

Estimateur d'erreur *a posteriori* pour la modélisation des écoulements et des transferts de polluants en milieux poreux

Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire

Expert public pour la maîtrise des risques nucléaires et la protection de la santé et de l'environnement au regard des rayonnements ionisants, l'IRSN met en œuvre des programmes de recherche destinés à maintenir et à développer les compétences nécessaires à l'expertise dans ses domaines d'activités.

Lieu

Fontenay-aux-Roses (92) à l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) au sein du Bureau d'Expertise et de Recherche pour la sûreté des Installations de Stockage de déchets radioactifs (BERIS) du Service d'Expertise des Déchets radioactifs et de la Radioactivité Naturelle (SEDRAN).

Description du sujet

Dans le cadre des études menées en support à l'expertise de la sûreté des stockages de déchets radioactifs, le Bureau d'Expertise et de Recherche pour la sûreté des Installations de Stockage de déchets radioactifs (BERIS) développe le logiciel MELODIE (Modèle d'Evaluation à LOnG terme des Déchets Irradiants Enterrés) qui permet de simuler en 2 ou 3 dimensions le transfert de radionucléides en phase aqueuse depuis les alvéoles d'un stockage jusqu'aux exutoires de la géosphère. L'écoulement et le transport de solutés sont représentés par des systèmes d'équations aux dérivées partielles (EDP) de type diffusion-convection. Les forts contrastes de propriétés des divers matériaux et des milieux géologiques traversés par les solutés radioactifs peuvent en effet conduire, au sein d'un même modèle, à des cinétiques de transport à dominante diffusive ou convective. La méthode numérique utilisée dans MELODIE pour résoudre les EDP combine éléments finis et volumes finis.

Pour améliorer les performances du logiciel, un estimateur d'erreur *a posteriori* associé à une méthodologie de maillage adaptatif a été implémenté en 2 dimensions pour les milieux saturés en eau. Un indicateur est calculé sur chaque élément du maillage à partir de l'expression du résidu de l'équation de convection/diffusion et des « sauts » de flux sur chaque arête de celui-ci. Cet indicateur permet ainsi de localiser les régions d'instabilités numériques et d'indiquer les zones à raffiner ou à déraffiner : il offre la possibilité d'obtenir un maillage qui améliore la stabilité du schéma numérique, en respectant la physique du problème, par une répartition judicieuse des tailles des mailles. Cette nouvelle méthodologie a été testée sur des cas académiques et des cas à forts contrastes de perméabilité plus représentatifs des sites de stockage. L'analyse du comportement du logiciel sur ces exemples a montré la difficulté de gérer les nouveaux paramètres introduits par cette nouvelle méthodologie. En effet, pour optimiser le temps de calcul et améliorer la précision des résultats, il est nécessaire de donner des valeurs correctement

choisies aux paramètres tels que le critère de précision, la fréquence d'appel à la procédure de raffinement-déaffinement, la fréquence d'appel aux différents indicateurs spatial et temporel, en liaison avec la valeur des paramètres numériques de résolution du système.

Tous ces paramètres doivent être testés finement pour évaluer leurs influences sur le comportement du logiciel et établir des règles de comportement. Ces règles permettront d'orienter le choix des valeurs de ces paramètres pour optimiser la stratégie de modélisation, en particulier obtenir la précision voulue dans les meilleures conditions de temps de calcul. Les perspectives de ce stage sont tout d'abord d'effectuer un grand nombre de tests pour évaluer l'efficacité de la méthodologie du maillage adaptatif dynamique, en tirer des règles de comportement et identifier son domaine d'application. Cette méthodologie basée sur un estimateur *a posteriori* est à étendre à la prise en compte d'un écoulement transitoire pour la résolution de l'équation de transport. Pour cela, le stage comprendra également un travail préparatoire de réflexion, d'adaptation de la méthodologie et de tests préliminaires par son application au couplage des deux mécanismes.

Profil recherché & durée

En résumé, nous proposons un sujet de stage qui traite de l'application de la méthodologie de l'indicateur d'erreur *a posteriori* en vue d'extraire des règles de comportement pour définir des stratégies d'utilisation optimale. Ce stage rémunéré, d'une durée de 6 mois (à partir de février-avril 2012), s'adresse à tout candidat en **3ème année d'école d'ingénieur ou de Master 2** ayant des compétences en mécanique des fluides et en analyse numérique (EDP, méthodes des éléments/volumes finis...). Le ou la candidat(e) devra avoir un réel intérêt pour la simulation numérique et la connaissance préalable de Linux et de la programmation en fortran serait un plus.

Coordonnées du responsable du stage

Marc Bourgeois

☎ 01 58 35 84 31

@ : marc.bourgeois@irsn.fr