarz additif et grille grossière

La résolution du problème dans le sous-domaine élément finis est obtenue par une méthode de décomposition de second niveau, mettant en oeuvre une méthode de Krylov de type GMRES préconditionné par une méthode de Schwarz additive elle-même accélérée par une technique de grille grossière.

Les solutions entrées dans le système (4.11) sont associées au maillage triangulaire. Le préconditionneur est fondé sur la DD-méthode à deux étapes analysée dans [51]. A la première étape, le préconditionneur additif de Schwarz conventionnel basé sur une décomposition de recouvrement minimal est appliqué. Pour mémoire, avec un tel préconditionneur, le préconditionnement dépend de la taille des sous-domaines  $H$ , ( $\sim 1/H^2$ ), de la taille du recouvrement  $\delta$  ( $\sim 1/\delta$ ) et des sauts des coefficients ( $\sim \frac{\max \mathcal{D}}{\min \mathcal{D}}$ ). Dans un second temps, nous appliquons une grille grossière fondée sur l'aggrégation dans les sous-domaines. La technique de l'aggrégation est devenue populaire dans la communauté du calcul. Une base de fonctions non régulières et grossières des sous-espaces est utilisée comme dans [38]. En revanche, le sous-espace grossier utilisé est plus riche car les fonctions de base ne sont pas triviales sur les autres sous-domaines. Le calcul du préconditionnement est plus long mais cela a pour but d'éliminer la dépendance aux sauts des coefficients.

Etant donné  $P$  processeurs, nous partitionnons les entrées du vecteur  $\lambda$  en  $P$  sous-domaines disjoints en utilisant l'algorithme de bisection inerte pour les barycentres issus du maillage. C'est équivalent à une décomposition de domaine avec recouvrement ayant l'intersection minimale de sous-domaines (un élément).

La matrice  $M$  admet une représentation bloc associée au partitionnement plus haut :

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & \dots & M_{1P} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M_{P1} & \dots & M_{PP} \end{pmatrix}.$$

Les blocs diagonaux  $M_{ii} \in \mathfrak{R}^{n_i \times n_i}$ ,  $i = 1, \dots, P$ , correspondent aux problèmes définis dans les sous-domaines ayant des conditions de Dirichlet sur les frontières intérieures. Définissons une matrice bloc diagonal par (4.36).

$$L_1 = \begin{pmatrix} M_{11}^{-1} & & \\ & \ddots & \\ & & M_{PP}^{-1} \end{pmatrix}. \quad (4.36)$$

La matrice  $L_1$  est le préconditionneur de Schwarz additif pour  $M$  avec le recouvrement minimal de sous-domaines. C'est un préconditionneur très simple pour  $M$  qui peut être très facilement parallélisé. Cependant, son efficacité est affectée par l'hétérogénéité de ses coefficients, le nombre de sous-domaines de  $P$  et l'épaisseur relative du recouvrement. Pour diminuer l'effet du recouvrement et supprimer la dépendance du nombre de sous-domaines et des hétérogénéités, nous appliquons une étape de correction. Le double préconditionneur  $L$  est implicitement décrit par son action sur un vecteur  $\lambda \in \mathfrak{R}^{n_\lambda}$ . Posons  $\nu = L\lambda$ , nous avons

$$\begin{aligned}\xi &= L_1\lambda, \\ \rho &= (\lambda - M\xi), \quad \nu = \xi + \tilde{L}_2\rho,\end{aligned}\tag{4.37}$$

où  $\tilde{L}_2$  est décrit plus bas. Formellement,  $L$  se présente comme suit :

$$L = L_1 + \tilde{L}_2(I - ML_1).\tag{4.38}$$

Soit le nombre de lignes non triviales de la matrice  $M_i = [M_{i1}, \dots, M_{i,i-1}, M_{i,i+1}, \dots, M_{i,P}]$  (sans le bloc diagonal)  $\tilde{n}_i$ . Définissons

$$\tilde{n}_\lambda = \sum_{i=1}^P \tilde{n}_i + P$$

et supposons que les lignes de la matrice  $M$  sont ordonnées de telle sorte que dans chaque  $M_i$  les lignes triviales partent en premier. Alors la matrice agrégée locale  $T_{ii} \in \mathfrak{R}^{n_i \times (\tilde{n}_i + 1)}$  est donnée par

$$T_{ii} = \begin{pmatrix} I_i & 0 \\ 0 & e_i \end{pmatrix}, \quad e_i = (1, \dots, 1)^t \in \mathfrak{R}^{n_i - \tilde{n}_i},$$

où  $I_i$  est la matrice identité. Nous définissons la matrice bloc diagonale globale  $T$  par

$$T = \begin{pmatrix} T_{11} & & \\ & \ddots & \\ & & T_{PP} \end{pmatrix},$$

et la matrice agrégée  $\tilde{M}$  par

$$\tilde{M} = T^t M T, \quad \tilde{M} \in \mathfrak{R}^{\tilde{n}_\lambda \times \tilde{n}_\lambda}.$$

Le solveur maillage grossier  $\tilde{L}_2$  est défini implicitement par

$$\tilde{L}_2 = T \tilde{M}^{-1} T^t.\tag{4.39}$$

Sa construction pourrait être motivée ainsi. Le préconditionneur  $L_1$  fondé sur Schwarz additif contrôle l'erreur localement dans les sous-domaines mais ne permet pas de contrôler la propagation de l'erreur à l'échelle globale (nombre de sous-domaines). Il ne coordonne

pas non plus l'erreur entre sous-domaines voisins (dépendance sur la taille du maillage et sur les hétérogénéités). L'inversion de la matrice agrégée coordonne la moyenne des valeurs des sous-domaines et fait correspondre les erreurs locales dans les bandes de recouvrement. La robustesse du préconditionneur en fonction du nombre de sous-domaines et de l'hétérogénéité des coefficients de diffusion, décrite par le théorème 4.4.1 est montrée dans [51].

**Théorème 4.4.1** *Soit  $\Omega_h$  une triangulation de  $\Omega$  qui est partitionnée en  $m$  sous-domaines  $\Omega_i$  dont les bords sont réguliers avec l'épaisseur de recouvrement minimal  $\delta$ , de diamètre  $H$  et qui est quasi-uniforme dans la région recouverte étendue par une couche "cell". Soit le coefficient de diffusion  $\mathcal{D}$  homogène en dehors de la région de recouvrement :  $\mathcal{D}_{1,i} \leq \mathcal{D} \leq \mathcal{D}_{2,i}$ ,  $x \in \Omega$ . Soit les préconditionneurs  $L_1$  et  $\tilde{L}_2$  respectivement de  $M_{ii}$   $i = 1, \dots, m$  et  $M$  avec des constantes d'équivalence  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$ . Alors, nous avons l'estimation suivante :*

$$\text{cond}(LM) \leq 2 \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \left( 1 + 2C \max_{1 \leq i \leq m} \left( \frac{\mathcal{D}_{1,i} H}{\mathcal{D}_{2,i} \delta} \right) \right) \quad (4.40)$$

### Implémentation parallèle du solveur EFM

L'approche décomposition de domaine pour la solution des systèmes EFM est fondée sur une technique simple de partitionnement de maillage non structuré, l'algorithme de bisection inertie [17, 18]. Etant donné un maillage avec  $N_{tr}$  triangles, nous associons à chaque triangle une masse localisée en son barycentre  $(x^k, y^k)$  et définissant les composants du tenseur d'inertie  $IT$  par

$$IT_{11} = \sum_{k=1}^{N_{tr}} (y^k - \bar{y})^2, \quad IT_{22} = \sum_{k=1}^{N_{tr}} (x^k - \bar{x})^2, \quad IT_{12} = - \sum_{k=1}^{N_{tr}} (y^k - \bar{y})(x^k - \bar{x})$$

où

$$\bar{x} = \sum_{k=1}^{N_{tr}} x^k / N_{tr}, \quad \bar{y} = \sum_{k=1}^{N_{tr}} y^k / N_{tr}.$$

L'axe de partitionnement est calculé comme un vecteur propre  $\vec{v}$  associé à la plus petite valeur propre  $IT$ , c'est à dire, la principale direction avec le plus petit moment d'inertie. Alors les triangles sont colorés comme suit :

1. Trier les points dans l'ordre croissant des projections des barycentres sur  $\vec{v}$ .
2. Définir le pas de masse  $\Delta m = N_{tr} / P$ .
3. Colorer le point selon la partie entière  $\lfloor \frac{k}{\Delta m} \rfloor$  de  $\frac{k}{\Delta m}$ .

Ce partitionnement définit une décomposition de domaine sans recouvrement avec les degrés de liberté de l'interface partagés sur deux processeurs selon les couleurs attribuées. De plus, grâce à l'astucieuse décomposition en bandes, les sous-domaines peuvent n'avoir comme interface commune que deux sous-domaines voisins.

L'implémentation parallèle de la technique itérative GMRES demande trois opérations parallèles : calcul du produit scalaire, multiplication matrice-vecteur et multiplication

préconditionneur-vecteur. Comme le nombre de noeuds de l'interface participant au produit matrice-vecteur est faible comparé à la taille de  $M_{ii}$ , le nombre de communications inter-processeurs est faible.

Le preconditionneur incorpore trois produits matrices-vecteurs avec les matrices  $L_1$ ,  $M$  et  $\tilde{L}_2$ . La matrice  $L_1$  est bloc-diagonale. Ainsi, chaque processeur devrait avoir son propre bloc de  $L_1$ . A cette fin, dans l'évaluation du preconditionneur, nous associons à chaque processeur ses noeuds interface à droite. Après  $L_1$  évaluations, chaque processeur recouvre les inconnues sur son interface gauche via une communication locale avec son voisin gauche. La matrice  $\tilde{L}_2$  est le résultat de la factorisation de la matrice agrégée. La matrice agrégée est générée au départ avec une procédure à deux étapes. Premièrement, le processeur de rang  $i$  calcule la matrice agrégée  $T_i$  et le  $(\tilde{n}_i + 1) \times \tilde{n}$  bloc ligne de  $\tilde{M}$  correspondant au  $i$ -ème sous-maillage. Le dernier n'est pas large et pourrait être assemblé sur n'importe quel processeur pour former la matrice globale  $\tilde{M}$ . La matrice  $\tilde{M}$  est creuse sauf  $P$  lignes qui ont beaucoup de valeurs non nulles. Ainsi, elle peut réellement être factorisée. L'évaluation de  $L_2$  demande l'agrégation des résidus calculés localement, leur réunion, et la résolution du système en espace grossier factorisé. La seule procédure parallèle est de réunir localement les vecteurs agrégés. Leur longueur est le nombre de degrés de liberté sur les interfaces locales plus une. Ainsi, ils peuvent être accumulés sur n'importe quel processeur.

## 4.4.2 Résolution des systèmes ES

### Méthode RCG accélérée par des techniques de projection

La résolution du problème dans le sous-domaine élément spectral est obtenue par une méthode de partitionnement de données de second niveau, mettant en oeuvre une méthode de Krylov de type GCR preconditionnée par une matrice bloc diagonal, et accélérée par une technique de projection. Dans cette section nous décrivons ces techniques et montrons qu'elles sont bien adaptées à une architecture de calcul à mémoire partagée sur un nombre faible de processeurs.

La discrétisation de l'opérateur spectral (ie. les dérivées de la solution développée dans la base formée des polynômes de Chebychev [43]) conduit à la matrice dont la structure est illustrée dans la Figure 4.2. Les blocs diagonaux correspondent à la contribution de l'opérateur dans la direction  $x$ . Les blocs extra-diagonaux correspondent à la distribution de la contribution de l'opérateur dans la direction  $y$ . La matrice  $S$  de la méthode spectrale n'est pas complètement dense : chaque ligne contient au plus  $N_x + N_y$  valeurs non nulles. La taille typique de la matrice est de quelques milliers alors que  $N_x + N_y \sim 100$ . Ainsi, la matrice  $S$  n'est ni dense, ni creuse.

Nous avons utilisé soit une approche directe pour inverser cette matrice en séquentiel, soit une approche itérative via un solveur de Krylov pour une résolution en parallèle.

Nous avons testé deux approches opposées pour la décomposition LU, en la considérant comme une matrice creuse ou dense. Dans ce dernier cas, la boîte à outils de factorisation

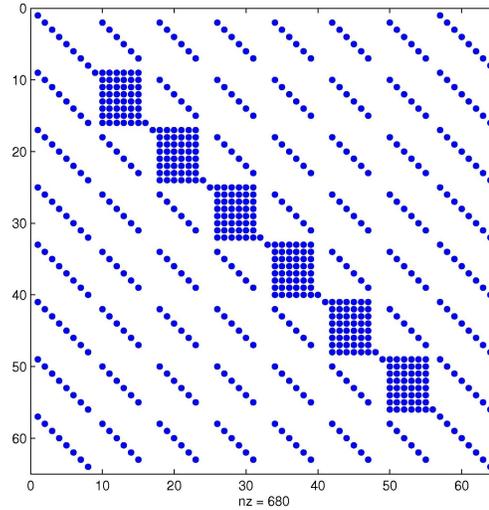


FIG. 4.2 – Structure de la matrice  $\Sigma$  spectrale

de LAPACK DGETRF a été utilisée. La méthode multifrontale non symétrique [49, 50] factorise la matrice  $S$  en la considérant comme creuse. Les tests comparatifs montrent que dans des cas typiques, la place en mémoire exigée est équivalente pour les deux packages tandis qu'il existe un facteur 2 entre le temps de factorisation par DGETRF et la factorisation multifrontale, cette dernière étant plus rapide. En effet, pour  $N_x = 100$ ,  $N_y = 25$  les temps de factorisation sont respectivement de 48 et 25 secondes, tandis que pour  $N_x = 120$  et  $N_y = 30$ , ils sont de 144 et 76 secondes. D'autre part, la factorisation est réalisée une fois pour toutes. Toutefois leurs coûts ne sont pas critiques pour le programme. De plus, la parallélisation multifrontale est problématique tandis que la factorisation par LAPACK de matrices dense accepte une implémentation parallèle. La matrice du problème ES n'est ni dense, ni totalement creuse, le problème principal de la parallélisation des méthodes multifrontales réside classiquement dans la gestion de la mémoire. Malgré tout, nous tenons à signaler que des stratégies ont dernièrement été développées pour résoudre les problèmes de gestion de mémoire [98]. Elles mériteraient d'être étudiées, mais, faute de temps, nous ne les avons pas envisagées.

Dans notre implémentation séquentielle, nous considérons la matrice spectrale comme dense et la librairie LAPACK est utilisée tant pour la factorisation que pour le calcul des solutions afférentes des systèmes ES.

### Implémentation parallèle du solveur ES

Comme la matrice du problème ES n'est ni dense, ni totalement creuse, un solveur itératif de Krylov a été préféré à l'utilisation du package Scalapack. Nous avons eu deux approches en ce qui concerne le préconditionnement et la parallélisation de cette matrice.

Nous avons utilisé un préconditionnement soit par la technique ILUT, soit en utilisant la structure spécifique de cette matrice, cf. Figure 4.2. Dans le premier cas, nous utilisons la librairie HYPRE (cf. [93]) qui propose une version de l’algorithme GMRES avec préconditionnement par PILUT (c’est à dire une version parallèle de ILUT) [62, 60]. Dans le second cas, nous parallélisons en utilisant à nouveau la structure de la matrice qui nous conduit à partitionner la matrice selon les colonnes.

## Préconditionnement par PILUT

Nous allons utiliser la version parallèle *PILUT* de ce préconditionneur, fondée sur la technique proposée par M. Karypis et M. Kumar dans [59] avec quelques modifications (cf. [62]). Rappelons d’abord brièvement ce qu’est une factorisation ”incomplète”. Soit le système originel  $Ax = b$ . Un préconditionneur  $M$  est tel que le système  $M^{-1}Ax = M^{-1}b$  ait la même solution, mais que les propriétés spectrales de la matrice  $M^{-1}A$  soient plus favorables à la convergence de la méthode itérative qui résout le système. Une factorisation est dite incomplète si certains éléments sont ignorés durant la factorisation. Dans un tel cas,  $M$  s’écrit sous la forme :  $M = LU$  où  $L$  et  $U$  sont respectivement des matrices triangulaires inférieures et supérieures. Ces factorisations incomplètes utilisent un ensemble  $S_1$  de matrices dont on supprime toutes les valeurs nulles au cours de la factorisation. Dans le cas de ILUT, cet ensemble est déterminé de manière dynamique au cours de la factorisation. Par ligne, l’algorithme *ILUT*( $m, t$ ) rejette tout élément dont l’amplitude est inférieure au seuil  $t$  et stocke les  $m$  plus grands éléments dans  $L$  et dans  $U$  parmi les éléments non nuls. De plus, les éléments diagonaux sont toujours stockés.

La version parallèle de *ILUT* est destinée aux ordinateurs à mémoire distribuée. Tout d’abord, *PILUT* utilise un algorithme de partitionnement de manière à obtenir une décomposition de domaine selon les processeurs. Chaque processeur calcule une factorisation des noeuds intérieurs de type *ILUT*. Dans un deuxième temps, des ensembles indépendants sont calculés de manière itérative jusqu’à ce que tous les noeuds aux interfaces soient factorisés.

## Parallélisation de la résolution par GMRES du solveur ES via la librairie HYPRE

Nous avons testé notre algorithme sur une machine Intel686 possédant 8 noeuds bi-processeurs. Chaque noeud a une mémoire de 512 Mo sauf un qui a une mémoire 1Go. Nous avons utilisé la librairie HYPRE (cf. [93]) qui propose une version de l’algorithme GMRES avec préconditionnement par PILUT (cf. [62]). Nous utilisons simplement le stockage algébrique qui permet de stocker uniquement les éléments non nuls. Le partitionnement de la matrice selon les processeurs s’effectue horizontalement. Soit  $n_x$  le nombre maximal d’éléments non nuls sur une ligne. Nous avons d’abord effectué un réglage des paramètres pour obtenir la convergence de la méthode. Ces paramètres sont le seuils de tolérance  $t$  du préconditionneur PILUT, la taille  $mG$  des blocs factorisés de

*ILUT*, le nombre  $d$  de directions de descente retenues pour GMRES.

Pour économiser la mémoire, il faut déterminer les plus petites tailles possibles pour obtenir des sous-blocs inversibles. Etant donné la structure de notre matrice et le stockage par bandes, nous allons chercher  $mG$  sous la forme  $mG = i * n_x$ . Comme nous voulons inverser une matrice de taille assez élevée, (la précision des méthodes spectrales dépend de la discrétisation, et l'accélération par la technique d'Aitken requiert une précision suffisante à l'interface), nous choisissons une matrice de taille  $3136 \times 3136$ . La table 4.1 indique un nombre minimal de directions  $d$  de descente à retenir pour GMRES pour pouvoir converger.

d	cv. GMRES	it. GMRES
$0.5*n_x$	0.9913	500
$n_x$	0.9531	500
$1.5n_x$	0.0502	500
$2n_x$	7e-9	192

TAB. 4.1 – Influence du nombre de directions de descente de GMRES pour converger

Nous devons donc retenir un nombre de directions de descente assez élevé pour espérer voir notre algorithme converger. Le nombre d'itérations pour obtenir la convergence de la méthode GMRES est élevé. C'est pourquoi nous allons appliquer la technique du *restart* à GMRES. Elle consiste simplement à redémarrer GMRES (cf. [61]) après quelques itérations en l'initialisant avec la dernière valeur obtenue. Cela permet d'effacer toutes les informations stockées jusque là pour calculer la base orthogonale. Après quelques tests, nous avons choisi de redémarrer GMRES au maximum 5 fois au bout de 10 itérations

En pratique, le paramètre le plus sensible pour la parallélisation s'est avéré la taille des sous-blocs factorisés dans PILUT. Nous avons testé ce paramètre sur une matrice de taille  $4096 \times 4096$ . Les résultats sont consignés dans la table 4.2. Pour une taille inférieure au double du nombre d'éléments non nuls sur une ligne, *PILUT* a provoqué l'arrêt du code ou la non-convergence (dans le cas de deux processeurs). Cela va malheureusement avoir un coût élevé en terme de mémoire [59].

m	Temps d'exécution (s)		
	2 proc.	4 proc.	8 proc.
$n_x$	–	–	–
$1.5n_x$	17.3779	23.4001	–
$2n_x$	45.4288	16.5791	13.3482
$2.5n_x$	26.0766	21.0739	16.6728

TAB. 4.2 – Temps d'exécution pour résoudre un système linéaire de matrice de la forme représentée en Figure 4.2 en fonction de la taille des sous-blocs factorisés par PILUT

t	cv. GMRES	temps d'exécution (s)
1e-6	0.9927	–
1e-8	0.9886	–
1.e-10	5e-9	16.43
1e-12	9e-9	31.34

TAB. 4.3 – Influence du seuil de tolérance de PILUT sur la convergence de GMRES

Comme on le voit dans la table 4.3, aucun élément non nul ne doit être négligé dans la ligne pour que le préconditionneur PILUT puisse être efficace.

Nous avons testé GMRES conditionné par  $\text{PILUT}(m,t)$ ,  $m = 2 * n_x$ ,  $t = 1e - 10$ , avec des blocs à inverser pour GMRES de taille  $2 * n_x$  et un seuil de tolérance pour GMRES de  $1e-8$ .

Les temps d'exécution en fonction de la taille de la matrice sont représentés sur la table 4.4. Ces résultats montrent naturellement que cette technique de résolution ne peut être envisagée que pour des matrices de taille élevée. Pour la matrice  $S$ , les résultats en terme d'efficacité ne commencent à être intéressants que pour une matrice de taille  $4096 \times 4096$ . Quant à la scalabilité, les résultats sont mauvais. Cela s'explique en partie par le fait que le conditionnement des matrices de différentiation spectrale dépend quadratiquement du nombre de points de collocation.

Nous avons développé une méthode alternative qui tient compte de la structure de la matrice de différentiation spectrale et qui nous le voyons dans la section 4.5.2, donne de bien meilleurs résultats en termes de temps de calcul et de résultats parallèles.

taille de la matrice	Temps d'exécution (s)		
	2 proc.	4 proc.	8 proc.
256	0.0799	0.7592	0.5161
512	0.2233	0.2081	0.3131
1024	1.3306	1.2351	0.9667
2048	8.1739	6.3333	5.2793
3136	13.7550	9.9978	7.5724
4096	47.2128	16.6212	12.2818

TAB. 4.4 – Temps d'exécution pour résoudre un système linéaire de matrice de la forme (4.2) avec préconditionnement par PILUT

## Préconditionnement et parallélisation tenant compte de la structure de la matrice

Nous résolvons le système d'équations par une méthode itérative de Krylov, qui traditionnellement, est utilisée avec l'adjonction du preconditionnement de la matrice en raison de la sensibilité de ce type de méthode au conditionnement des matrices. Dans le cadre de notre décomposition de domaine, nous sommes amenés à résoudre itérativement le même problème avec des seconds membres différents. Nous utilisons une méthode de Krylov, en l'occurrence une méthode GCR [55], pour résoudre notre sous-problème. Nous aimerions tirer partie du fait que les solutions de ce sous-système sont de plus en plus proches au fur et à mesure des itérations (si la méthode de décomposition de domaine converge). L'idée d'utiliser les informations des précédentes résolutions n'est pas nouvelle. Soit le système linéaire  $Ax = b$  à résoudre. Notons respectivement par  $b^n$  et  $x^n$  les seconds membres et les solutions itératives obtenues par la méthode de Krylov considérée. Il est possible par exemple d'éliminer les composantes du second membre à l'itération (N-D)  $n$ , dont les solutions sont déjà connues en projetant  $b^n$  dans l'espace  $\text{span}\{b^{n-1}, \dots, b^{n-l}\}$  où  $l$  est un entier tel que  $1 \leq l \leq n$ . Il reste à résoudre le problème correspondant à la composante de  $b^n$  orthogonale à  $\text{span}\{b^{n-1}, \dots, b^{n-l}\}$  [84]. Une autre grande famille de projections, lorsque l'espace de Krylov est utilisé comme espace de projection, consiste à générer  $x^0$  dans la base de Krylov lors de l'itération de (N-D) précédente en projetant le second membre du problème dans l'espace de Krylov généré précédemment. Pour des systèmes linéaires avec une matrice symétrique définie positive et une série de seconds membres, nous pouvons nous référer à [85, 86]. Cette technique a également été développée dans [56] dans un cadre de calcul parallèle. Une autre famille d'accélération de la convergence des méthodes de Krylov est constituée par les méthodes de déflation. Soit la matrice de projection  $P$  définie par :

$$P = I - AZ(Z^T AZ)^{-1}Z^T, \quad Z \in \mathbb{R}^{n \times m} \quad (4.41)$$

où  $Z$  est le sous-espace de déflation, c'est à dire l'espace projeté du résidu. Posons  $\tilde{u} = P^T u$ , on peut résoudre le système suivant :

$$PA\tilde{u} = Pb \quad (4.42)$$

L'intérêt réside dans le fait que les valeurs propres relatives au sous-espace sont supprimées, laissant intact le reste du spectre [99]. Dans le cas de systèmes non symétriques, une approximation des vecteurs propres peut être extraite de la base de Krylov produite par GMRES. Dans [100], la convergence est ainsi accélérée après un restart. Dans ce cas, la déflation n'est pas appliquée comme un preconditionneur, mais les vecteurs de déflations sont enrichis par le sous-espace de Krylov et les propriétés de minimisation de GMRES assure que le sous-espace de déflation est projeté en dessous du résidu.

Pour mémoire, la matrice a la structure représentée en Figure 4.2. Considérant une approche itérative en terme de résolution, la matrice est stockée sous une forme compacte

avec deux ensembles de matrices agissant chacun dans une direction avec respectivement  $(N_y + 1)$  blocs de taille  $(N_x + 1)^2$  et  $(N_x + 1)$  blocs de taille  $(N_y + 1)^2$ . Les propriétés du bloc diagonal conduisent à un préconditionnement par la multiplication des blocs diagonaux pleins par leurs inverses. Par exemple, le conditionnement d'une telle matrice de taille  $3136 \times 3136$  décroît de  $10^6$  à 17.

Nous utilisons la méthode GCR pour résoudre le problème linéaire lors de la première itération de Schwarz. Alors la base de Krylov générée lors de cette itération de Schwarz est stockée et les itérations dans ce sous domaine sont obtenues par projection sur la base de Krylov lors des itérations suivantes. En plus des vecteurs de Krylov,  $\mathcal{K} = \{p_j\}_{j=0}^{j_0}$  qui sont  $S^T S$ -orthogonaux, des données supplémentaires sont nécessaires, les vecteurs  $\{Sp_j\}_{j=0}^{j_0}$ . Dans la mesure où la projection de la solution  $x = S^{-1}b$  sur  $\mathcal{K}$  est

$$\hat{x} = \sum_{j=0}^k \frac{(b, Sp_j)}{(Sp_j, Sp_j)} p_j \quad (4.43)$$

le résidu modifié de la méthode (GCR) devient

1. Si  $\mathcal{K} = \emptyset$  alors poser  $j_0 = -1$  Calculer  $r_0 = b$  Poser  $p_0 = r_0$ ,  $\mathcal{K} = \{p_0\}$

SINON poser  $j_0 = \text{cardinal}(\mathcal{K})$ , et  $x_0 = \sum_{j=0}^{j_0} \frac{(b, Sp_j)}{(Sp_j, Sp_j)} p_j$  FinSi

2. Pour  $j = j_0 + 1, \dots$ , jusqu'à convergence, Répéter :

3.  $\alpha_j = \frac{(r_j, Sp_j)}{(Sp_j, Sp_j)}$

4.  $x_{j+1} = x_j + \alpha_j p_j$

5.  $r_{j+1} = r_j - \alpha_j Sp_j$

6. Calculer  $\beta_{ij} = -\frac{(Sr_{j+1}, Sp_i)}{(Sp_i, Sp_i)}$ , pour  $i = 0, 1, \dots, j$

7.

$$p_{j+1} = r_{j+1} + \sum_{i=0}^j \beta_{ij} p_i, \mathcal{K} = \mathcal{K} \cup \{p_{j+1}\} \quad (4.44)$$

8. FinPour

La distribution des données entre  $P$  processeurs se définit comme suit : chaque processeur prend en charge  $m = (N_y + 1) \times ((N_x + 1)/P)$  composantes de la solution et les parties associées de l'opérateur dans chaque direction, l'indice de la direction  $y$  variant en premier. Les deux ensembles locaux d'opérateurs sont stockés sous le format suivant `S%OPERAX(0 :Nx,0 :Ny,0 :m-1)`, `S%OPERAY(0 :Ny,0 :Ny,0 :m-1)`. La contribution au produit matrice-vecteur dans la direction  $y$  ne nécessite aucune communication. Chaque processeur calcule la contribution colonne dans la direction  $x$  correspondant à l'indice du composant qu'il prend en charge. Alors chacune des  $P$  contributions au résultat est envoyée au processeur qui s'occupe des indices des composants associés.

Ainsi, chaque processeur envoie et reçoit  $(P - 1) \times m$  données en double précisions. Le préconditionnement par l'inverse des blocs diagonaux ne nécessite aucune communication. La projection nécessite seulement la fonction `MPI_ALL_REDUCE` pour rassembler les produits scalaires partiels de taille  $j_0$ .

## 4.5 Résultats numériques et parallèles

Les expériences numériques présentées ci-dessous ont été réalisées avec deux machines différentes. La première, la machine A, est un cluster de 6 noeuds avec des processeurs AMD BiAthlon 1600+ MP, un cache L2 de 256KB, 1GB de RAM par noeud, et une bande passante de 100Mb/s comme communication interne Ethernet network. La seconde, une machine B, est un cluster Compaq Sierra de 4 quadri-processeurs avec des processeurs alpha ev67/600Mhz ayant chacun un cache L2 de 8MB et 2GB de RAM par quadri-processeur. La communication interne a une bande passante de 800Mb/s.

### 4.5.1 Résultats Numériques

Plusieurs tests ont été réalisés pour valider et vérifier l'implémentation de notre solveur numérique. Le premier test utilise la technique des solutions manufacturées comme préconisé dans [63, 68]. Le deuxième et troisième tests permettent d'évaluer la robustesse de la présente méthodologies par rapport à l'hétérogénéité des paramètres de diffusion et de convection intervenant dans les opérateurs.

#### Equation de Helmholtz dont la solution est manufacturée

Soit le domaine rectangulaire  $\Pi = \Omega \cup \Sigma \cup \Xi$ ,  $\Omega = (0, 1) \times (0.25, 0.5)$ ,  $\Xi = (0, 1) \times (0, 0.25)$  et le problème suivant

$$\begin{aligned} -\Delta u + u &= g \quad \text{dans } \Pi, \\ \frac{\partial u}{\partial \nu_{\Gamma_1}} &= g_1 \quad \text{sur } \partial \Pi, \end{aligned} \tag{4.45}$$

ayant la solution régulière  $u(x, y) = (x + 3x^2 + 4x^3)(3y + 7y^2 + 7y^3)$  décrite en Figure 4.3.

Dans la Table 4.5.1, nous présentons les résultats d'un calcul sur quatre processeurs des itérations de Neumann-Dirichlet avec un critère d'arrêt de  $10^{-4}$ , où les problèmes EFM sont résolus sur quatre processeurs avec une réduction du résidu initial de facteur  $10^6$ . Dans ce cas, les problèmes ES sont résolus sur chaque processeur individuellement. Quelques conclusions peuvent être faites à partir des tables. L'erreur d'approximation pour la solution et le flux est proportionnel à  $h_M^2$  et  $h_M$ , respectivement. Le nombre d'itérations du couplage ne dépend pas de la taille du maillage. L'initialisation et le nombre de solutions (par itération GMRES) du solveur EFM sont proportionnels aux nombres de degré de liberté,  $n_\lambda$ . Le nombre d'itérations de GMRES est proportionnel à  $h_M^{-0.5}$  ce qui est en accord avec les analyses et les expériences présentées dans [51]. Dans ce

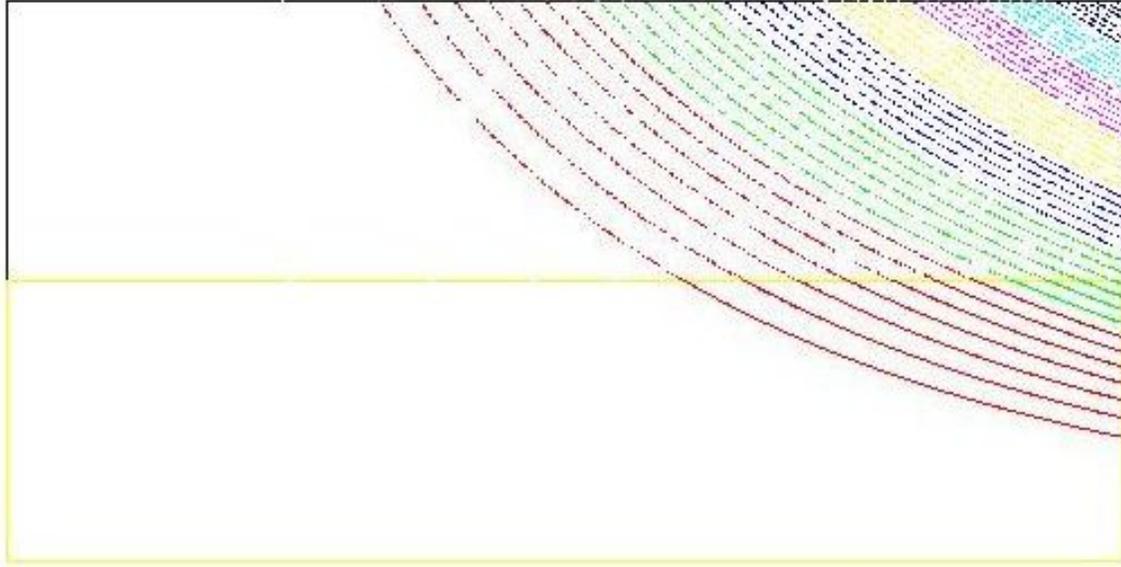


FIG. 4.3 – *La solution calculée du problème dont la solution analytique est  $u : (x, y) \rightarrow (x + 3x^2 + 4x^3)(3y + 7y^2 + 7y^3)$*

test, la résolution du solveur ES est effectuée de manière directe, par la méthode LU, de manière séquentielle. La complexité arithmétique du solveur ES est loin d'être optimale : le nombre d'inconnues croît quatre fois tandis que le temps de factorisation augmente 120 fois et le temps de résolution augmente 14 fois.

data \ $h_M : N_x : N_y$	0.02 :25 :6	0.01 :50 :12	0.005 :100 :25
$n_\lambda$	2439	9455	37979
$n_S$	150	600	2500
$\ \lambda - \lambda^h\ _{L^\infty}$	0.1	0.017	0.005
$\ u - u^h\ _{L^\infty}$	0.1	0.016	0.005
$\ \sigma - \sigma^h\ _{L^\infty}$	0.45	0.26	0.13
$\ \chi - \chi_N\ _{L^\infty}$	0.1	0.017	0.005
#ND	14	14	14
$t_{EFM_{INIT}}$	0.02	0.04	0.25
$t_{EFM_{SOL}}$	0.04	0.19	1.2
#GMRES	18	24	34
$t_{EFM_{SOL}}/\#GMRES$	0.002	0.008	0.035
$t_{ES_{INIT}}$	0.02	0.9	113
$t_{ES_{SOL}}$	0.01	0.14	2.0

TAB. 4.5 – Calcul sur quatre processeurs : divers temps de calcul et précision des approximations.

### La robustesse du solveur EFM vis à vis des coefficients hétérogènes de l'équation convection-diffusion

Les deux test suivants montrent la robustesse du solveur EFM vis à vis des sauts de la diffusion  $\mathcal{D}$  et du champ de convection. Les tests sont effectués pour les problèmes complets avec l'algorithme de Dirichlet qui lie les deux domaines.

Considérons la convection-diffusion telle que le champ de convection  $\mathcal{C}$  est non nul et les coefficients de diffusion sont hétérogènes isotropes  $\mathcal{D}$  dans  $\Omega$ . Dans  $\Xi$ , l'opérateur se réduit à l'opérateur de Helmholtz  $-\Delta + I$  :

$$\begin{aligned}
-\nabla \cdot (\mathcal{D}\nabla u) + (\mathcal{C} \cdot \nabla)u + u &= g \text{ in } \Pi = \Omega \cup \Sigma \cup \Xi, \\
\frac{\partial u}{\partial \nu_{\Gamma_1}} &= g_1 \text{ on } \partial\Pi.
\end{aligned} \tag{4.46}$$

Le domaine  $\Omega$  contient un trou (représenté en blanc sur la figure 4.4) et deux inclusions (représentées en rose sur la figure 4.4) d'un autre matériau, par exemple des rochers dans du sable, où le tenseur de diffusion  $\mathcal{D} = aI$  est beaucoup plus important que  $\mathcal{D} = I$  dans le reste du domaine. Le maillage est quasi-uniforme ( $h = 0.005$ ) avec 25038 triangles et partitionné en 4 sous-domaines ne se recouvrant pas, (voir la Figure 4.4). Pour l'approximation ES, nous posons  $N_x = 100$  et  $N_y = 25$ . L'ordre de la matrice  $M$  est 38001 et l'ordre de la matrice agrégée  $\tilde{M}$  est 448. Dans la Table 4.6, nous présentons le nombre d'itérations de GMRES par itération ND nécessaires pour réduire le résidu initial d'un facteur  $10^6$  aussi bien que leur temps d'exécution sur 4 processeurs. Le champ de convection dans  $\Omega$  est  $\mathcal{C} = (-100, 0)^t$ . Le nombre d'itérations et le temps de résolution est indépendant des coefficients de diffusion hétérogène bien que l'interface artificielle entre les sous-domaines touche et croise les interfaces de saut.

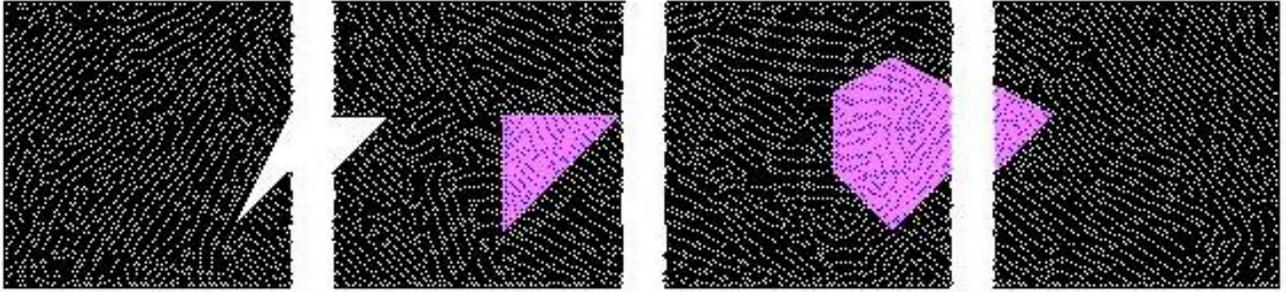


FIG. 4.4 – Partition du sous-domaine avec deux inclusions et un trou en 4 sous-domaines.

TAB. 4.6 – 4 processeurs sur ordinateur A : robustesse du solveur EFM en fonction des coefficients de diffusion hétérogènes ( données par itération ND).

data \ a	1	10	100	10000
$t_{MFE_{SOL}}$	1.49	1.2	1.24	1.24
#GMRES	31	35	36	36

Nous considérons le problème (4.46) dans un autre domaine  $\Pi = \Omega \cup \Sigma \cup \Xi$ , avec  $\Omega = (0, 1) \times (0.9, 1)$  et  $\Xi = (0, 1) \times (0, 0.9)$ . Le maillage quasi-uniforme dans  $\Omega$  avec un pas de  $h_M = 0.002$  est formé de 62998 triangles et l'ordre de la matrice  $M$  est 95048. Nous posons comme tenseur de diffusion l'identité partout, et nous faisons varier le champ de convection  $\mathcal{C} = (c_x, c_y)^t$  dans  $\Omega$ , tandis que dans  $\Xi$ , il n'y a pas de convection. Dans la Table 4.7, nous présentons les résultats sur douze processeurs.

TAB. 4.7 – exécution sur 12 processeurs : robustesse du solveur EFM vis à vis du champ de convection (données par itérations ND).

data \ $(c_x, c_y)$	(0,0)	(1,0)	(10,0)	(100,0)	(1000,0)	(0,10)	(0,100)
$t_{MFE_{SOL}}$	1.49	1.74	1.91	1.74	0.73	1.91	2.4
#GMRES	37	40	45	40	20	43	52

Le nombre d'itérations de GMRES est très peu sensible à la direction et aux valeurs du champ de convection. Quand la convection est dominante ( $\mathcal{C} = (1000, 0)^t$ ), le taux de convergence de GMRES augmente.

## Problème de convection-diffusion avec convection non continue et diffusion hétérogène (flux dans dolomite avec inclusions de roches et espaces vides)

Nous considérons la simulation d'une propagation de contaminant. Soit le milieu poreux constitué de deux couches géologiques avec des convections et des coefficients de diffusion différents. La couche supérieure a une convection horizontale supérieure à celle de la couche inférieure  $\mathcal{C} = (-100, 0)^t$  qui convecte le contaminant. La couche inférieure n'a pas de convection et le contaminant se propage uniquement ici par diffusion. La couche supérieure n'est pas isotropique, elle contient des trous et des inclusions dont la propriété de diffusion est plus forte (par exemple des rochers dans du sable). Le point source du contaminant est localisé près de la frontière inférieure de la couche inférieure. Les conditions aux limites sont des conditions de Neumann homogènes partout sauf sur la frontière supérieure où une condition de Dirichlet est imposée.

Nous considérons  $\Pi = \Omega \cup \Sigma \cup \Xi$ ,  $\Xi = (0, 1) \times (0, 0.25)$ ,  $\Omega = (0, 1) \times (0.25, 0.5) \setminus \omega$ , avec le trou  $\omega$  et deux inclusions décrites dans la Figure 4.5. Dans les inclusions, le tenseur de diffusion est  $\mathcal{D} = 10^4 I$ , pour le reste de  $\Omega$ ,  $\mathcal{D} = I$ . Dans la Figure 4.5, nous présentons la solution de (4.46) pour différentes valeurs du tenseur de diffusion dans  $\Xi$ ,  $\mathcal{D} = I$  (figure du milieu), et  $\mathcal{D} = 10I$  (figure du bas). Les critères d'arrêt pour (N-D) et l'algorithme GMRES sont  $10^{-8}$  et  $10^{-10}$ , respectivement.

### 4.5.2 Résultats sur l'aspect parallélisation

Cette section présente les résultats obtenus en terme d'efficacité de chacun des solveurs de sous-domaine ainsi que les résultats parallèles sur le couplage. Ils montrent notamment la possibilité de flexibilité de cette approche de décomposition de domaine quant au choix des architectures de calculs pour chacun des solveurs, conduisant à des calcul distribués distants ou metacomputing.

#### Parallélisation du solveur EFM

Dans cette section, on fixe le problème (4.45) dans le domaine  $\Pi = \Omega \cup \Sigma \cup \Xi$ ,  $\Omega = (0, 1) \times (0.1, 0.2)$ ,  $\Xi = (0, 1) \times (0, 0.1)$ , avec le maillage ( $h_M = 0.002$ ) avec 62998 triangles et on examine les performances sur le solveur EFM sur différents nombres de processeurs. L'ordre de la matrice est de 95048, le critère d'arrêt pour la méthode GMRES est fixée à une réduction  $10^6$ -fois de la norme euclidienne du résidu initial. La Table 4.8 présente aussi bien le nombre d'initialisation du préconditionneur et de solutions itératives que le nombre d'itérations pour la résolution en parallèle selon le nombre de processeurs sur la machine A.

Le temps d'initialisation est indicatif d'un speed-up super-linéaire dans la mesure où la partie la plus coûteuse, la factorisation des matrices creuses des sous-domaines, a une complexité arithmétique non-linéaire  $O(n_i^\alpha)$ ,  $\alpha \simeq 1.7$ . Le speed-up pour la solution des systèmes dont les matrices sont factorisées est presque linéaire,  $O(n_i^\beta)$ ,  $\beta \simeq 1.1$ . L'évaluation du préconditionneur demande des communications supplémentaires, à la fois

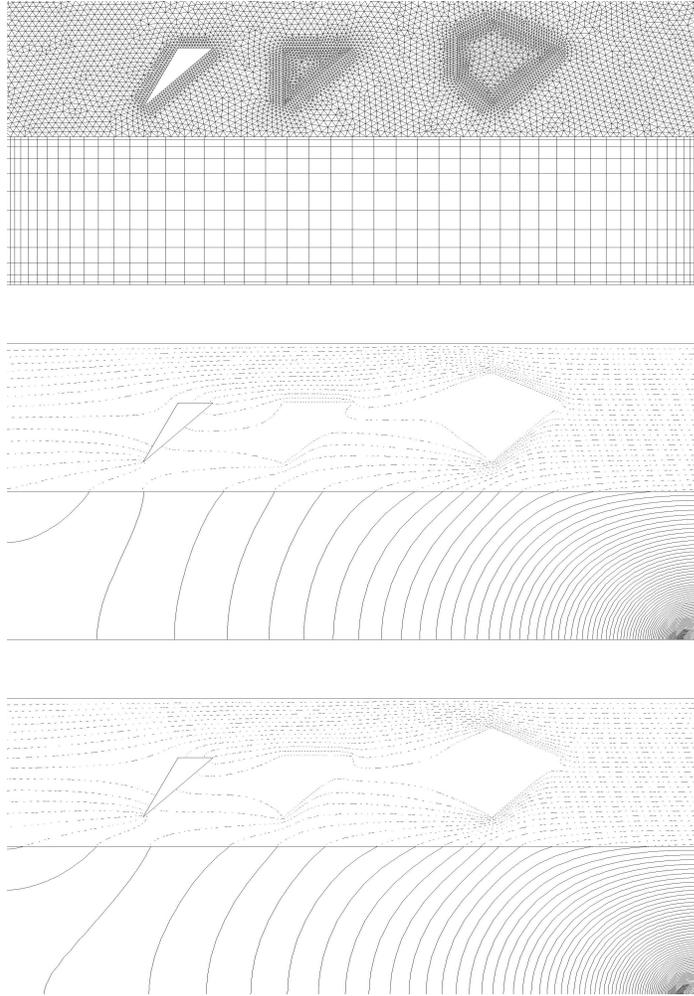


FIG. 4.5 – *Le domaines avec deux inclusions et un trou : le maillage et les solutions*

locales et globales. Cela rend le speed-up observé par itération sous-linéaire. Nous pouvons remarquer que malgré la perte de régularité du sous-domaine, le nombre d'itérations reste stable.

### **Efficacité parallèle du solveur ES**

Reprenons le travail effectué dans la section 4.4.2. Pour mémoire, nous préconditionnons par les blocs diagonaux inverses représentés figure 4.2 et projetons dans l'espace de Krylov pour une solution. Si cette projection est insuffisante pour atteindre le seuil de convergence de GCR, nous appliquons GCR pour obtenir la solution. La Table 4.9 présente

TAB. 4.8 – Speed-up du preconditionement, de l’initialisation et des solutions itératives des problèmes EFM sur l’ordinateur A avec 100mbit/s de bande passante .

données \ $P$	4	6	8	10	12
$t_{EFM_{INIT}}$	0.93	0.53	0.41	0.27	0.23
speed-up	1.0	1.75	2.27	3.44	4.04
$t_{EFM_{SOL}}$	2.8	2.25	1.64	1.45	1.16
#GMRES	40	47	43	42	39
temps par it.	0.075	0.048	0.038	0.034	0.029
speed-up par it.	1.0	1.46	1.84	2.06	2.41

les résultats en temps du solveur ES pour une résolution sur les machines A et B. Les colonnes ( $t_{ES}$  resol. et  $t_{ES}$  proj. représentent respectivement les temps d’exécution de la méthode de Krylov preconditionnée et celui de la méthode de Krylov avec projection. La taille du problème est constante et le nombre maximal de vecteurs Krylov conservé est 300. Nous pouvons remarquer que malgré la fréquence CPU plus élevée, l’ordinateur A a des performances 3.5 fois inférieures sur le solveur ES. Un certain nombre de facteurs peut expliquer cette contreperformance.

- Premièrement, la librairie scientifique n’est pas dédiée à l’architecture de cette machine contrairement à la librairie scientifique Compaq cxml.
- Deuxièmement, le compilateur Fortrant95 de NAGware compagnie vs Compaq F90.
- Troisièmement, le L2-cache de taille 256KB vs 8MB. Ces facteurs produisent un facteur 2.5 sur les performances sur un seul processeur.
- Quatrièmement, la bande passante de communication 100Mb/s vs 800 Mb/s qui conduit à un facteur 3.5 sur les performances.

La Table 4.9 montre que :

1. le code ES a une parfaite efficacité en terme de parallélisation sur la machine B jusqu’à 8 processeurs sur de gros maillages pour la résolution GCR et les techniques de projection. Des speed-up super-linéaires sont obtenus sur la machine B pour de petits maillages grâce au cache L2,
2. cette efficacité parallèle n’est pas présente pour la résolution GCR sur la machine A, notamment lorsque de gros maillages sont en jeu. Mais la technique de projection a des résultats aussi bons sur les machines A et B,
3. le temps d’exécution augmente d’un facteur proche de 3 lorsque la taille augmente dans l’une des deux directions sur les deux machines.

Cette table prouve que le solveur ES a besoin d’une machine parallèle avec une communication ethernet rapide pour générer les vecteurs de Krylov, mais les techniques de projection peuvent éventuellement se contenter d’une communication interne lente.

Le test suivant évalue l'impact du nombre maximal de vecteurs de Krylov stockés pour la résolution par la méthode GCR et la technique de projection.

La table 4.10 décrit le comportement du temps d'exécution pour le solveur ES selon le nombre de vecteurs de Krylov stockés pour la projection. Nous imposons à la méthode GCR d'effectuer un certain nombre d'itérations même si le critère d'arrêt sur le résidu est vérifié. On montre que :

1. La résolution ne scale pas parfaitement avec la taille  $dim(\mathcal{K}_S)$  de l'espace de Krylov, en particulier pour les tailles importantes de maillage. La raison est que le coût de calcul d'un nouveau vecteur de Krylov pour GCR -il faut satisfaire les propriétés d'orthogonalité de la nouvelle base de Krylov (eq. (4.44)- n'est pas linéaire.
2. La technique de projection en fonction de  $dim(\mathcal{K}_S)$  scale plutôt bien avec un speed-up super linéaire pour les petits maillages en raison des effets de cache, ainsi que ratio proj. l'indique.
3. Le ratio entre la résolution GCR et les techniques de projection pour un nombre donné de vecteurs de Krylov est vraiment impressionnant. Toutefois, la signification du ratio  $\frac{\text{Temps resol}}{\text{Temps proj}}$  doit être tempérée. La base de Krylov est augmentée progressivement au fil des itérations de (N-D). Par conséquent le nombre d'itérations de la méthode GCR n'est généralement pas le nombre total de vecteurs de Krylov par itération de (N-D). Deuxièmement, lorsque le nombre maximal de vecteurs de Krylov est atteint, la base de Krylov est réinitialisée. Toutefois, comme la section suivante va le montrer, la taille totale de l'espace de Krylov qui doit être générée tend vers une limite dans le contexte de l'algorithme de Neumann-Dirichlet.

### 4.5.3 Couplage parallèle EFM/ES via Aitken-Schwarz

#### Accélération numérique effective

La Table 4.11 présente l'efficacité parallèle de l'accélération d'Aitken sur la convergence de Neumann-Dirichlet couplant les solveurs EFM et ES. Le maillage est composé d'environ 10000 triangles et 65536 noeuds de Chebychev. Les exécutions ont été réalisées sur l'ordinateur A. Le critère d'arrêt pour les itérations de Neumann-Dirichlet est fixé à  $10^{-7}$ . Le nombre maximal de vecteurs de Krylov accumulés est 800. Le procédé d'Aitken est appliqué toutes les six itérations de Neumann-Dirichlet. Les deux solveurs EFM et ES sont exécutés sur des processeurs différents. La Table 4.11 montre ainsi que :

1. l'accélération de la convergence de l'algorithme de Neumann-Dirichlet par la technique d'Aitken réduit d'un facteur 3 en temps et en itérations l'exécution de N-D sur deux processeurs ;
2. le solveur complet Aitken-Neumann-Dirichlet affiche un speed-up raisonnable si l'on considère une base de comparaison avec une exécution sur deux processeurs. Ici, le nombre de processeurs dévolu à chaque solveur est choisi de manière à équilibrer les charges. On peut probablement attribuer les fluctuations du nombre d'itérations de Neumann-Dirichlet accélérées aux résidus différents pour chaque sous-problème.

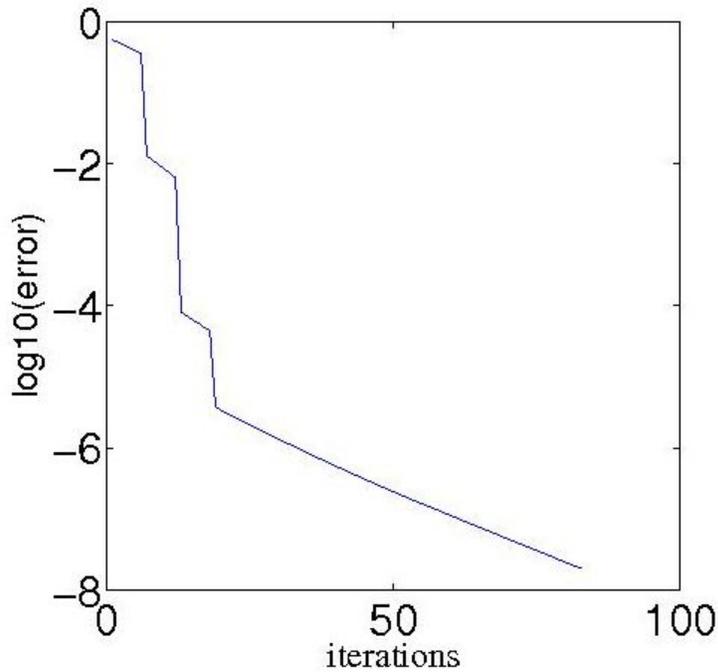


FIG. 4.6 – Effet de l’accélération par Aitken sur l’erreur (différence entre deux itérées de la trace relaxée sur l’interface) en norme  $\|\cdot\|_\infty$

La Figure 4.6 montre l’effet de l’accélération du procédé d’Aitken sur la convergence de Neumann-Dirichlet. Le procédé d’Aitken est appliqué trois fois aux itérations 6, 12 et 18. Nous pouvons remarquer que les paramètres affectant la régularité de la trace sur l’interface (la taille du problème étendu, le nombre de modes de Fourier accélérés) influent sur l’accélération d’Aitken.

### Solution parallèle sous une architecture de méta-computing

Dans cette section, nous soutenons l’utilisation de différentes architectures d’ordinateurs (A et B) pour effectuer ce calcul.

Dans les résultats suivants, les vecteurs de Krylov générés par GCR pour la solution du problème sur le domaine spectral sont accumulés durant les itérations de Neumann-Dirichlet. A chaque itération, le résultat initial pour GCR est obtenu par projection sur la base formée des vecteurs de Krylov conservés lors des itérations (N-D) précédentes. La Figure 4.7 montre le nombre d’itérations de GCR du ES en fonction du nombre d’itérations de Neuman-Dirichlet pour le problème (4.46) ayant un maillage spectral de taille  $65 \times 64$ . Le couplage Neumann-Dirichlet non-acceléré et accéléré nécessite respectivement 201 and 28 itérations, (Aitken est appliqué le cas échéant toutes les trois itérations).

Un certain nombre de remarques peuvent être effectuées :

1. Le travail du solveur ES, en fonction du nombre d’itérations de Schwarz, tend vers

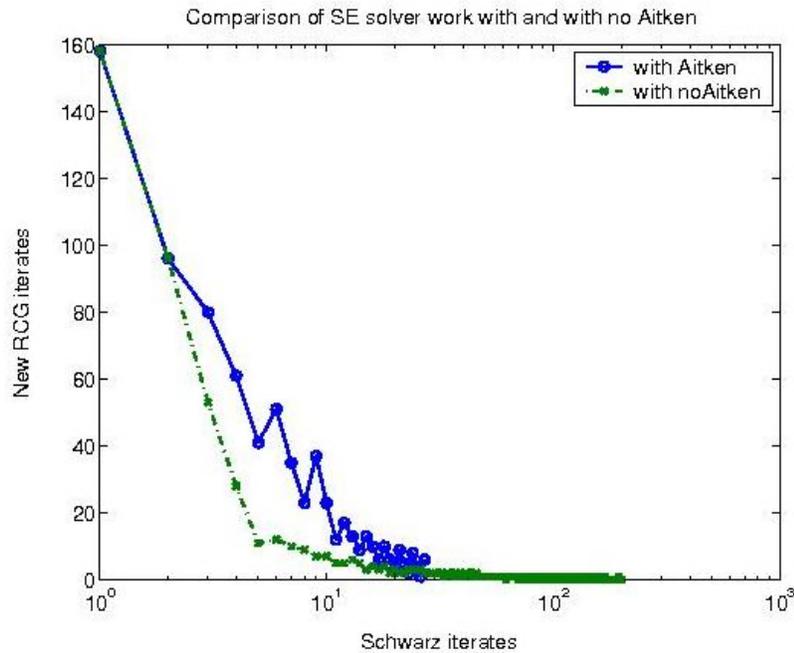


FIG. 4.7 – Nombre d’itérations nouvelles de GCR selon l’utilisation ou pas de l’accélération par Aitken

la seule projection dans l’espace de Krylov. Cela signifie qu’à terme, dans ce cas, aucune itération de GCR n’est plus calculée.

2. L’accélération par Aitken fournit plus d’informations pour l’espace de Krylov. Ceci est attesté par le fait que le nombre d’itérations nouvelles de Krylov augmente après une accélération par Aitken. Le nombre total de vecteur de Krylov générés dans le cas d’un couplage Neumann-Dirichlet est 982 contre 1100 si l’on accélère la vitesse de convergence dans le cas d’Aitken.
3. S’il n’y a pas d’accélération par Aitken, les communications entre les ordinateurs A et B prennent plus de temps parce que le solveur ES obtient ses résultats uniquement par la projection. Alors l’efficacité parallèle du calcul total diminue.

Nous allons argumenter du profit que pourrait générer l’architecture méta-computing pour effectuer le calcul en gérant au mieux les ressources de calcul existantes.

1. D’une part, comme nous l’avons montré dans la section précédente, le calcul de la production des vecteurs de Krylov est meilleure sur l’architecture B. Comme la projection de l’espace de Krylov nécessite une réduction globale du nombre de vecteurs de Krylov, elle sera également mieux calculée sur l’architecture de l’ordinateur B et cela même si une bonne efficacité parallèle est obtenue sur l’ordinateur A. Ainsi, l’architecture B est dédiée au solveur ES.

2. D'autre part, les performances du solveur EFM sont suffisantes sur l'architecture A pour permettre un bon équilibre dans les temps d'exécution respectifs des deux solveurs. Utiliser le solveur EFM sur l'ordinateur B conduit à un mauvais équilibre avec le solveur ES. De plus, le coût des processeurs de l'ordinateur A est bien inférieur à ceux des processeurs B. Le choix de l'ordinateur A peut aussi être justifié par une utilisation économiquement optimale des ressources de calcul.
3. Finalement, chaque itération de Neumann-Dirichlet réclame des échanges de valeurs sur l'interface discrétisée de manière uniforme deux fois par itérations, l'accélération d'Aitken permet une diminution du nombre de telles communications entre les ordinateurs A et B.

Ces propriétés rendent cet algorithme approprié au méta-computing.

## 4.6 Conclusion

D'un point de vue numérique, la méthodologie numérique présentée ici est capable de résoudre des problèmes où les hétérogénéités sont fortes( en espace et dans les coefficients des équations) en maillage non conforme. Le choix de cette méthodologie est induite par les propriétés physiques de la solution. Des preuves de robustesse numérique sont fournies. Les méthodes de décomposition de domaines proposées dans notre travail permettent de réduire la taille du problème et de manier des données de Krylov. L'accélération par Aitken fait preuve d'une efficacité numérique indéniable pour réduire le nombre d'itérations de Neumann-Dirichlet.

D'un point de vue informatique, les technologies développées pour les solutions de parallélisation des solveurs EFM sont fondées sur des philosophies opposées en terme d'accès mémoire. Le solveur EFM est un solveur de décomposition de domaine, où les processeurs échangent seulement des données locales. Le nombre d'itérations ne dépend ni du nombre de processeurs ni du nombre de degrés de liberté. Les ordinateurs à mémoire distribuée et un nombre important de processeurs munis avec message passing interface sont intéressantes pour les solutions parallèles de larges systèmes EFM. On peut remarquer que l'augmentation de précision de l'approximation EFM peut être fournie par l'augmentation du nombre de processeurs utilisés dans une architecture à mémoire distribuée de manière presque linéaire avec le nombre de degrés de liberté. En revanche, le solveur ES met en jeu des échanges de données globales. L'architecture de l'ordinateur parallèle doit tenir compte de ces caractéristiques. Dans le cas d'un stockage complet de l'opérateur, la factorisation et la résolution parallèle de systèmes denses requiert un adressage typique d'une architecture à mémoire partagée. En raison du coût, ces ordinateurs ont un nombre faible de processeurs. Ainsi, les coûts arithmétiques pour la parallélisation de la factorisation d'une matrice dense impose de sévères contraintes à ce type de matrices (supérieur à 10000). Dans le cas alternatif d'un stockage de matrice compact, la transposition globale des données nécessite une communication network très rapide avec un faible temps de latence. Ce temps global de communication limite le nombre de processeurs et la taille des

problèmes mis en jeu. Toutefois, l'approximation des méthodes spectrales est très précise dans le cas de solutions très régulières. Ceci la rend applicable pour un nombre faible de degrés de liberté.

La solution que nous présentons ici convient parfaitement aux objectifs du méta-computing : utiliser des ordinateurs d'architecture différentes et reliés par une communication network de vitesse faible. En effet, les échanges entre le solveur EFM sur une machine parallèle à mémoire distribuée et le solveur ES sur une machine parallèle à mémoire partagée se produisent deux fois par itération Neumann-Dirichlet seulement. Les données à échanger sont très petites en raison du faible nombre de degrés de liberté sur l'interface  $\Sigma$  et du petit nombre d'itération d'Aitken-Schwarz.

Des développements futurs de la méthodologie d'Aitken-Schwarz permettront d'éviter l'utilisation d'une grille 1D intermédiaire utilisée dans notre travail. La technique en cours de développement est fondée sur l'utilisation d'une approximation de Fourier non-uniforme. Alors les coefficients de Fourier des traces des solutions itérées sur l'interface sont calculés directement avec les valeurs des solutions exprimées en coordonnées non uniforme.

TAB. 4.9 – Temps de résolutions du solveur ES sur les machines A et B pour différents maillages  $N_x \times N_y$

Processeur #	1	2	4	8	16
$t_{ES}$ resol.(s) : Machine A					
$256 \times 256$	1697.33	1254.87	874.54	385.08	
$128 \times 256$	568.05	315.38	182.39	109.23	
$64 \times 256$	137.69	86.33	53.87	20.45	
$128 \times 128$	214.98	144.63	81.70	30.08	
$64 \times 128$	57.08	31.16	16.55	9.67	
$64 \times 64$	26.95	14.33	8.01	3.60	
$t_{ES}$ resol.(s) : Machine B					
$256 \times 256$	722.66	365.11	185.53	114.74	70.64
$128 \times 256$	218.18	106.47	54.36	24.41	13.40
$64 \times 256$	73.74	28.50	13.86	8.04	6.44
$128 \times 128$	98.08	46.82	15.99	8.08	5.68
$64 \times 128$	24.02	11.47	4.49	2.34	2.72
$64 \times 64$	9.73	3.55	1.50	0.99	1.72
$t_{ES}$ proj. (s) : Machine A					
$256 \times 256$	0.8691	0.6172	0.1700	0.0874	
$128 \times 256$	0.4259	0.1632	0.0788	0.0407	
$64 \times 256$	0.1415	0.0731	0.0370	0.0203	
$128 \times 128$	0.1488	0.0772	0.0388	0.0215	
$64 \times 128$	0.0680	0.0351	0.0191	0.0112	
$64 \times 64$	0.0329	0.0177	0.0099	0.0064	
$t_{ES}$ proj. (s) : Machine B					
$256 \times 256$	0.4517	0.2215	0.1126	0.0789	0.0560
$128 \times 256$	0.2209	0.1088	0.0546	0.0422	0.0262
$64 \times 256$	0.1005	0.0510	0.0255	0.0167	0.0086
$128 \times 128$	0.1067	0.0545	0.0269	0.0145	0.0040
$64 \times 128$	0.0498	0.0253	0.0089	0.0037	0.0013
$64 \times 64$	0.0240	0.0083	0.0026	0.0019	0.0012

TAB. 4.10 – Temps d'exécution du solveur ES sur les machines A et B selon les dimensions de l'espace de Krylov

$dim(\mathcal{K}_S)$	300	600	900	1200	1500	1800	2100
$t_{ES}$ resol.(s) : Machine A (16 proc.)							
$256 \times 256$	70.64	165.25	288.62	437.09	610.94	810.71	-
$128 \times 128$	5.44	14.37	31.11	54.65	85.11	122.54	166.78
$64 \times 64$	1.72	3.97	6.35	9.64	13.35	17.77	23.69
$t_{ES}$ proj.(s) : Machine A (16 proc.)							
$256 \times 256$	0.0553	0.1090	0.1897	0.2304	0.2815	0.3512	-
$128 \times 128$	0.0066	0.0170	0.0401	0.0863	0.0753	0.0961	0.1062
$64 \times 64$	0.0012	0.0024	0.0195	0.0759	0.010	0.019	0.015
$256 \times 256$							
Ratio resol.	1	0.854	0.734	0.646	0.578	0.522	
Ratio proj.	1	0.985	1.143	1.041	1.018	1,0584	
$\frac{\text{Temps resol}}{\text{Temps proj}}$	1277	1516	1521	1897	2170	2308	
$128 \times 128$							
Ratio resol.	1	0.757	0.524	0.398	0.319	0.266	0.228
Ratio proj.	1	1,287	2.0252	3,268	2.281	2,426	2,298
$\frac{\text{Temps resol}}{\text{Temps proj}}$	824	845	775	633	1130	1275	1570
$64 \times 64$							
Ratio resol.	1	0,866	0,812	0,713	0,653	0,580	0,508
Ratio proj.	1	1	5.416	15,812	1,666	2,638	1,785
$\frac{\text{Temps resol}}{\text{Temps proj}}$	1433	1654	325	127	1315	935	1579

TAB. 4.11 – Performances sur une itération en temps dans le cas hétérogène

Nombre Processeurs	2	2	3	5	6	9
Ait./non Ait.	no A.	A.	A.	A.	A.	A.
N-D cvg	7.65e-8	1.47e-8	1.94e-8	1.84e-8	1.98e-8	1.9e-8
N-D it.	200	60	66	64	42	54
N-D temps(s)	2379	743	404	225	142	100
Speed-up	-	1	1.84	3.30	5.23	7.43





# Chapitre 5

## Des problèmes non convexes résolus par méthodes spectrales

### 5.1 Introduction

Nous nous plaçons en 2D. Soit  $\Omega$  un domaine non convexe muni du repère  $(O, x, y)$ . Le problème elliptique du second ordre type que nous voulons résoudre est

$$(PBT) \left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot A \nabla u = f \text{ dans } \Omega \\ u \text{ est 1-périodique en } x \\ u = q_1 \text{ sur bas } \cup \text{ haut} \\ \frac{\partial u}{\partial n} = q_2 \text{ sur } \Gamma_H \end{array} \right. \quad (5.1)$$

où  $\Omega$  est une géométrie non convexe, par exemple un rectangle avec un trou, représenté sur la figure gauche de 5.1 et  $A \in L^\infty(\Omega)$  un tenseur de la forme :

$$A(y) = \begin{cases} A^1 & \text{si } h_2 < y < h_1 \\ A^2 & \text{sinon} \end{cases}$$

Les méthodes spectrales par collocation approximent de manière précise les problèmes dont les solutions sont régulières (cf. (3.92), [44]). Mais elles nécessitent des domaines convexes et des coefficients constants, ce qui n'est pas le cas ici. C'est pourquoi le domaine de simulation est "réorganisé" selon la description de la Figure 5.1. Nous allons utiliser la technique de **décomposition de domaine** de manière à simuler sur des sous-domaines convexes et à diffusion homogène. Ces contraintes concernant les coefficients nous imposent également d'utiliser une décomposition de domaines **sans recouvrement**. Nous allons utiliser la méthodologie décrite dans la section 3. Un exemple de décomposition en 3 sous-domaines est alors représenté sur la figure droite 5.1. Les interfaces artificielles sont notées par Nord et Sud.

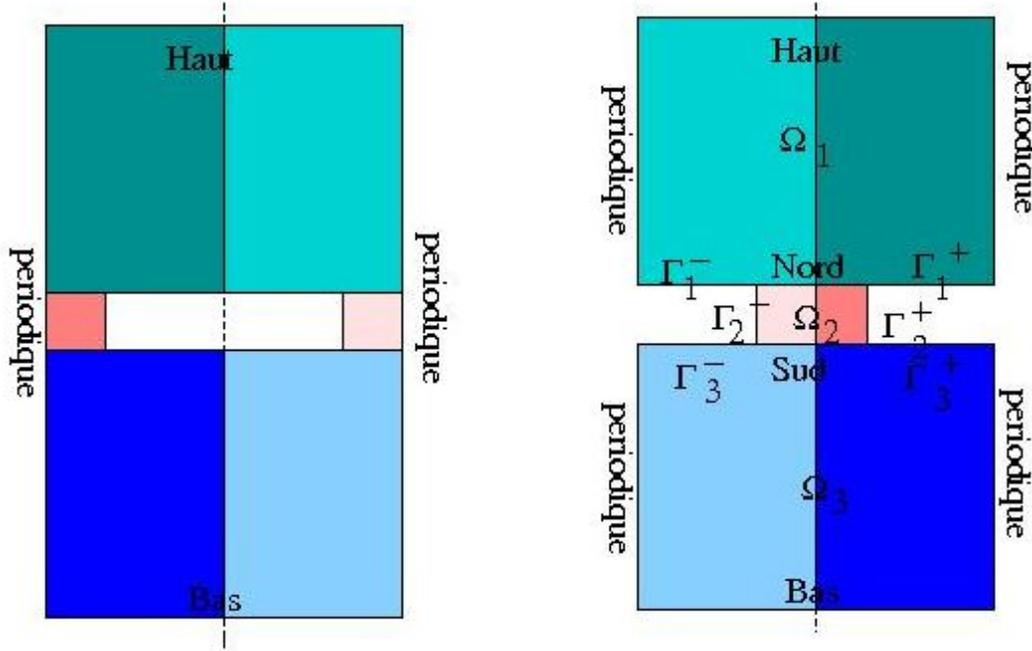


FIG. 5.1 – Décomposition de domaine sans recouvrement destinée à simuler un problème non convexe

## 5.2 Discrétisations

Nous pouvons noter que les sous-domaines  $\Omega_1$  et  $\Omega_3$ , ont des conditions aux limites périodiques selon  $x$ . Une méthode de Fourier et donc une discrétisation régulière seront utilisées dans cette direction. En revanche, le sous-domaine  $\Omega_2$  a des conditions aux limites de Neumann en  $x$ , une décomposition de Fourier ne peut pas être envisagée dans ce cas. La méthode de Chebychev par collocation avec une discrétisation de Gauss-Lobatto [43, 44] sera utilisée. Cela implique que nous utilisons une décomposition de domaine en maillages non conformes. Dans l'autre direction, nous utilisons la méthode de Chebychev par collocation dans tous les sous-domaines.

### 5.2.1 Méthode de Fourier

Nous utilisons la méthode pseudo-spectrale par collocation [47, 90] dans les sous-domaines ayant des conditions aux limites périodiques dans la direction  $x$ .

Soit  $\Omega_j^h = \left\{ r = (x_i, y_l) \in \Omega_j, x_i = h_{j,x}^{-1}\left(\frac{2\pi i}{M+1}\right), i = 0, \dots, M, y_l = h_{j,y}^{-1}\left(\cos\left(\frac{\pi l}{N_y}\right)\right), l = 0, \dots, N_y \right\}, j = 1, 3$  où  $h_{j,x}^{-1}$  est le mapping linéaire de  $[-0, 2\pi]$  sur  $[x_0, x_M]$  et  $h_{j,y}^{-1}$  est le mapping linéaire de  $[-1, 1]$  sur  $[y_0, y_{N_y}]$ . Soit  $\Omega_{j,y}^h = \left\{ y_l \in \mathbb{R}; y_l = h_{j,y}^{-1}\left(\cos\left(\frac{\pi l}{N_y}\right)\right), l = 0, \dots, N_y \right\}, j = 1, 3$ .

Soit l'espace discret défini par

$$F_{d,N} = \left\{ v \mid v = \sum_{0 \leq k \leq M} \sum_{0 \leq j \leq N_y} a_{i,j} T_j(h_{d,y}^{-1}(y)) \exp(ik h_{d,x}^{-1}(x)), \forall a_{i,j} \right\}, \quad d = 1, 3.$$

$u$  est alors approchée aux noeuds  $(x_i, y_l)$  par :

$$u_j^h(x_i, y_l) = \sum_{0 \leq k \leq M} \hat{u}_k(y_l) \exp(ikx_i), \quad i = 0, \dots, M, \quad l = 0, \dots, N_y, \quad j = 1, 3 \quad (5.2)$$

avec  $\hat{u}_k(y) = \sum_{j=0}^{N_y} a_{k,j} T_j(h_y^{-1}(y))$ ,  $k = 0, \dots, M$ . Introduisons  $u_j^h \in F_{j,N}$  dans (5.5).

$$-\nabla \cdot (A \nabla u_j^h(x_i, y_l)) = \sum_{0 \leq k \leq M} -\left( \frac{\partial}{\partial y} \left( A \left( \frac{\partial}{\partial y} \right) \right) + k^2 A^1 \right) \hat{u}_k(y_l) \exp(ikx_i) \quad (5.3)$$

Sous l'hypothèse de séparabilité des variables, qui doit alors être justifiée, et compte tenu que  $A$  est constant sur chaque sous-domaine, nous obtenons pour chaque  $k = 0, \dots, M$  :

$$-\left( A \left( \frac{\partial^2}{\partial y^2} + k^2 \right) \right) \hat{u}_k(y_l) = \hat{f}_k(y_l), \quad l = 0, \dots, N_y \quad (5.4)$$

Nous sommes donc amenés à résoudre  $M + 1$  systèmes linéaires dans  $\mathbb{C}$  dont les modes de  $u$  sont les inconnues. Nous utilisons l'opérateur de différentiation pseudo-spectral de Chebychev défini dans la section 4.2.4. Ici, les matrices sont de taille  $(N_y + 1) \times (N_y + 1)$ , avec  $N_y = 63$ . Bien que ces matrices soient pleines, elles sont de petite taille et nous pouvons nous contenter de résoudre ces  $M + 1$  systèmes linéaires résultant par la méthode directe PLU. Lors du processus itératif de Neumann-Dirichlet (cf. section 3.3.1), nous n'avons besoin de la valeur réelle des solutions itérées que sur les interfaces. Nous n'effectuons le calcul des modes par FFT [82] sur tout le sous-domaine que lors de l'itération 0, et le calcul de  $u$  par FFTBACK [82] sur tout le sous-domaine qu'après convergence de la méthode de Schwarz. Cette décomposition modale induit une parallélisation naturelle par distribution de la résolution de ce type de sous-problèmes (i.e. ayant des conditions aux limites périodiques en  $x$ ). Elle consiste tout simplement à distribuer les modes selon les processeurs disponibles. Des applications intéressantes sont faites dans les études [21] et [22].

## 5.2.2 Méthode de Chebychev

Nous allons résoudre le sous-problème 2 par la méthode spectrale de Chebychev avec une discrétisation de Gauss-Lobatto tout comme dans la section 4.4.2. Pour mémoire, soit l'espace discret défini par

$$X_N = \left\{ v \mid v = \sum_{0 \leq i \leq \tilde{N}_x} \sum_{0 \leq j \leq \tilde{N}_y} a_{i,j} T_i(h_{2,x}^{-1}(x)) T_j(h_{2,y}^{-1}(y)), \forall a_{i,j} \right\}.$$

Soit  $\Omega_2^h = \left\{ r = (x_i, y_j) \in \Omega_2, x_i = h_{2,x}^{-1}(\cos(\frac{i\pi}{\tilde{N}_x})), y_j = h_{2,y}^{-1}(\cos(\frac{j\pi}{\tilde{N}_y})) \right\}$ . Nous recherchons alors  $u_2^h \in X_N$  tel que :

$$\nabla \cdot A \nabla u_2^h(r) = f_2(r) \quad r \in \Omega_2^h \quad (5.5)$$

$$\frac{\partial u_2^h}{\partial n}(r) = q_2(r) \quad r \in \Gamma_2^{h,-} \cup \Gamma_2^{h,+} \quad (5.6)$$

Ce problème se réduit à un système linéaire de matrice associée non singulière  $S2$  qui a  $(\tilde{N}_x + 1)(\tilde{N}_y + 1) * (\tilde{N}_x + \tilde{N}_y)$  valeurs non nulles et dont la forme est similaire à celle décrite figure 4.2. Nous utilisons la méthode de résolution développée dans la section 4.4.2.

### 5.2.3 Couplage sur les interfaces

#### Couplage Fourier / Chebychev

Le problème discrétisé couplé s'écrit :

trouver le triplet  $((\hat{u}_{1,k})_{0 \leq k \leq M}, u_2^h, (\hat{u}_{3,k})_{0 \leq k \leq M}) \in \mathbb{C}^{N_y^{M+1}} \times X_N \times \mathbb{C}^{N_y^{M+1}}$  tel que :

$$-(A(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + k^2))\hat{u}_{1,k}(y_l) = \hat{f}_{1,k}(y_l), \quad y_l \in \Omega_{1,y}^h, \quad (5.7)$$

$$A \frac{\partial \hat{u}_{1,k}}{\partial y}(y_{N_y}) = \hat{q}_{2,k}(y_{N_y}), \quad (5.8)$$

$$\hat{u}_{1,k}(y_0) = \hat{q}_{1,k}(y_0), \quad (5.9)$$

$$\nabla \cdot A \nabla u_2^h(r) = f_2(r) \quad r \in \Omega_2^h, \quad (5.10)$$

$$\frac{\partial u_2^h}{\partial n}(r) = q_2(r) \quad r \in \Gamma_2^{h,-} \cup \Gamma_2^{h,+}, \quad (5.11)$$

$$-(A(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + k^2))\hat{u}_{3,k}(y_l) = \hat{f}_{3,k}(y_l), \quad y_l \in \Omega_{2,y}^h, \quad (5.12)$$

$$A \frac{\partial \hat{u}_{3,k}}{\partial y}(y_{N_y}) = \hat{q}_{2,k}(y_{N_y}), \quad (5.13)$$

$$\hat{u}_{3,k}(y_0) = \hat{q}_{3,k}(y_0). \quad (5.14)$$

#### Condition aux limites sur les interfaces artificielles

Nous allons exprimer le couplage (5.7–5.14) via la méthode itérative de Neumann-Dirichlet, notée (N-D), décrite par la formule 3.27. A priori, nous avons une certaine latitude pour répartir les conditions de Neumann et de Dirichlet relaxée selon les sous-domaines dans la mesure où, bien sûr, les sous-problèmes restent bien posés. Nous n'avons en réalité pas le choix dans notre configuration pour la condition aux limites sur les interfaces artificielles Nord et Sud. En effet, les conditions aux limites sur les bords physiques sur  $\Gamma_1^- \cup \Gamma_1^+$ , respectivement sur  $\Gamma_3^- \cup \Gamma_3^+$  (voir figure 5.1) sont des conditions de flux. La résolution par découplage des modes de Fourier des sous-problèmes 1 et 3 (cf. section 5.2.1) nous impose le même type d'opérateur à  $x$  fixé et donc la même condition aux

limites. Comme le coefficient  $A$  est une constante non nulle par sous-domaine, nous pouvons nous ramener à une condition de Neumann sur  $\Gamma_1^- \cup \Gamma_1^+ \cup \text{Nord}$  et sur  $\Gamma_3^- \cup \Gamma_3^+ \cup \text{Sud}$ . Soit  $u_i^n$  la solution sur le domaine  $\Omega_i$ ,  $i = 1, \dots, 3$  à l'itération  $n$ . La condition aux limites s'écrit, par exemple pour le sous-problème 1, (5.15) dans l'espace physique.

$$\frac{\partial u_1^{n+1}}{\partial n} = \tilde{q}_2 \text{ sur } \Gamma_1^- \cup \Gamma_1^+ \cup \text{Nord} \quad (5.15)$$

où  $\tilde{q}_2$  est de la forme (5.16) :

$$\tilde{q}_2 = \begin{cases} \frac{\partial u_i^{n+1/2}}{\partial n}, & \text{sur Nord} \\ \frac{q_2}{A}, & \text{sur } \Gamma_1^- \cup \Gamma_1^+ \end{cases} \quad (5.16)$$

### Solution itérée du couplage (5.7)–(5.14)

Nous utilisons l'algorithme (N-D) avec  $\theta = 1$  comme paramètre de relaxation (cf. section 3.3.1), c'est à dire l'algorithme de Schwarz itératif. En tenant compte des contraintes décrites dans la section 5.3.1, nous résolvons le schéma suivant : Soit  $u_i^n$  la solution sur le domaine  $\Omega_i$ ,  $i = 1, \dots, 3$  à l'itération  $n$  et  $u_2^0$  donné. Alors il faut trouver  $u_1^{n+1/2}$ ,  $u_3^{n+1/2}$  et  $u_2^{n+1}$  solutions des problèmes (P<sub>1</sub>), (P<sub>2</sub>) et (P<sub>3</sub>) suivants :

$$(P_1) \begin{cases} -\nabla \cdot (A_1 \nabla u_1^{n+1/2}) = 0 & \text{dans } \Omega_1, \\ \frac{\partial u_1^{n+1/2}}{\partial n} = q_2 A_{22}^{1-1} & \text{sur } \Gamma_1^{+-}, \\ \frac{\partial u_1^{n+1/2}}{\partial n_2} = \frac{\partial u_2^n}{\partial n} & \text{sur Nord}, \\ u_1^{n+1/2} \text{ est 1-périodique en } y_1, \\ \frac{\partial u_1^{n+1/2}}{\partial n} = q_1, & \text{sur haut}, \end{cases} \quad (5.17)$$

$$(P_3) \begin{cases} -\nabla \cdot (A_1 \nabla u_3^{n+1/2}) = 0 & \text{dans } \Omega_3, \\ \frac{\partial u_3^{n+1/2}}{\partial n} = q_2 A_{22}^{1-1} & \text{sur } \Gamma_3^{+-}, \\ \frac{\partial u_3^{n+1/2}}{\partial n_2} = \frac{\partial u_2^n}{\partial n} & \text{sur Sud}, \\ u_3^{n+1/2} \text{ est 1-périodique en } y_1, \\ \frac{\partial u_3^{n+1/2}}{\partial n} = q_1, & \text{sur bas}, \end{cases} \quad (5.18)$$

$$(P_2) \quad \begin{cases} -\nabla \cdot (A_2 \nabla u_2^{n+1}) = 0 & \text{dans } \Omega_2, \\ \frac{\partial u_2^{n+1}}{\partial n} = -(n \cdot e_k) * A_{22}^{2-1} & \text{sur } \Gamma_2^{+-}, \\ u_2^{n+1} = u_1^{n+1/2} & \text{sur Nord}, \\ u_2^{n+1} = u_3^{n+1/2} & \text{sur Sud.} \end{cases} \quad (5.19)$$

## 5.3 Solutions techniques

### 5.3.1 Condition aux limites sur l'interface

Nous avons défini les conditions aux limites relatives aux interfaces que notre méthodologie impose pour chaque sous-domaine (5.16). Nous pouvons remarquer que  $\tilde{q}_2$  n'est pas continue sur  $\Gamma_1^- \cup \Gamma_1^+ \cup \text{Nord}$ . Cela va causer des imprécisions dans le cadre du calcul de ses modes par FFT exactement sur les interfaces de la décomposition de domaine. De fait, lors de nos premiers essais, un phénomène de Gibbs s'est produit qui n'a pas permis la convergence de l'algorithme de Schwarz en raison des imprécisions de l'estimation de la trace sur l'interface qui en ont résulté. Nous devons effectuer une procédure de régularisation sur l'interface de manière à rentrer dans le cadre spectral. Nous utilisons exactement les mêmes techniques que pour le prolongement par périodicité de la trace itérée en vue de l'application de la technique de Aitken, décrite dans la section 3.6.3. Nous effectuons une interpolation d'Hermite de degré 5 autour des singularités et nous appliquons le filtre modal [46] de classe  $C^2$   $\sigma(\xi) = \frac{1}{2}(1 + \cos(\pi\xi))$  sur la trace  $\tilde{u}$  obtenue. Un exemple de l'effet du procédé de régularisation sur  $\tilde{q}_2$  est montré sur la figure 5.2 avec un nombre de points pris en compte lors de l'interpolation d'Hermite égal à 16.

### 5.3.2 Couplage grâce à l'algorithme Aitken-Schwarz

Rappelons sous quelle forme se trouvent les données que l'on doit échanger selon les sous-domaines :

- dans les sous-domaines où l'approximation est pseudo-spectrale, c'est à dire dans les sous-domaines  $\Omega_1$  et  $\Omega_3$ , les solutions sont exprimées sous forme modale,  $\hat{u}_{i,k}^n(y) \in \mathbb{C}^{N_y}$ ,  $i = 1, 3$ ,  $k = 0, \dots, M$ ,
- dans les sous-domaines où l'approximation est de type Chebychev, c'est à dire  $\Omega_2$ , les solutions sont exprimées dans l'espace physique  $X_N$ , aux noeuds de Gauss-Lobatto.

Nous voulons utiliser l'accélération par la technique d'Aitken de la méthode de Schwarz développée dans la section 3.4. Les traces itérées sont exprimées sous forme modale, donc nous pouvons utiliser l'algorithme décrit dans la section 3.4.3. Dans notre cas, d'une part les interfaces artificielles Nord et Sud sont couplées et la matrice de transfert  $P_k \in \mathcal{M}_\epsilon(\mathbb{C})$  est pleine pour tout  $k = 0, \dots, M$ . Il nous faut trois itérations de Schwarz pour la reconstituer par la relation (3.85). D'autre part, l'étape de régularisation du second membre décrite dans la section 5.3.1 induit une non-linéarité de la méthode. Ainsi, il

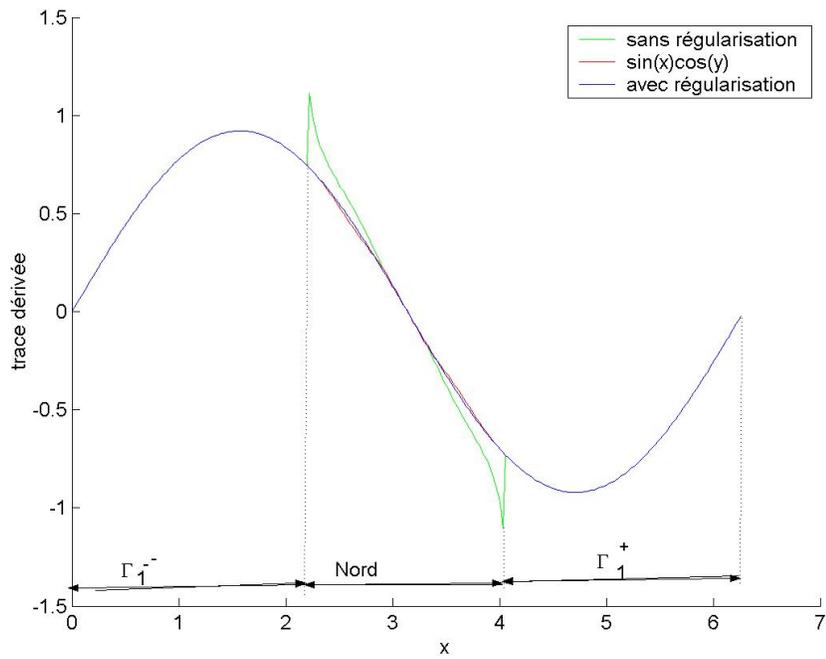


FIG. 5.2 – Un exemple de l'effet de la régularisation appliquée à la condition aux limites sur  $\Gamma_1^+ \cup \text{Nord} \cup \Gamma_1^+$  lors de la résolution du problème dont la solution manufacturée est  $u(x, y) = \sin(x) \sin(y)$

nous faudra appliquer le procédé d’Aitken plusieurs fois avant d’atteindre la convergence comme nous l’avons déjà évoqué dans la section 3.6. Rappelons qu’une étude concernant l’algorithme d’Aitken-Schwarz dans un cas de problème elliptique ayant une géométrie non convexe a déjà été traitée dans [23]. Toutefois, le problème était simulé par différences finies et en maillage conforme alors qu’ici, nous sommes en maillage non conforme. Comme nous l’avons déjà expliqué dans 3.6.1, nous utilisons les projections spectrales pour passer d’une discrétisation régulière à une discrétisation de Gauss-Lobatto.

Voici finalement l’algorithme d’échange des données sur les interfaces artificielles Nord et Sud :

**Algorithme 5.3.1** (a) *toutes les trois itérations, reconstitution des matrices de transfert pour chaque mode,  $k = 0, \dots, M$  par (3.85) et calcul des modes des nouvelles traces itérées  $\hat{u}_{i,k}^n$ ,  $k = 0, \dots, M$ ,  $i = 1, 3$  par Aitken sur les interfaces par la relation (3.72),*

(b) *Projection spectrale sur discrétisation Gauss-Lobatto de la solution itérée  $u_i^n$ ,  $i = 1, 3$ , représentée par ses modes de Fourier, d’après la formule (3.89),*

(c) *Calcul des dérivées normales de la solution  $u_2^{n+1/2}$  sur Nord et Sud par approximation de Chebychev aux noeuds de Gauss-Lobatto,*

*Projection spectrale de ces dérivées sur discrétisation régulière d’après la formule (3.91),*

(d) *Application du procédé de régularisation décrit dans la section 5.3.1 à  $\tilde{q}_2$ ,*

(e) *Calcul des modes de Fourier de  $\tilde{q}_2$  par FFT.*

Nous testons l’algorithme de Aitken-Schwarz ainsi défini dans diverses configurations dans la section suivante. Nous pouvons naturellement appliquer cet algorithme sans l’étape (a). Il converge, mais beaucoup plus lentement, comme nous le verrons dans la section 5.4.

## 5.4 Premières applications

### 5.4.1 Cas avec solutions analytiques

Simulons par notre méthode la solution du problème elliptique (P) dont la solution est régulière et définie par  $u : x, y \rightarrow \sin(x)\sin(y)$  pour vérifier si notre algorithme converge et mesurer la qualité de la précision. Ici, la régularisation s’effectue sur quatre points autour des singularités pour avoir la plus grande précision possible. Les figures 5.4 et 5.5 montrent l’effet de l’accélération du procédé d’Aitken (à l’itération 20) sur la convergence naturelle aux interfaces de l’algorithme de Schwarz (l’erreur est la différence de deux itérations successives sur l’interface en norme  $\|\cdot\|_{L^\infty}$  respectivement pour chaque mode et dans l’espace physique).

Nous avons résumé dans le tableau 5.1 les temps d’exécution ainsi que la précision obtenue par notre algorithme. D’une part, comme attendu, notre algorithme accélère la convergence de l’algorithme de Schwarz. Sur cet exemple, le taux d’accélération est de

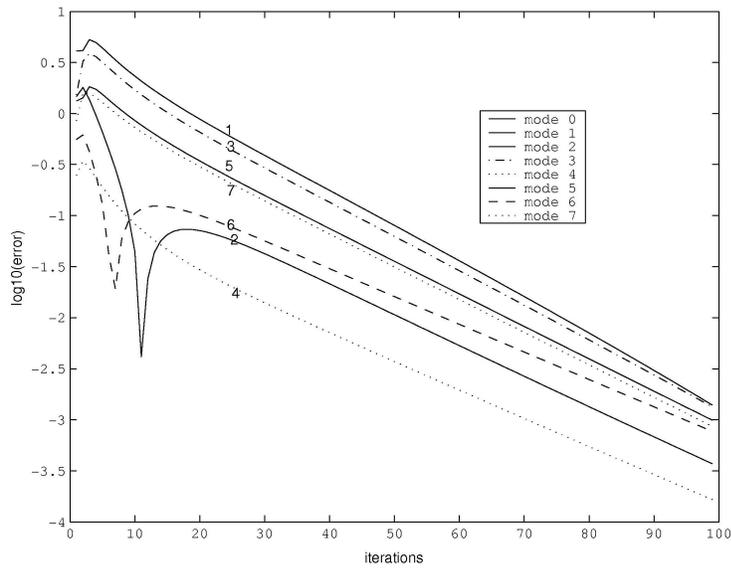


FIG. 5.3 – Erreur itérative modale sur l’interface en  $\|\cdot\|_{L^\infty}$  pour le problème dont la solution est  $u : x, y \rightarrow \sin(x)\sin(y)$

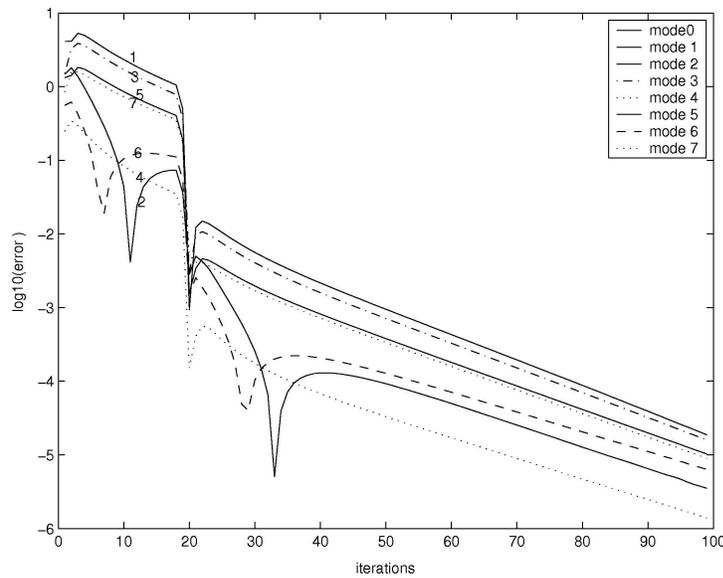


FIG. 5.4 – Erreur itérative modale sur l’interface en  $\|\cdot\|_{L^\infty}$  accélérée par Aitken à la 18<sup>ème</sup> itération pour le problème dont la solution est  $u : x, y \rightarrow \sin(x)\sin(y)$

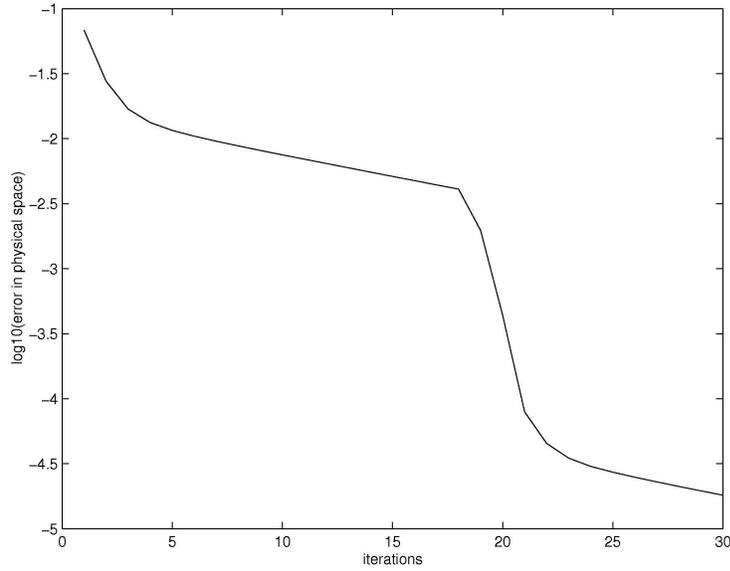


FIG. 5.5 – Erreur itérative sur l’interface physique en  $\|\cdot\|_{L^\infty}$  accélérée par Aitken à la 18<sup>ème</sup> itération pour le problème dont la solution est  $u : x, y \rightarrow \sin(x)\sin(y)$

Accel. No accel.	Nombre de modes	Diskrét. vert.	Précision	Nombre d’itér.	Temps(s)
Sans accel.	40	32	0.05	100	23
Sans accel.	80	32	1.e-4	100	27
Sans accel.	178	32	7.e-5	100	42
Sans accel.	256	32	4.e-5	100	59
Accel.	178	32	7.e-5	30	13

TAB. 5.1 – Précision (différence en  $\|\cdot\|_{L^\infty}$  entre la solution analytique et la solution itérée) et vitesse de convergence de la méthode numérique si la solution est  $u : x, y \rightarrow \sin(x)\sin(y)$

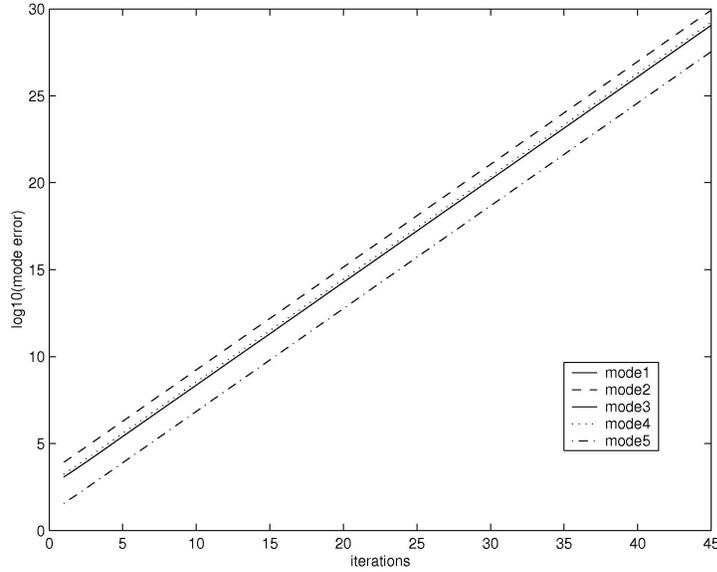


FIG. 5.6 – Erreur itérative modale sur l’interface en  $\|\cdot\|_{L^\infty}$  pour le problème dont la solution est  $u : x, y \rightarrow x^3(x - \pi)^3y$

plus de trois, nous pouvons être satisfaits de l’accélération obtenue. En théorie, ce devrait être une méthode d’ordre 3. Sur notre exemple, elle est d’ordre un peu inférieur (environ 2.7). Rappelons que l’algorithme 5.3.1 repose sur l’hypothèse d’indépendance des modes. Le constat d’un ordre inférieur à 3 peut provenir d’un léger couplage des modes dû à la régularisation effectuée.

Nous avons effectué une autre simulation où la solution du problème est encore régulière et est définie par  $u : x, y \rightarrow x^3(x - \pi)^3y$ . Nous avons choisi des dimensions relatives des sous-domaines telles que l’algorithme de Schwarz diverge s’il n’est pas accéléré, comme dans le cas que nous allons réellement traiter. [26] donne plus de précisions sur le comportement de l’algorithme de Schwarz avec ces problèmes elliptiques. L’erreur de Schwarz utilisée est calculée par la différence entre les modes de l’itération  $n$  et ceux de la solution analytique. La divergence des modes est linéaire et représentée en figure 5.6.

L’application de la technique d’Aitken permet alors à la méthode de converger. Les erreurs en  $\|\cdot\|_{L^\infty}$  dans l’espace des modes et dans l’espace physique sont respectivement représentées sur les figures 5.7 et 5.8. Comme la méthode diverge dans ce cas, il est nécessaire d’appliquer la technique d’Aitken plusieurs fois pour parvenir à faire converger la méthode. Constatons toutefois que nous atteignons un seuil dans la convergence modale itérative. En l’occurrence, nous avons appliqué la correction par Aitken toutes les quatre itérations.

Les précisions obtenues pour divers nombres de modes sont consignées dans le tableau 5.2. Notons qu’une fois de plus, nous effectuons la régularisation de Hermite sur quatre noeuds pour optimiser la précision possible. Nous constatons empiriquement que dans ce

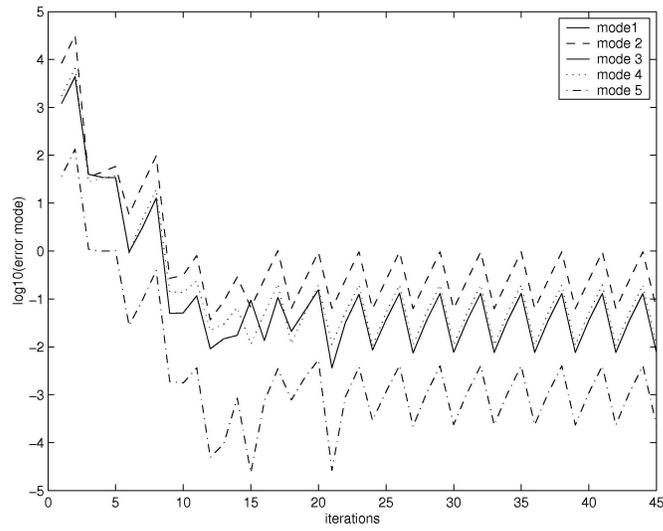


FIG. 5.7 – Erreur itérative modale sur l’interface en  $\|\cdot\|_{L^\infty}$  accélérée par Aitken pour le problème dont la solution est  $u : x, y \rightarrow x^3(x - \pi)^3y$

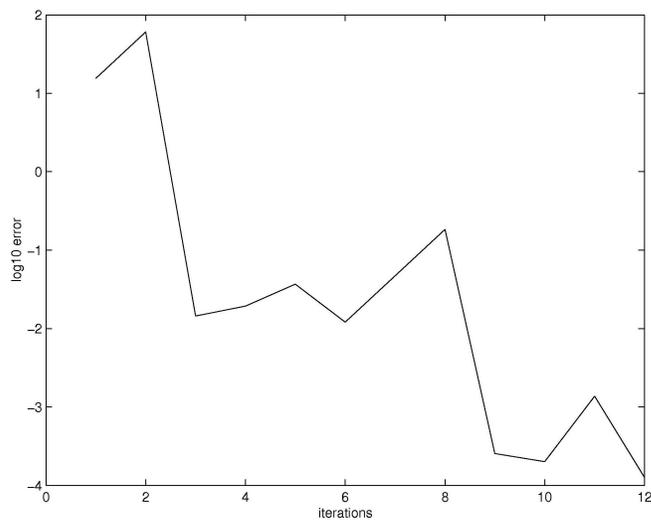


FIG. 5.8 – Erreur itérative sur l’interface en  $\|\cdot\|_{L^\infty}$  accélérée par Aitken pour le problème dont la solution est  $u : x, y \rightarrow x^3(x - \pi)^3y$

Nombre de modes	Discrétisation verticale	Précision	Nombre d'itérations
32	28	5.e-2	30
64	32	1.e-2	28
128	32	1.e-3	15
256	32	2.e-4	15
1024	32	4.e-6	13

TAB. 5.2 – Précision (différence en  $\|\cdot\|_{L^\infty}$  entre la solution analytique et la solution itérée) et vitesse de convergence de la méthode numérique si la solution est  $u : (y_1, y_2) \rightarrow y_1^3(y_1 - \pi)^3 y_2$

cas, l'ordre de la méthode est d'environ 2.5 pour une fonction de classe  $C^2$ . Ceci est un résultat tout à fait satisfaisant compte tenu des régularisations effectuées.

### 5.4.2 Un cas avec des coefficients hétérogènes

Nous allons résoudre à présent le problème suivant avec des coefficients hétérogènes :

$$P_H \begin{cases} \nabla \cdot (A \nabla) u = 0, \text{ dans } \Omega, \\ n \cdot (A \nabla u) = 0, \text{ sur } \Gamma_2^- \cup \Gamma_2^+, \\ n \cdot (A \nabla u) = 1, \text{ sur } \Gamma_1^- \cup \Gamma_1^+, \\ n \cdot (A \nabla u) = 1, \text{ sur } \Gamma_3^- \cup \Gamma_3^+, \\ u = 1, \text{ sur haut; } u = -1, \text{ sur bas,} \\ u|_{\Omega_1 \cup \Omega_3} \text{ périodique en } x \end{cases}$$

où

$$A(y) = \begin{cases} A^1 & \text{si } y \in \Omega_1 \cup \Omega_3, \\ A^2 & \text{si } y \in \Omega_2 \end{cases}$$

où  $A^1 \neq A^2$ .

Prenons le cas  $A^1 = 1$  et  $A^2 = 0.1$ . Nous avons résolu itérativement ce problème par les méthodes de Schwarz et d'Aitken-Schwarz avec le maillage non-conforme de taille  $256 \times 76$  pour  $\Omega_1$ ,  $63 \times 63$  pour  $\Omega_2$ ,  $256 \times 76$  pour  $\Omega_3$  dont un gros plan est représenté dans la figure 5.9. L'erreur que nous prenons en compte est l'erreur itérative  $e^{n+1} = \|u_{|\text{Nord}}^{n+1} - u_{|\text{Nord}}^n\|_\infty$ .

Le seuil de convergence de l'algorithme est ici fixé à  $10^{-8}$ .

L'algorithme de Schwarz est sensible à la régularisation effectuée autour des singularités. Ainsi, il ne converge pas si le nombre de points interpolés par le polynôme de Hermite autour des singularités est insuffisant cf. tableau 5.3. Même lorsque la régularisation est suffisante et permet la convergence, le comportement de la convergence de l'algorithme de Schwarz est modifié. Il n'est pas linéaire au départ comme le montre la figure 5.11. Sa pente de convergence est "accélérée" dans un premier temps puis redevient classique, c'est

TAB. 5.3 – Convergence des algorithmes de Schwarz et Aitken-Schwarz en fonction de la régularisation

taille régularisation	4	8	16	30	32
# it. Schwarz	div.	div.	div.	424	215
# it. Aitken-Schwarz	94	13	13	13	13

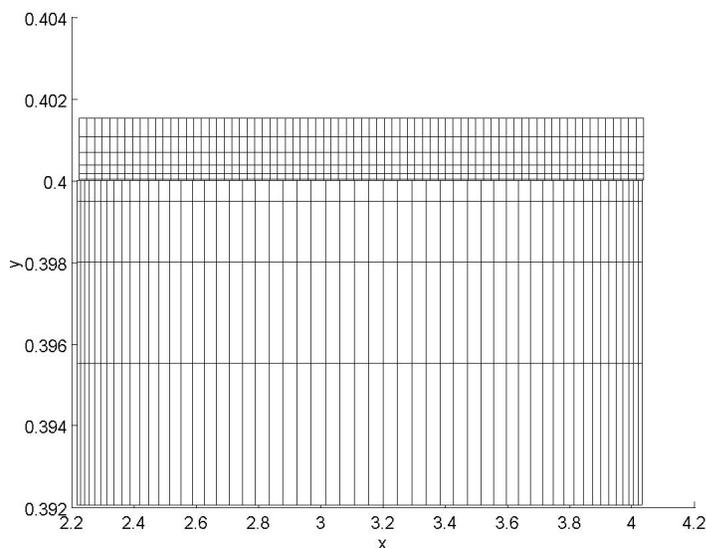


FIG. 5.9 – Zoom sur le maillage structuré non conforme utilisé lors de la résolution de problèmes non convexes

à dire relativement lente. Nous pouvons constater sur la figure 5.12 qu'ici encore, nous conservons la continuité de notre solution sur les interfaces malgré la non conformité du maillage et des coefficients. L'algorithme d'Aitken-Schwarz est beaucoup moins sensible à la régularisation que l'algorithme de Schwarz comme le montrent les résultats du tableau 5.3. Non seulement il converge quelle que soit la taille de la régularisation par Hermite, mais le nombre d'itérations nécessaire pour converger se stabilise très vite. L'accélération par Aitken donne de bons résultats : l'algorithme de Schwarz converge en 215 itérations tandis que l'algorithme de Aitken-Schwarz converge en 13 itérations seulement (cf. Figures 5.10 et 5.11) avec 32 points interpolés par le polynôme d'Hermite autour des singularités sur les interfaces. Nous avons ainsi constaté la robustesse de l'algorithme de Aitken-Schwarz avec régularisation par rapport à l'algorithme de Schwarz avec régularisation.

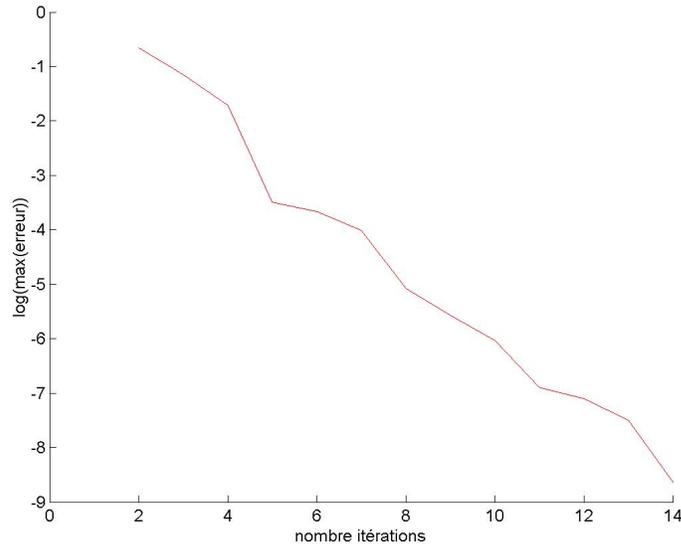


FIG. 5.10 – Erreur itérative sur l’interface physique en  $\|\cdot\|_{L^\infty}$  accélérée par Aitken pour le problème  $P_H$ ,  $A^1 = 1$ ,  $A^2 = 0.1$

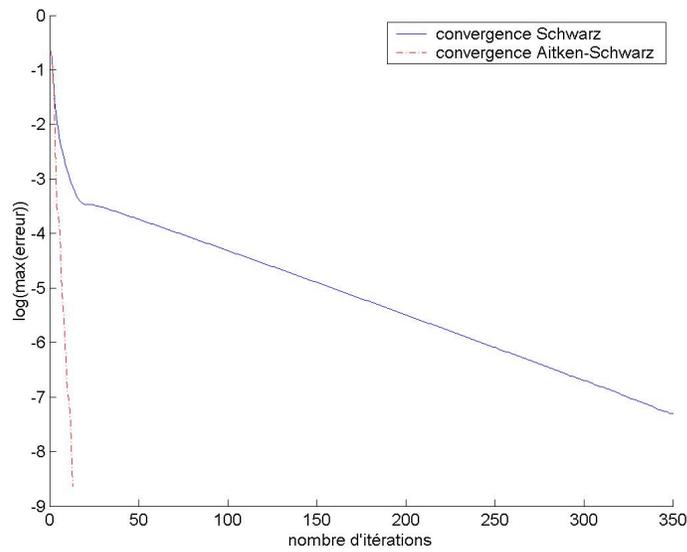


FIG. 5.11 – Comparaison entre les erreurs itératives sur l’interface physique en  $\|\cdot\|_{L^\infty}$  des algorithmes de Schwarz et de Aitken-Schwarz pour le problème  $P_H$ ,  $A^1 = 1$ ,  $A^2 = 0.1$

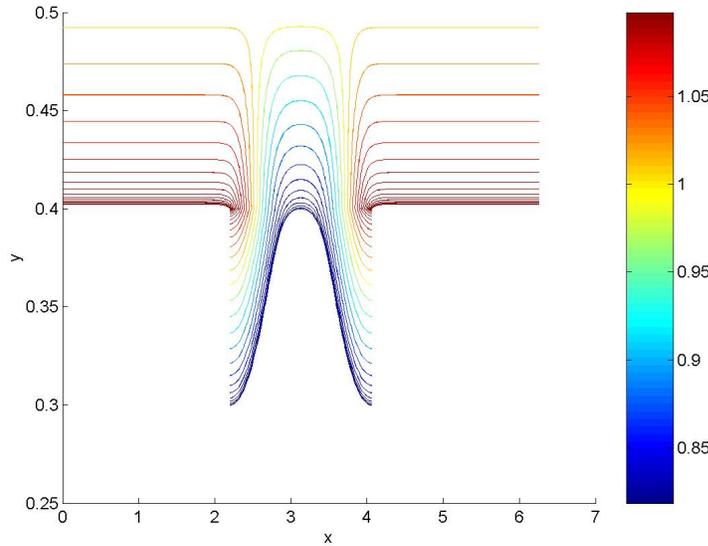


FIG. 5.12 – Isovaleurs autour de l’interface artificielle pour le problème  $P_H$ ,  $A^1 = 1$ ,  $A^2 = 0.1$

## 5.5 Problèmes auxiliaires

Nous avons défini les problèmes auxiliaires par (2.23), (2.21) et (2.22). Ces problèmes font partie de l’ordre 1 du développement asymptotique que nous avons effectué dans la section 2.4. Ce sont des problèmes stationnaires, définis en champ proche, dans la bande  $H_\epsilon$ . Le problème auxiliaire  $w_\epsilon$ , en particulier, va représenter les oscillations en temps court dues au relachement des conteneurs. Ils se doivent d’être approchés de manière particulièrement précise de façon à ce que cette précision reste toujours inférieure à l’ordre  $O(\epsilon)$  de l’approximation. De plus, l’approximation d’ordre 1 (2.20) est constituée en champ proche de divers éléments définis sur des domaines différents. Ainsi,  $c_\epsilon^0$ ,  $\frac{\partial}{\partial x_k} c_\epsilon^0$ ,  $k = 1, 2$  sont définis sur  $\hat{\Omega}_\epsilon^T$ ,  $\chi_\epsilon^k$ ,  $\rho_\epsilon^k$ ,  $w_\epsilon$ ,  $k = 1, 2$  sont définis sur  $H_\epsilon$ . Ces éléments sont donc représentés sur des grilles différentes et des interpolations ou des projections d’une grille à une autre sont nécessaires pour représenter  $c^1$  sur une même grille. Nous aimerions profiter de la qualité de l’approximation spectrale pour pouvoir réaliser ces transferts de données de manière précise. Nous souhaitons enfin adopter une méthode alternative à la méthode des éléments finis tenant compte du caractère périodique du domaine de simulation. C’est pourquoi les méthodes spectrales semblent être adaptées. Les problèmes auxiliaires sont définis sur un domaine non convexe et rentrent bien dans le cadre de la méthode par décomposition de domaine que nous avons développée dans la section 5.

On rappelle que les problèmes auxiliaires peuvent être représentés par l’équation type suivante :

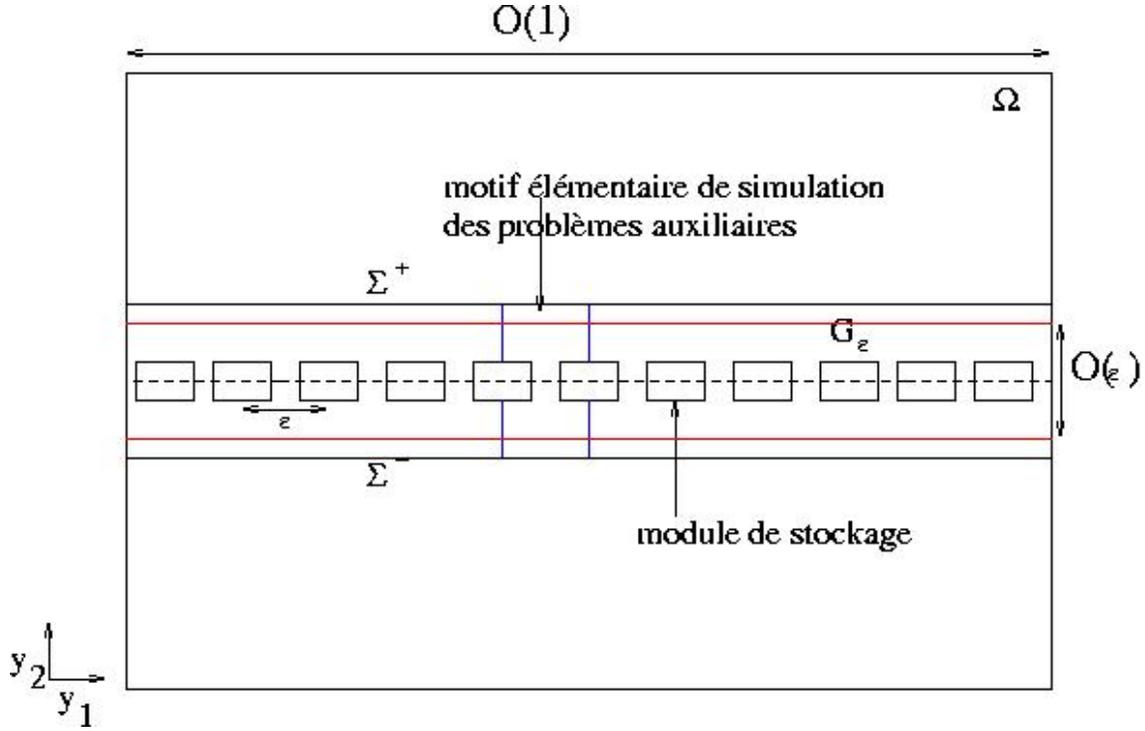


FIG. 5.13 – Dans une coupe verticale 2D du domaine  $\Omega$  avec disposition périodique des modules. Motif périodique

$$II \quad \begin{cases} -\nabla \cdot (A^\epsilon \nabla u) = f & \text{dans } G_\epsilon \\ n \cdot (A^\epsilon \nabla u) = q_1 & \text{sur } \partial M_\epsilon \\ u \text{ est 1-périodique en } y_1 \\ \lim_{y_2 \rightarrow \infty} A^\epsilon \nabla u = q_2 \end{cases} \quad (5.20)$$

où  $M_\epsilon$  est un module de stockage. Nous simulerons le problème uniquement dans un motif périodique comme représenté sur la figure 5.13.

### 5.5.1 Les problèmes spécifiques posés par les problèmes auxiliaires par rapport à notre méthodologie

Nous voulons appliquer l'algorithme 5.3.1 décrit dans la section 5.3.2 pour résoudre les problèmes auxiliaires dont les solutions sont définies à une constante près. Les difficultés rencontrées sont de trois ordres :

- Les sous-problèmes 1 et 3 ont leurs solutions fixées à une constante près. Comme nous résolvons dans l'espace des modes, cette difficulté se traduit par le fait que le problème vérifié par le mode 0 de la solution est mal posé.

- Les conditions aux limites des sous-problèmes 1 et 3 sont soit des conditions périodiques, soit des conditions de Neumann. Il en résulte la condition de compatibilité des flux sur les bords des sous-domaines 1 et 3 suivante :

$$\int_{\Gamma_N} \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \quad (5.21)$$

où  $\Gamma_N$  représente l'ensemble des bords dont les conditions aux limites sont de type Neumann.

- La configuration géométrique et la répartition des coefficients de diffusion selon les sous-domaines, en l'occurrence, constants partout, font diverger la méthode de Schwarz. Nous avons vu cependant dans la section 5.4.1 que l'algorithme d'Aitken-Schwarz parvient à converger, au moins dans certains cas.

### 5.5.2 Condition de compatibilité de flux et algorithme de décomposition de domaine

Nous allons tenter d'éclaircir un peu les problèmes de compatibilité de flux pour notre méthodologie. Dans un premier temps, appliquons la décomposition en trois sous-domaines, illustrée Figure 5.1 pour les problèmes auxiliaires (2.26) et (2.23).

Avec ces nouvelles notations, on doit résoudre le problème (5.22) :

$$(IV) \quad \begin{cases} -\nabla \cdot (A_h \nabla u) = 0 & \text{dans } G_\epsilon, \\ \frac{\partial u}{\partial n} = -(n \cdot e_k) * A_{22}^{h-1} & \text{sur } \Gamma_i^{+-}, i = 1, \dots, 3, \\ u \text{ est 1-périodique en } y_1, \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0, & \text{sur haut} \cup \text{bas.} \end{cases} \quad (5.22)$$

#### Condition de compatibilité de flux

Nous devons résoudre itérativement le schéma (P<sub>1</sub>), (P<sub>2</sub>) et, (P<sub>3</sub>) décrit dans la section 5.2.3. Si (P<sub>1</sub>) et (P<sub>3</sub>) vérifient la condition de compatibilité du flux (5.21), alors ils ont une solution définie à une constante près. Voyons comment assurer la relation (5.21).

Pour  $\Omega_1$ ,

$$\int_{\partial\Omega_1} \frac{\partial u_1^{n+1/2}}{\partial n} d\Gamma = 0 \Leftrightarrow \int_{\text{Nord}} \frac{\partial u_1^{n+1/2}}{\partial n} d\Gamma + \int_{\Gamma_1^+ \cup \Gamma_1^-} (-n \cdot e_k) * A_{22}^{-1} = 0$$

c'est à dire :

$$\int_{\text{Nord}} \frac{\partial u_2^n}{\partial n} = \int_{\Gamma_1^+ \cup \Gamma_1^-} (n \cdot e_k) * A_{22}^{h-1} \quad (5.23)$$

- Si  $k = 1$ ,  $n \cdot e_k = 0$  et  $u, u_1^n, u_2^n, u_3^n$  sont impaires en  $y_1$ . La relation (5.23) est toujours vérifiée.
- Si  $k=2$ , on a :

$$\int_{\text{Nord}} \frac{\partial u_2^n}{\partial n} d\Gamma = -(|\Gamma_1^+| + |\Gamma_1^-|) A_{22}^{h^{-1}} \quad (5.24)$$

$$\int_{\text{Sud}} \frac{\partial u_2^n}{\partial n} d\Gamma = (|\Gamma_3^+| + |\Gamma_3^-|) A_{22}^{h^{-1}} \quad (5.25)$$

Voici l'algorithme 5.5.1 proposé par O. Gipouloux tenant compte des relations 5.24 et 5.25 dans l'algorithme d'Aitken-Schwarz pour vérifier les conditions de compatibilités de flux dans les sous-domaines concernés.

**Algorithme 5.5.1** Poser  $u_2^0 = -\frac{|\Gamma_1^+| + |\Gamma_1^-|}{|\text{Nord}|} A_{22}^{h^{-1}} y_2 u_2^0$  est impaire en  $y_2$  et satisfait (5.24) et (5.25).

POUR  $n=0$  appliquer jusqu'à convergence :

- (a) Connaissant  $u_2^n$  satisfaisant (5.24) et (5.25), on résout  $(P_1)$  et  $(P_3)$ . On calcule  $u_1^n = u_1^n - C y_{20}$  et  $u_3^n = u_3^n - C y_{2N}$ ,
- (b) on résout  $(P_2)$  et ensuite, on ajuste  $u_2^n$  par  $u_2^n = u_2^n + C y_2$  avec :

$$\begin{aligned} C &= \frac{-\int_{\text{Nord}} \frac{\partial u_2^n}{\partial y_2} - [|\Gamma_1^+| + |\Gamma_1^-|] A_{22}^{h^{-1}}}{|\text{Nord}|} \\ &= \frac{-\int_{\text{Sud}} \frac{\partial u_2^n}{\partial y_2} - [|\Gamma_3^+| + |\Gamma_3^-|] A_{22}^{h^{-1}}}{|\text{Sud}|} \end{aligned} \quad (5.26)$$

FIN POUR.

### 5.5.3 Application aux problèmes (2.21) et (2.23), $k=1$

Nous avons vu dans la section précédente que la condition de compatibilité de flux est automatiquement vérifiée pour les sous-problèmes 1 et 3 dans le cas d'une solution impaire en  $x$ . D'autre part ces sous-problèmes sont a priori mal posés, leurs solutions sont fixées à une constante près. Nous résolvons dans l'espace des modes, cette difficulté se traduit alors par le fait que le problème vérifié par le mode 0 est mal posé. Les problèmes (2.21) et (2.23),  $k=1$ , ont des solutions impaires en  $x$  donc  $\hat{u}_{i,0}(y) = 0 \forall y$ ,  $i = 1, 3$ . Nous résolvons (2.23),  $k=1$  par l'algorithme 5.3.1 avec un maillage de taille  $256 \times 76$  pour  $\Omega_1$ ,  $63 \times 63$  pour  $\Omega_2$ ,  $256 \times 76$  pour  $\Omega_3$  dont un gros plan est représenté dans la figure 5.9. La solution est représentée sur la Figure 5.14. L'accélération de la convergence itérative de la méthode est illustrée dans l'espace des modes, (respectivement dans l'espace physique) sur la Figure 5.15 (respectivement sur la Figure 5.16).

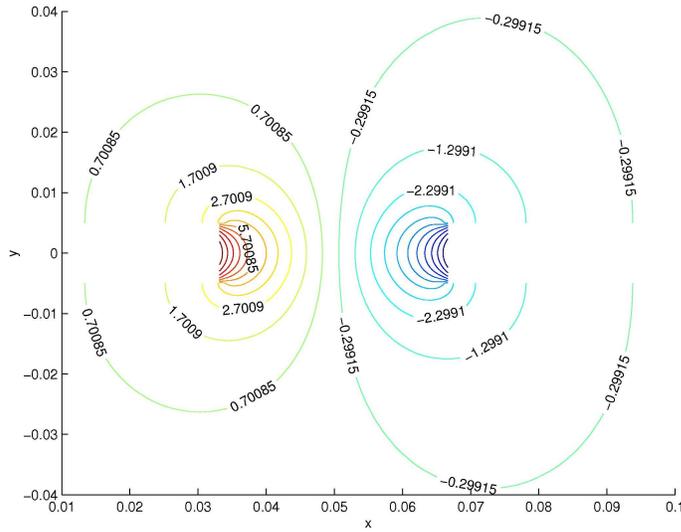


FIG. 5.14 – Isovaleurs de la solution du problème (2.23),  $k=1$

#### 5.5.4 Les problèmes auxiliaires (2.21) et (2.23), $k=2$

Ces problèmes ont des solutions impaires en  $y$ . Nous avons résolu (2.23),  $k=2$ , par éléments finis de Lagrange d'ordre 2 par Freefem [2] avec un maillage triangulaire de taille 1454. La solution est représentée Figure 5.17.

Nous voulons résoudre le problème (2.23) grâce aux algorithmes 5.3.1 (pour pouvoir le résoudre par méthodes spectrales par collocation) et 5.5.1 (pour préserver la compatibilité de flux des sous-problèmes 1 et 3). L'algorithme que nous aimerions résoudre devient alors :

**Algorithme 5.5.2** Poser  $u_2^0 = -\frac{|\Gamma_1^+| + |\Gamma_1^-|}{|\text{Nord}|} A_{22}^{h-1} y_2$   $u_2^0$  est impaire en  $y_2$  et satisfait (5.24) et (5.25).

- (a) Connaissant  $u_2^n$  satisfaisant (5.24) et (5.25), on résout  $(P_1)$  et  $(P_3)$ ,
- (b) On calcule  $\hat{u}_{j,0}^n = \hat{u}_{j,0}^n - \frac{C y_{20}}{M+1}$ ,  $j = 1, 3$  et  $\hat{u}_{3,0}^n = \hat{u}_{3,0}^n - \frac{C y_{2N}}{M+1}$ ,  $j = 1, 3$ , puis projection spectrale sur discrétisation Gauss-Lobatto de la solution itérée  $u_i^n$ ,  $i = 1, 3$ , représentée par ses modes de Fourier, d'après la formule (3.89),
- (c) on résout  $(P_2)$
- (d) On calcule  $u_2^{n+1/2}$  par  $u_2^{n+1/2} = u_2^{n+1/2} + C y_2$  avec :

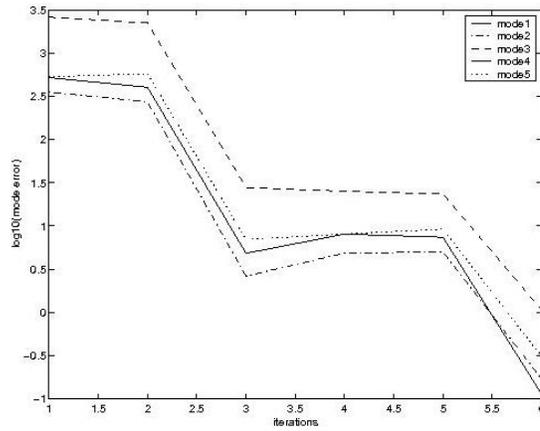


FIG. 5.15 – Accélération de la convergence itérative modale pour le problème (2.23) en  $\|\cdot\|_\infty$ ,  $k=1$

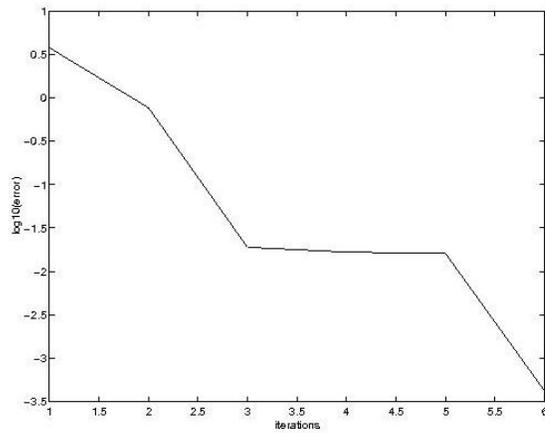


FIG. 5.16 – Accélération de la convergence itérative pour le problème (2.23) en  $\|\cdot\|_\infty$ ,  $k=1$

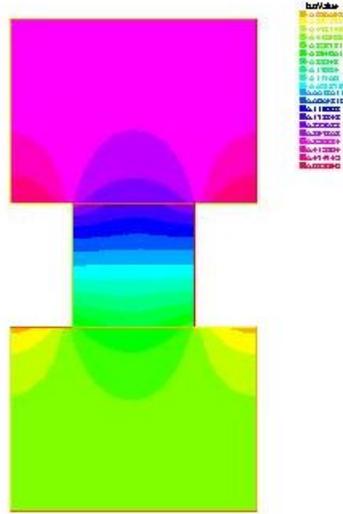


FIG. 5.17 – Isovaleurs de la solution du problème (2.23),  $k=2$ , résolu par GMRES (à gauche) et résolu par le schéma

$$\begin{aligned}
 C &= \frac{-\int_{Nord} \frac{\partial u_2^n}{\partial y_2} - [|\Gamma_1^+| + |\Gamma_1^-|] A_{22}^{h^{-1}}}{|Nord|} \\
 &= \frac{-\int_{Sud} \frac{\partial u_2^n}{\partial y_2} - [|\Gamma_3^+| + |\Gamma_3^-|] A_{22}^{h^{-1}}}{|Sud|} \tag{5.27}
 \end{aligned}$$

- (e) Calcul des dérivées normales de la solution  $u_2^{n+1/2}$  sur Nord et Sud par approximation de Chebychev aux noeuds de Gauss-Lobatto
- (f) Projection spectrale de ces dérivées sur discrétisation régulière d'après la formule (3.91),
- (g) Application du procédé de régularisation décrit dans la section 5.3.1 à  $\tilde{q}_2$ ,
- (h) Calcul des modes de Fourier de  $\tilde{q}_2$  par FFT,
- (i) toutes les trois itérations, reconstitution des matrices de transfert pour chaque mode,  $k = 0, \dots, M$  par (3.85) et calcul des modes des nouvelles traces itérées  $\hat{u}_{i,k}^n$ ,  $k = 0, \dots, M$ ,  $i = 1, 3$  par Aitken sur les interfaces par la relation (3.72).

Avec l'algorithme 5.5.2, les problèmes relatifs aux modes 0 dans les sous-domaines  $\Omega_1$

et  $\Omega_3$  doivent être bien posés.  $\hat{u}_{i,0}$  vérifie le problème :

$$(M0) \left\{ \begin{array}{l} -A^{nh} \frac{\partial^2 \hat{u}_{i,0}}{\partial y^2}(y) = 0 \quad \forall y \in [-1, 1], \quad i = 1, 3, \\ \frac{\partial \hat{u}_{i,0}}{\partial y}(y_0) = 0 \\ \frac{\partial \hat{u}_{i,0}}{\partial y}(y_{N_y}) = \hat{q}_{2,0} \end{array} \right. \quad (5.28)$$

$A^{nh}$  est un tenseur constant donc la solution  $u_i = u|_{\Omega_i}$ ,  $i = 1, 3$  est de classe  $H^1(\Omega_i)$ ,  $i = 1, 3$  telle que la dérivée soit périodique. Alors  $\hat{u}_{i,0}$  est tout simplement de la forme  $\hat{u}_{i,0}(y) = \alpha y^2 + \beta y + \gamma$ ,  $(\alpha, \beta, \gamma) \in \mathbb{C}^3$ . Le problème (M0) implique  $\hat{q}_{2,0} = 0$  et donc  $\hat{u}_{i,0} \equiv 0$ , c'est à dire que les solutions  $u_i^\infty$ ,  $i = 1, 3 \in H^2(\Omega_i)$  déterminées par notre algorithme sont nécessairement à moyenne nulle. Or la solution globale ne vérifie pas cette condition. Ici, notre hypothèse de séparabilité des variables des solutions  $u_i = u|_{\Omega_i}$ ,  $i = 1, 3$  n'est pas possible. La méthodologie que nous avons développée dans ce chapitre n'est donc pas adaptée à ce type de problème.

## 5.6 Conclusion

Nous avons appliqué la méthodologie décrite au chapitre 3 à des problèmes non convexes résolus par méthodes spectrales par collocation. Moyennant une régularisation des conditions limites relatives aux interfaces artificielles, cf. section 5.3.1, nous avons pu obtenir des résultats satisfaisants dans de nombreux cas :

- Nous avons numériquement obtenu une méthode d'ordre 2.5. Elle est théoriquement d'ordre 3 et la différence est due à la régularisation par le filtre modal des conditions aux limites et des solutions itérées.
- Nous avons montré numériquement, dans le cadre de notre étude, c'est à dire résolution de problèmes elliptiques non convexes périodiques par des méthodes spectrales par collocation, que la convergence de l'algorithme d'Aitken-Schwarz dépend moins de la procédure de régularisation que nous avons mise au point que l'algorithme de Schwarz classique.
- L'accélération de la convergence par la méthode d'Aitken-Schwarz a atteint jusqu'à un taux de 16.5 pour un problème elliptique hétérogène dans ses coefficients.

Nous avons également étudié le cas de problèmes elliptiques dont les conditions aux limites sont soit périodiques, soit de Neumann. Nous avons défini un algorithme permettant à tous les sous-domaines concernés de vérifier la condition de compatibilité du flux 5.21. Dans le cadre d'une utilisation classique de la méthode de Fourier par collocation, en utilisant la méthode de séparation des variables, nous avons montré que notre algorithme converge vers la bonne solution pour des solutions impaires dans la direction où la solution est périodique. Dans les autres cas, nous ne pouvons pas procéder à une séparation des variables des solutions locales dans certains sous-domaines et donc, nous ne pouvons pas,

en pratique, simuler par la méthode de Fourier par collocation dans ces sous-domaines. Malgré la méthodologie que nous avons développée dans ce chapitre, les méthodes spectrales par collocation semblent inadaptées pour simuler les problèmes auxiliaires. Il faudrait enfin approfondir la recherche sur une résolution en parallèle par notre algorithme. Faute de temps, nous n'avons pas trouvé de combinaison satisfaisante entre les deux niveaux de parallélisation possibles (parallélisations de la méthode de décomposition de domaine et de la résolution dans divers sous-domaines).





# Chapitre 6

## Conclusion

Cette thèse traite des simulations multidomaines du transport par convection et diffusion en milieux poreux appliquées au stockage de déchets radioactifs en formation géologique profonde. Deux aspects ont été abordés. Premièrement, un aspect modélisation par homogénéisation a été étudié. Il permet de prendre en compte les termes sources, dont la taille caractéristique est la petite échelle, par des moyens simples et rapides dans le cadre d'une simulation de transport à grande échelle. Deuxièmement, une méthodologie numérique a été développée reposant sur l'algorithme de Neumann-Dirichlet, dont la convergence a été accélérée par la technique de Aitken.

Du point de vue de la modélisation, deux modèles ont été testés, un modèle homogénéisé représentant la concentration moyenne en radionucléides sur le long terme et un modèle par développement asymptotique d'ordre 1. Ce dernier permet théoriquement de représenter les oscillations de la concentration en radionucléides lors du relachement des conteneurs en champ proche ainsi que la concentration moyenne en temps long. Les deux modèles ont été construits à partir d'une adimensionalisation initiale de la longueur totale du domaine d'étude. Quelques conclusions sont apportées.

- Les modèles que nous avons étudiés reposent sur l'hypothèse de périodicité spatiale et un nombre important de certains éléments constituant le site de stockage. Nous avons constaté numériquement que cette dernière hypothèse prenait sens lorsque l'on considérait environ trente de ces éléments. Nous avons a priori considéré les modules constituant ce site. Mais il est rarement envisagé un nombre aussi important de modules pour un site de stockage. En revanche, il pourrait être considéré des éléments de plus petite échelle. Par exemple les alvéoles de stockage, pour lesquelles l'hypothèse de grand nombre d'éléments est tout à fait applicable.
- Dans le cas d'une simulation de ces deux modèles avec une diffusion hétérogène, nous avons constaté les phénomènes suivants :
  - (1) Théoriquement, lorsqu'il s'agit de décrire le comportement de la concentration en temps long, ces deux modèles prennent en compte uniquement la diffusion des couches adjacentes. Ils n'ont pas été conçus pour décrire le phénomène de rétention importante de la concentration des radionucléides à l'intérieur de

la couche hôte aussi important que la rétention correspondant aux données fournies par les concepts 2005. En effet, toute trace de radionucléide reste à l'intérieur de cette couche durant une très grande période de temps (20000 ans), trop grande pour à la fois l'adimensionnalisation utilisée qui était basée sur la diffusion dans tout le domaine (longueur caractéristique équivalente à la hauteur totale du domaine) et aussi pour la distinction petit temps / grand temps utilisée ici. Nous pouvons améliorer la qualité de la simulation en tenant compte de l'hétérogénéité de la diffusion fortement contrastée dans et hors de la couche hôte.

- (2) Le modèle d'ordre 1 décrit d'une part le comportement moyen de la concentration en radionucléide en temps long et d'autre part les oscillations de la concentration près du site de stockage lors du relâchement des conteneurs. La continuité des flux que l'on impose, se traduit par un "recollement" à une distance théorique calculée. Cette distance est en pratique beaucoup trop importante pour décrire correctement le phénomène de rétention des radionucléides à l'intérieur de la couche hôte. Nous avons donc essayé d'améliorer la qualité des résultats obtenus en diminuant numériquement cette distance.
- Les points précédents proviennent d'une erreur sur l'adimensionnalisation initiale. Comme le relâchement éventuel se produit dans une couche de très faible diffusivité, il suffit d'effectuer un nouveau travail d'homogénéisation des termes source en partant d'une adimensionnalisation de l'épaisseur  $l$  de la couche hôte au lieu de l'épaisseur  $L$  du domaine tout entier. Il faut remarquer qu'alors, les résultats de l'homogénéisation et des développements asymptotiques resteront analogues à ceux obtenus dans [7] excepté que la couche hôte, ayant maintenant une épaisseur adimensionnée de 1, ne disparaît pas dans le changement d'échelle.

Du point de vue numérique, nous avons considéré le très classique algorithme de Neumann-Dirichlet. Notre ligne de conduite a été d'associer plusieurs techniques numériques pour obtenir un algorithme plus rapide que celui de Neumann-Dirichlet, dans le cadre de maillages non conformes. Nous avons d'une part utilisé la technique d'Aitken pour accélérer la méthode de Neumann-Dirichlet elle-même. Nous avons d'autre part cherché à accélérer les résolutions locales des divers sous-domaines. Pour ce faire, nous avons utilisé des méthodes de Krylov dont nous avons amélioré le comportement soit en les préconditionnant, soit en utilisant une technique de projection. Enfin, nous avons cherché à établir une version parallèle de notre méthodologie. Nous avons testé notre méthodologie dans deux configurations :

- (i) un couplage méthode de Chebychev / méthode de Fourier appliqué à des problèmes elliptiques non convexes à coefficients hétérogènes,
- (ii) Un couplage éléments finis / méthode de Chebychev par collocation appliqué à un problème de convection-diffusion à coefficients hétérogènes.

Nous avons justifié la propriété de linéarité de la convergence dans le cas continu pour des problèmes linéaires elliptiques. Cette propriété nous permet d'appliquer la technique

d'Aitken pour accélérer l'algorithme de Neumann-Dirichlet. En deux dimensions, nous devons toutefois décomposer la solution restreinte sur les interfaces artificielles dans une base orthonormale de manière à éviter toute influence spatiale sur la convergence. Nous considérons alors la convergence linéaire des modes. Dans le cas discret, l'erreur de discrétisation ne doit pas perturber l'erreur de la méthode pour préserver la linéarité du comportement de la convergence de Neumann-Dirichlet. Nous avons choisi d'utiliser la projection spectrale en raison de sa précision pour des fonctions très régulières. Nous pouvons résumer la procédure que nous appliquons sur les interfaces artificielles toutes les trois itérations de l'algorithme de Neumann-Dirichlet jusqu'à convergence ainsi :

- (a) On décompose la solution restreinte aux interfaces artificielles dans une base déterminée, notée  $B$ , soit dans une base de Fourier, soit dans une base Chebychev. Dans ce dernier cas, nous projetons dans une base de Fourier. Nous sommes obligés de prolonger cette fonction de manière périodique par une méthode de régularisation qui induit finalement une solution itérée de classe  $C^2$  sur les interfaces artificielles. Cette régularité peut paraître un peu faible mais nous avons vu qu'elle était suffisante pour pouvoir accélérer. Elle a surtout l'intérêt d'avoir un temps d'exécution peu élevé. Il faut noter que cette procédure de régularisation peut conduire à un couplage des modes entre eux.
- (b) Nous supposons que ce couplage de modes est faible et nous le négligeons. On approxime alors la matrice  $P$  associée à l'opérateur d'erreur sur les interfaces artificielles dans la base  $B$ .
- (c) Nous calculons la solution modale sur les interfaces artificielles à partir de  $P$ . Si besoin est, nous reconstituons la solution dans l'espace physique.

La configuration (i) a permis d'apporter les conclusions suivantes sur l'algorithme d'Aitken-Schwarz :

- (1) Il a permis un facteur de gain de 3 à 16 selon les cas en terme de nombre d'itérations pour converger.
- (2) Il peut converger vers la bonne solution même lorsque l'algorithme initial diverge.
- (3) Pour permettre la convergence des deux algorithmes, nous avons dû appliquer la procédure de régularisation au second membre local de notre équation. Elle a une influence importante sur la convergence de l'algorithme de Schwarz (rappelons que nous le considérons dans notre cas comme un cas particulier de l'algorithme de Neumann-Dirichlet). En revanche, l'algorithme de Aitken-Schwarz s'est avéré beaucoup moins dépendant de cette régularisation pour converger.
- (4) Nous avons numériquement observé que l'algorithme Aitken-Schwarz est une méthode numérique d'ordre 2.5.
- (5) La méthodologie que nous avons développée impose certaines contraintes tant pour les conditions aux limites des opérateurs considérés que pour la nature de ces problèmes notamment en raison du découplage des modes. Parfois, nous avons développé des stratégies efficaces pour y faire face. Mais notre méthodologie s'est avérée inadaptée

pour certains problèmes aux dérivées partielles. La question d'adaptation possible de notre méthodologie à certains problèmes développés dans la section modélisation reste encore ouverte.

La configuration (ii) a confirmé les points (1) et (4) de nos observations.

Nous pensons que quelques améliorations peuvent être apportées :

- La procédure d'Aitken pour les maillages pourrait être améliorée dans son point (a). En utilisant une FFT en maillage non conforme, nous pourrions approximer la matrice de transfert d'erreur  $P$  dans la même base orthonormale que la trace de la solution itérative sur les interfaces artificielles. Cela améliorerait sans doute la qualité de la matrice  $P$  et donc l'accélération consécutive par Aitken.
- L'algorithme de Schwarz généralisé a également un comportement de sa convergence linéaire. Les conditions de Robin prises en compte sur l'interface permettent à tous les problèmes locaux d'être bien posés. Il pourrait donc être intéressant d'appliquer la technique d'Aitken à cet algorithme.
- La technique d'Aitken n'est pas la seule à pouvoir tirer partie du comportement linéaire de la convergence de l'algorithme de Neumann-Dirichlet. De manière alternative, nous pourrions tenter d'accélérer la convergence de Neumann-Dirichlet par la technique des E-Algorithmes dans les cas scalaire [94, 95, 97] et vectoriel [96].

Le cas (ii) a également été l'occasion de combiner diverses accélérations de la convergence de la méthode de Krylov ainsi que de mettre en oeuvre une version parallèle de notre méthodologie.

D'une part, la méthode des éléments finis mixtes a été utilisée pour simuler un modèle de convection-diffusion avec des coefficients hétérogènes. La matrice étant non symétrique, la méthode GMRES est utilisée pour résoudre le système linéaire. La méthode de Krylov est rendue robuste aux hétérogénéités des coefficients et des maillages non réguliers grâce à un préconditionneur alliant les méthodes de Schwarz additive et grille grossière [52, 51]. D'autre part, la méthode spectrale de Chebychev par collocation sert à simuler un problème de diffusion homogène et le système linéaire est résolu par une méthode CGR. La matrice associée est préconditionnée par une matrice adaptée à sa configuration, ce qui suffit à obtenir un conditionnement satisfaisant. Mais la méthode CGR est surtout accélérée par une technique de projection. Il s'agit tout simplement de conserver la base de Krylov calculée lors des itérations de Krylov précédentes et de projeter la solution dans cette base avant d'appliquer l'itération de Krylov. Cette technique requiert plus de place en mémoire, mais en utilisant les informations obtenues préalablement, mais nous avons vérifié qu'elle accélère la convergence de la méthode CGR.

Parlons enfin de l'aspect parallélisation. Il s'agit d'une parallélisation à deux niveaux, celui de la parallélisation de la méthode de Neumann-Dirichlet et celui de la parallélisation des solveurs des sous-domaines.

Les échanges globaux entre les deux solveurs ont une taille du double du nombre des degrés de libertés sur les interfaces artificielles, ce qui est faible. De plus, l'accélération par Aitken permet de limiter le nombre de ces échanges.

La scalabilité du solveur EFM est très satisfaisante. Les ordinateurs à mémoire distribuée

et un nombre important de processeurs sont intéressantes pour les solutions parallèles de larges systèmes EFM. L'augmentation du nombre de processeurs permet d'augmenter la précision du solveur EFM presque linéairement.

Le solveur ES a les caractéristiques suivantes :

- La résolution ne scale pas avec la taille de l'espace de Krylov tandis que la scalabilité est satisfaisante pour la technique de projection. D'autre part, nous avons constaté que la taille de l'espace de Krylov tend vers une limite dans le cadre Neuman-Dirichlet.
- La technique d'Aitken apporte plus d'information qu'une simple itération de Neumann-Dirichlet. Un nombre de vecteurs de Krylov plus important est alors généré après une itération avec Aitken.
- Le solveur ES nécessite une machine parallèle avec une communication interne rapide pour générer les vecteurs de Krylov bien que la technique de projection puisse se contenter d'une communication interne plus lente.

Grâce aux divers outils utilisés, cet algorithme offre non seulement un gain d'un facteur trois pour les itérations Neumann-Dirichlet, mais également un gain de facteur trois en temps d'exécution de l'algorithme que nous avons développé. Le solveur EFM est plus rapide que le solveur ES. Un équilibre des charges doit être recherché. Le solveur EFM peut notamment se contenter d'une machine distribuée à communications lentes. Une solution efficace pourrait être réalisée par des calculs distribués distants sur des architectures adaptées à chacun des solveurs. Le package MPICH-Madeleine [101] pourrait notamment être testé sur ce type d'algorithme.



# Bibliographie

- [1] Applied Clay Science, Int. Journal on the Appl. and Techno. of Clays and Clay Minerals, 26, papers from the ANDRA meeting, 2004.
- [2] <http://www.freefem.org>
- [3] I. Babuska *Homogenization and its applications, mathematical and computational problems, Numerical Solutions of Partial Differential Equations*, Academic Press, New-York, 1976, pp. 89–116
- [4] A. Bensoussan, J.L. Lions, G. PaPanicolau, *Asymptotic Methods in periodic structures*, North Holland, Amsterdam 1978
- [5] L. Tartar, *Topics in nonlinear analysis*, Publications Mathématiques Orsay 78.13, Université Paris Sud
- [6] A. Bourgeat, E. Marusic-Paloka, O. Gipouloux *Mathematical modeling of an underground waste disposal site*, Math. CRAS Mécanique, 305(5) :337–376, (2002).
- [7] A. Bourgeat, E. Marusic-Paloka, O. Gipouloux *Modeling of an underground waste disposal site by upscaling*, Math. Meth. in Appl. Sci., 27(4) :381–403, (2004).
- [8] J. Bear *Hydraulic of groundwater*, Mc Grew-Hill Series in Water Resources ans Environmental Engineering, New-York, 1979.
- [9] D. Cioranescu, J. Saint-Jean Paulin, *Homogenization in open sets with holes*, J. of mathematical Analysis and Application, (71) :590–607,1979
- [10] A. Bourgeat, M. Jurak, A. Piatniski *Averaging a transport equation with small diffusion and oscillating velocity*, Math. Meth. Appl. Sci, 26 :95–117, 2003
- [11] J.L. Lions, *Some Methods in Mathematical Analysis of Systems and their Control*, Science Press Beijing : Gordon and Breach, New-York, 1981
- [12] OA. Oleinik, GA. Iosif'jan, *On the behavior at infinity of Solutions of Second Order elliptic equations in domain with noncompact boundary*, Mathematics of the USSR Sbornik, 40(4) :527–548, 1981
- [13] <http://MoMas.univ-lyon1.fr/> Exercices de qualification de codes
- [14] A. Quarteroni, A. Valli, *Domain decomposition methods for partial differential equations*, Oxford science publication, 1999
- [15] A.Agouzal and N.Debit, *A new approach to domain decomposition methods with non-matching grids*. In : Domain Decomposition Methods in Science and Engineering, John Wiley & Sons, pp.53–63, (1997).

- [16] F.Brezzi and L.Marini, *A three fields domain decomposition method*. Contemp.Math., V.157, pp.27–34, (1994).
- [17] R.Williams, Unification of spectral and inertial bisection. *http : www.cacr.caltech.edu/~roy/papers/index.html*, (1994).
- [18] R.Williams, Performance of dynamic load balancing algorithms for unstructured mesh calculations, *Concurrency*, 3, 457, (1991).
- [19] M. Garbey and D. Tromeur-Dervout, Two level domain decomposition for multi-clusters. In H. Kawarada T. Chan, T. Kako and O. Pironneau, editors, Proc. Int. Conf. on Domain Decomposition Methods DD12, (2001) 325–340.
- [20] M. Garbey. *On some applications of the superposition principle with Fourier basis* *SIAM J. Sci. Comput.*, 22, pp 575–599, 2000
- [21] M. Garbey, D. Tromeur-Dervout. *A new parallel solver for non periodic incompressible Navier-Stokes equations with a Fourier method : application to frontal polymerisation* *J. of Computational Physics*, 145,pp – ,1998
- [22] M. Garbey, D. Tromeur-Dervout. *Parallel Algorithms with local Fourier basis* *J. of Computational Physics*, 173, pp 575–599, 2001
- [23] M. Garbey, D. Tromeur-Dervout. *On some Aitken like acceleration of the Schwarz method* *Int.J. For Numerical Methods In Fluids*, 40(12) :1493–1513, 2002
- [24] S.H. Lui *On Schwarz alternating methods for nonlinear elliptic PDEs*, *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(4) :1506–1523, 1999
- [25] S.H. Lui *On linear monotone and Schwarz alternating methods for nonlinear elliptic PDEs*, *Numer. Math.*, 93 :109–129, 2002
- [26] D.G. Calugaru, D. Tromeur-Dervout, *Non overlapping DDM to solve flow in heterogeneous porous media* DD15, 2003
- [27] J.Baranger, M.Garbey and F.Oudin-Dardun, On Aitken like acceleration of Schwarz domain decomposition method using generalized Fourier. In : *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering*, DDM.org, pp.341–348, (2003).
- [28] J.Baranger, M.Garbey and F.Oudin, Aitken Schwarz method on non-uniform Cartesian grids. Submitted to *SIAM J. of Num. Analysis*.
- [29] J. Baranger, M. Garbey, F. Oudin-Dardun, *Recent Developments on Aitken-Schwarz method* International DD13, 2001
- [30] M.Garbey, Acceleration of the Schwarz method for elliptic problem. Submitted to *SIAM J.Sci.Comp.*
- [31] P.L. Lions, *On the Schwarz alternating method III : A variant for nonoverlapping subdomains* Third International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations, SIAM, pp 202–223
- [32] B. Desprès, P. Joly, J.E. Roberts, *A domain decomposition method for the harmonic Maxwell equations* Iterative Methods in linear algebra, pp. 475–484, Amsterdam, 1992

- [33] F. Nataf, F. Rogier, E. Sturler, *Optimal interface conditions for domain decomposition methods*, Technical Report 301, CMAP, 1994
- [34] M.J. Gander, F. Magoulès, F. Nataf. *Optimized Schwarz methods without overlap for the Helmholtz equation* SIAM J. Sci. Comput., 24(1) :38–60, 2002
- [35] M.J. Gander, C. Japhet, F. Nataf. *The optimized order 2 method, application to convection-diffusion problems* Future generation computer systems, 18(1) :17–30, Elsevier Science, 2001
- [36] A. Schwarz. *Über eine granzubergang durch alternierendes verfahren*, Vierteljahrsschrift der Naturforschenden Gesellschaft in Zürich, 15 :272-286, May 1870
- [37] B. Engquist, Hong-Kai Zhao *Absorbing boundary conditions for domain decomposition*, Appl. num. math.27 :341–365, 1998.
- [38] E. Jenkins, C. Kees, C. Kelley, C. Miller, *An aggregation-based domain decomposition preconditionner for groundwater flow*, SIAM J. of scientific computing, 25 :430–441, 2001
- [39] B. Smith, P. Bjorstad, W. Gropp, *Domain decomposition : parallel multilevel methods for elliptic partial differential equations*, Cambridge university press : Cambridge, 1996.
- [40] L.C. Cowsar, M. Wheeler. *Parallel domain decomposition method for mixed finite elements for elliptic partial differential equations*, Fourth international symposium on domain decomposition methods for partial differential equations, SIAM, Philadelphia : 358–372, 1991.
- [41] L.C. Cowsar, J. Mandel, M. Wheeler, *Balancing domain decomposition for mixed finite elements*, Math. comp. 64(211) :989–1015, 1995.
- [42] Y. Achdou, F. Nataf, *A domain decomposition preconditioner for an advection-diffusion problem*, Comput. Methods appl. Mech. Engr. 184(2-4) : 145–170, 2000.
- [43] Canuto C., Hussaini M.Y., Quarteroni A., Zang T.A. *Spectral Methods in Fluid Dynamics*, Springer-Verlag, 1988
- [44] J.P. Boyd. *Chebyshev and Fourier spectral methods*, Dover, New-York, 2001
- [45] J.P. Boyd, *A comparison of numerical algorithms for Fourier extension of the first, second and third kinds*, J. of Comput. Physics 178, 118–160, 2002.
- [46] Gottlieb D., Shu Chi-Wang, *On the Gibbs Phenomenom and its resolution*, SIAM Revue,39(4) :644–668, 1997.
- [47] Peyret Roger, D.Taylor T. *Computational Methods for Fluid Flow*, Springer-Verlag, 1983
- [48] Gottlieb D., Shu Chi-Wang, *On the Gibbs Phenomenom and its resolution*, SIAM Revue, vol 39 (4),pp.644–668, 1997.
- [49] T. Davis and I. Duff, *An Unsymmetric-Pattern Multifrontal Method for Sparse LU Factorization*, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 18 :140–158, 1997.

- [50] T.Davis and I.Duff, *An Unsymmetric-Pattern Multifrontal Method for Sparse LU Factorization*, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, V.18, pp.140–158, 1997.
- [51] Yu. Vassilevski, *A hybrid domain decomposition method based on aggregation*, *Numer. Linear Algebra Appl.*, 11(4) 327–341, 2004.
- [52] K. Lipnikov and Yu. Vassilevski, *Parallel adaptive solution of 3D boundary value problems by Hessian recovery*, *Comp. Methods Appl. Mech. Engrn.*, 192 1495–1513, 2003.
- [53] P.Raviart and J.Thomas, *A mixed finite element method for 2-nd order elliptic problems*. In : *Mathematical Aspects of Finite Element Methods*, I.Galligani and E.Magenes, eds., *Lecture Notes in Mathematics*, 606, New York, Springer-Verlag, pp.192–315, 1977.
- [54] J. Thomas, *Sur l'analyse des éléments finis hybrides et mixtes*, Thèse de doctorat d'Etat, Université Pierre et Marie Curie, 1977.
- [55] Y.Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, PWS Publishing Co., Boston, 1996.
- [56] G. Edjlali, M. Garbey and D. Tromeur-Dervout, *Interoperability parallel programs approach to simulate 3D frontal polymerization processes*, *J. of Parallel Computing*, 25 (1999) 1161–1191.
- [57] J. Jaffré, V.Martin, J. Roberts, *Modelling fractures and barriers as interfaces for flow in porous media* *SIAM J. for scient. comput.* 26(5) :1667–1691, 2005.
- [58] Y. Achdou, C. Japhet, Y. Maday, F. Nataf *a new cement glue to non conforming grids with Robin interface condition : the finite volume case*, internal CMAP report RI419
- [59] G. Karypis, V. Kumar. *Parallel Threshold-based ILU Factorization*, Army HPC Research Center Minneapolis, MN 55455, technical report 96-061, 1998.
- [60] D. Hysom, A. Pothen, *A scalable parallel algorithm for incomplete factor preconditioning*, *SIAM J. Sci. Comput.*, 22(6), pp. 2194–2215, 2001.
- [61] E. Sturler *Truncation strategies for optimal Krylov subspaces methods* *SIAM J. Numerical.Analysis.*, 36(3), pp. 864–889, 1999.
- [62] R.D. Falgout, U. Meier Yang. *Hypre : a library of high performance preconditionners*, *Lecture Notes in Computer Science*, 2331, pp.632–641, Springer Verlag, 2002.
- [63] P.J.Roache, *Verification an validation in computational Science and Engineering*, Hermosa Publishers, Albuquerque, New-Mexico, 1998.
- [64] G. Chavent, J. Jaffré, *Mathematical models and finite elements for reservoir simulation*, Elsevier Science Publishers B.V., Netherlands, 1986.
- [65] P. Siegel, *Transfert de masse en milieu poreux fortement hétérogène. Modélisation et estimation des paramètres par éléments finis mixtes hybrides et discontinus*, Thèse, Université Louis Pasteur Paris, 1995.

- [66] F. Brezzi, M. Fortin, *Mixed and hybrid finite elements methods*, Springer-Verlag, New-York, 1991.
- [67] J. Douglas, J. Roberts, *Global estimates for mixed methods for second order elliptic equations*, Math. Comp., 44 :39–52, 1985
- [68] K. Salari, P. Knupp, *Code verification by the method of manufactured solutions*, SAND 2000-1444, Sandie National laboratories, Albuquerque, NM, 2000.
- [69] C. Bernardi, N. Debit, Y. Maday, *Coupling finite elements and spectral elements : first results*, Math. Comp. 54 : 21–39, 1990.
- [70] C. Bernardi, Y. Maday, A.T. Patera, *A new non conforming approach to domain decomposition : the mortar element method* Nonlinear approach partial differential equations and their applications. Collège de France Séminar vol. XI (H. Brezis, J.L. Lions eds.) Pitmans Research Notes Mathematics Series 299, Longman, pp 13–51, 1994.
- [71] T. Arbogast, I. Yotov, *A non-mortar mixed finite element method for elliptic problems on non matching multiblock grids* Comput. methods appl. 1997.
- [72] V.I. Agoshkov, V.I. Lebedev, *Poincaré Steklov operators and methods of partition of the domain in variational problems* Comput. processes and systems 2 :173–227, 1985.
- [73] G.C. Hsiao, E. Schnack, W.L. Wendland, *Hybrid coupled finite-boundary element methods for elliptic systems of second order* Comput. Methods Appl. Mech. Engr., 190 :431–485, 2000.
- [74] O. Steinbach *A natural domain decomposition with non matching grids* Bericht 2000/27, SFB 404, Universitat Stuttgart.
- [75] C. Farhat, M. Lesoinne, K. Pierson, *A scalable dual-primal domain decomposition method* Numer. Lin. Alg. Appl., 7 : 687–714, 2000.
- [76] O. Steinbach, *Stability estimates for hybrid coupled domain decomposition methods* Lecture Notes in Mathematics 1809, Springer-Verlag, 2003.
- [77] P. Henrici. *Elements of numerical analysis* John Wiley & Sons Inc., New-York-London-Sydney, 1964.
- [78] C. Wieners. *A parallel Newton multigrid method for high order finite elements and its application to numerical existence proofs for elliptic value problems*, ZAMM Z. Angew. Math.Mech., 76 : 175–180, 1996.
- [79] D. Mac Lean, *Strongly elliptic systems and boundary integral equations*, Cambridge university press, 2000.
- [80] B.N. Khoromskij, G. Wittum, *Numerical Solution of elliptic differential equation by reduction to the interface* Research monograph, LNCSE, N°36, Springer-Verlag 2004.
- [81] R. Burlisch, J. Stoer, *Introduction to numerical analysis*, Texts in applied mathematics 12, Springer-Verlag, 1980.
- [82] C.V. Loan, *Computational Frameworks for the Fast Fourier Transform*, Frontiers in applied mathematics, SIAM, 1992.

- [83] G.H. Golub, C.F. Van Loan, *Matrix Computations*, John Hopkins univ. press, Baltimore 1989.
- [84] P.F. Fischer, *Projections techniques for iterative solution for  $Ax = b$  avec des seconds membres successifs* Comput. Methods applied Mech. Engr. 163(1-4) : pp. 193–204, 1998.
- [85] J. Erhel, F. Guyomarc'h, *An augmented conjugate gradient method for solving consecutive symmetric positive definite linear systems*, SIAM, J. Matrix Anal. Appl. 21(4) :pp. 1279–1299.
- [86] T.F. Chan, W.L. Wan, *Analysis of projection methods for linear systems with multiple right-hand sides*, SIAM J. Sci. Comput. 18(6) : pp. 1698–1721, 1997.
- [87] P. Bjorstad, B. Widlung, *Solving elliptic problems on regions partitioned into substructures*, Elliptic problem solvers II, G. Birkhoff, A. Schoenstadt, eds. ,Academic Press, New-York, 1084, pp. 245–255.
- [88] J. Bramble, J. Pasciak, A. Schatz, *The construction of preconditioners for elliptic problems by substructuring I*, Math. Comp. 47 :pp. 103–134, 1986.
- [89] Q. Dinh, R. Glowinski, J. Périaux, *Solving elliptic problems with application*, Elliptic problem solvers II, G.Birkhoff, A. Schoenstadt, eds. ,Academic Press, New-York, 1084, pp. 395–426.
- [90] D. Funaro, A. Quarteroni, P. Zanolli, *An iterative procedure with interface relaxation for domain decomposition domain methods*, SIAM J. Numer. Anal. 25 :pp. 1213–1236, 1988.
- [91] Q. Du, M.D. Gunzburger, *A gradient method approach to optimization based multidisciplinary simulations and nonoverlapping domain decomposition algorithms*, SIAM J. Numer. Anal. 37 : 1513–1541, 2000.
- [92] J. Xu, J. Zou, *Some nonoverlapping domain decomposition methods*, SIAM Rev. 40 :857–914, 1998.
- [93] [www.llnl.gov/CAS/hypre/](http://www.llnl.gov/CAS/hypre/)
- [94] C. Brezinski, *A survey of iterative extrapolation by the E-algorithm*, Det Kong Norsk Vid Selk, 2 :1–26, 1989.
- [95] T. Havie, *Generalized Neville type extrapolation schemes*, BIT, 19 :204–213, 1979.
- [96] H. Sadon, *Quasilinear vector extrapolation methods*, Linear Algebra App., 190 :71–85, 1993.
- [97] C. Brezinski, R. Zaglia, *Extrapolation methods*, Studies in computational math 2 Theory and practice, NorthHolland, 1991, ISBN 0444 88814.
- [98] A. Guermouche, J-Y. L'Excellent, *Memory based scheduling for a parallel multisolver*, INRIA Report, R5162, 2004.
- [99] J. Frank, C. Vuik, *On the construction of deflation based preconditioners*, SIAM J. Sci. Comput., 23 : 442–462, 2001.

- [100] R.B. Morgan, *A restarted GMRES method augmented with eigenvectors*, SIAM J. Matrix Anal. Appl. 16 :1154–1171, 1995.
- [101] <http://runtime.futurs.inria.fr>