



La problématique des maillages pour la simulation numérique des stockages de déchets radioactifs

Jean ROGER

Andra / Direction de la Recherche et Développement

C2S@Exa Inria Project Lab

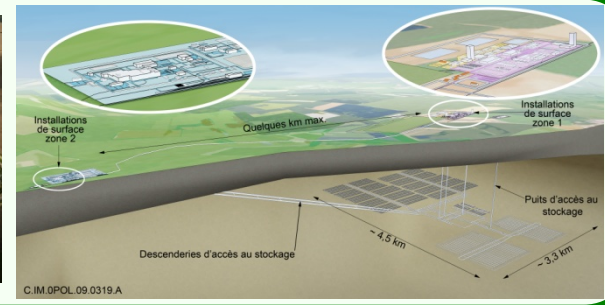
Meshes and their use in large-scale simulations

Institut Henri Poincaré

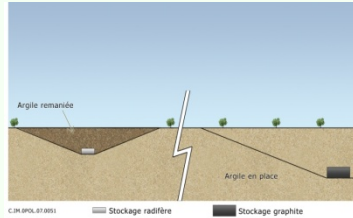
14 mai 2013

Projets

Projet Cigéo
(Haute Activité et Vie Longue)
Stockage réversible en formation géologique profonde



Projet FAVL
(Faible Activité et Vie Longue)
(Radifère - Graphite)
Stockage à faible profondeur



Centres de surface
(Faible et Très Faible Activité)
CFA, CIRES
CSM



Etudes et simulations numériques à

l'Andra contribuant à

1. La représentation de l'évolution phénoménologique du stockage et de son environnement

2. L'aide aux choix de conception et au dimensionnement des composants du stockage

3. L'évaluation de Performance / sûreté du stockage

5. Le choix des implantations des installations

4. La conception et à la mise en œuvre des expérimentations

Domaine d'application

Exemple du stockage géologique profond

Ex: déchets HAVL

Simulations multi-physiques

Thermique (T), Hydraulique-Gaz (H),
Mécanique (M), Chimique (C), Radiologique (R)
Transfert de solutés en milieu poreux (Tr)

avec ou sans couplages (forts à faibles)

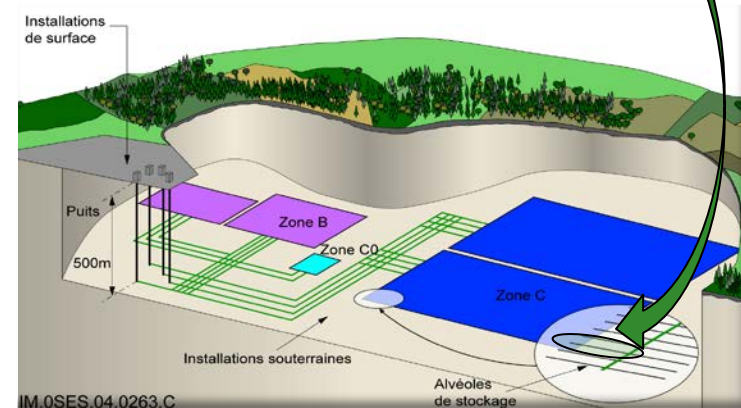
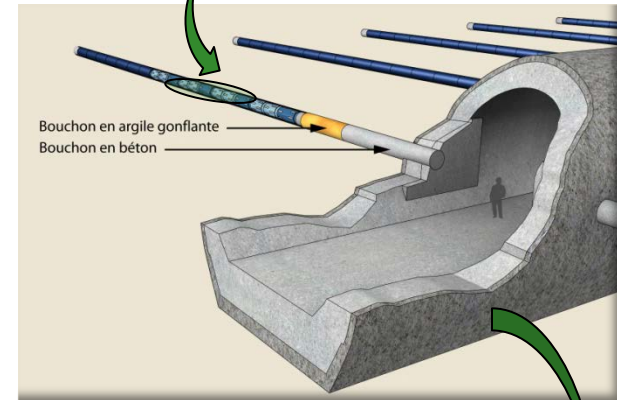
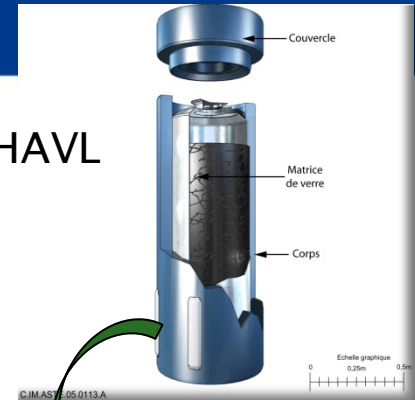
→ Gestion de

- fronts de propagation (solutés)
- dégénérescence des équations (changement de phase)
- cinétiques différentes (convection/diffusion/chimie)

Des échelles spatiales contrastées

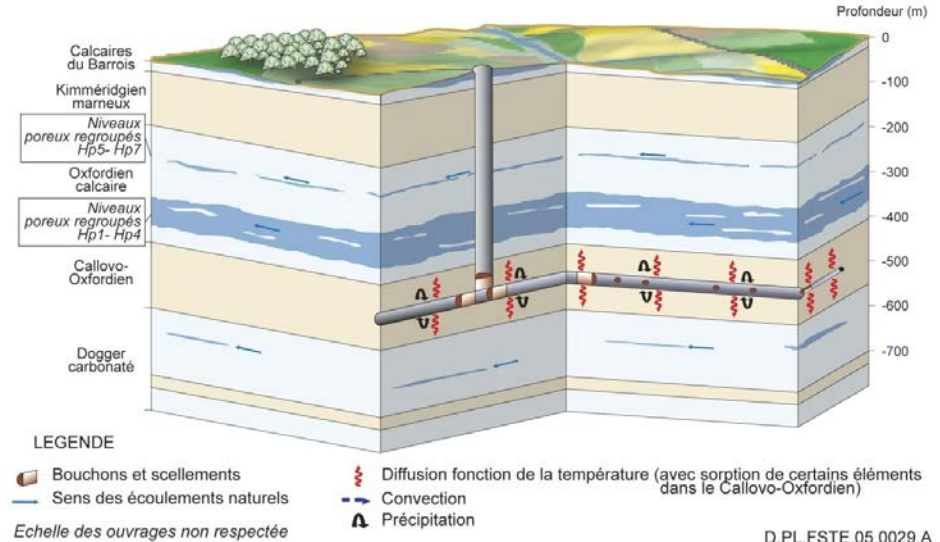
- centimétrique à métrique : colis de déchet
- métrique à décamétrique : alvéole de stockage
- hectométrique à kilométrique : stockage
- plurikilométrique : milieu géologique

→ Représenter plus de 7 ordres de grandeurs

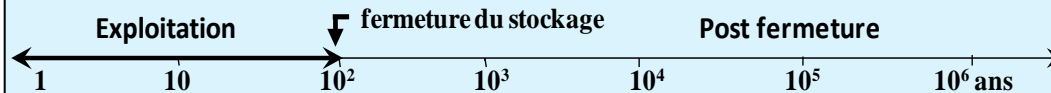


De forts contrastes de paramètres

Conductivités hydrauliques
(de 10^{-1} à 10^{-14})
Porosités
Coefficients de diffusion
Perméabilités au gaz, etc.



Des échelles temporelles variables et très étendues

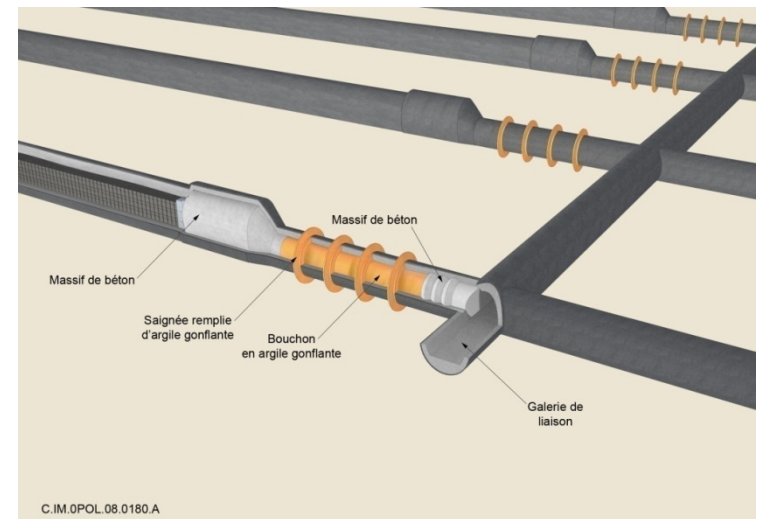
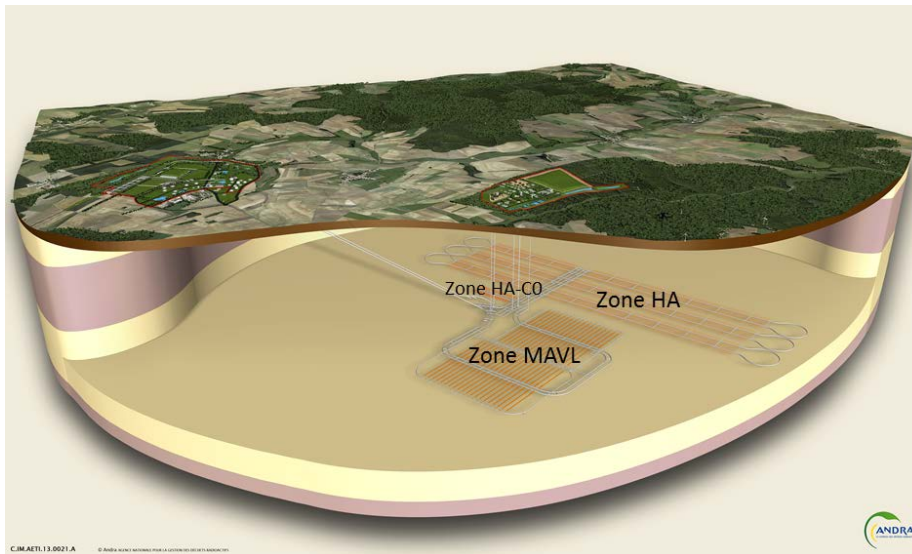
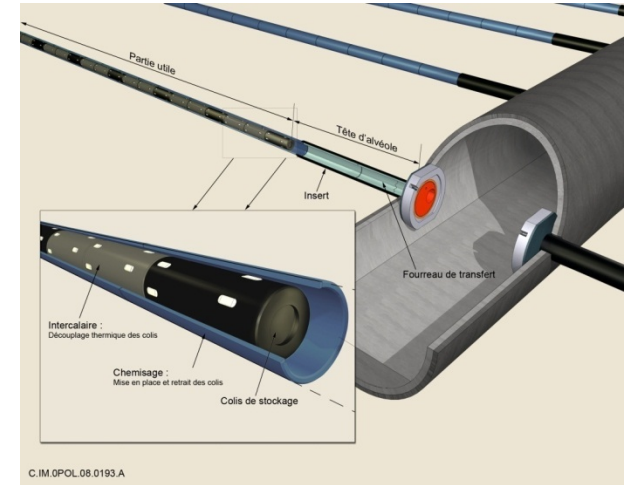


→ de l'année au million d'années
→ prise en compte de la géodynamique

Des objets complexes, à représenter de façon réaliste

Ouvrages de stockage multi-échelles

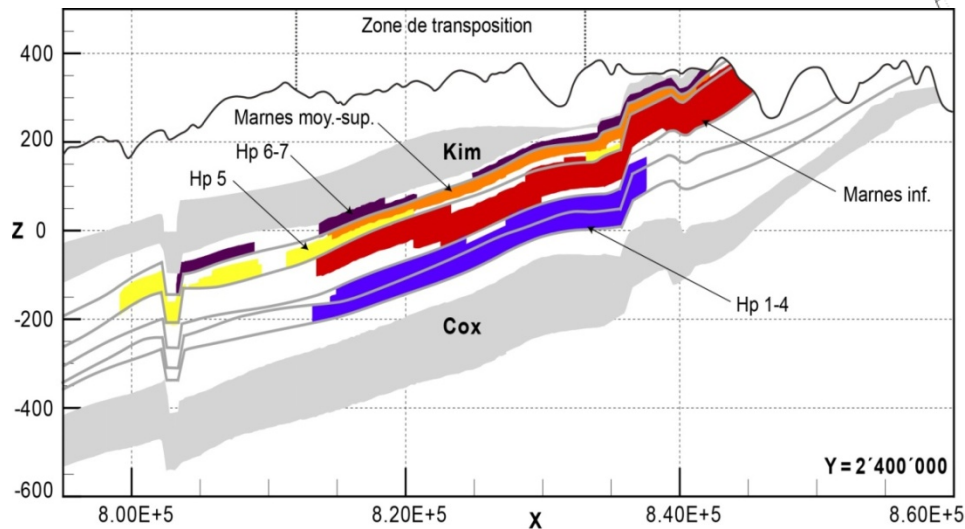
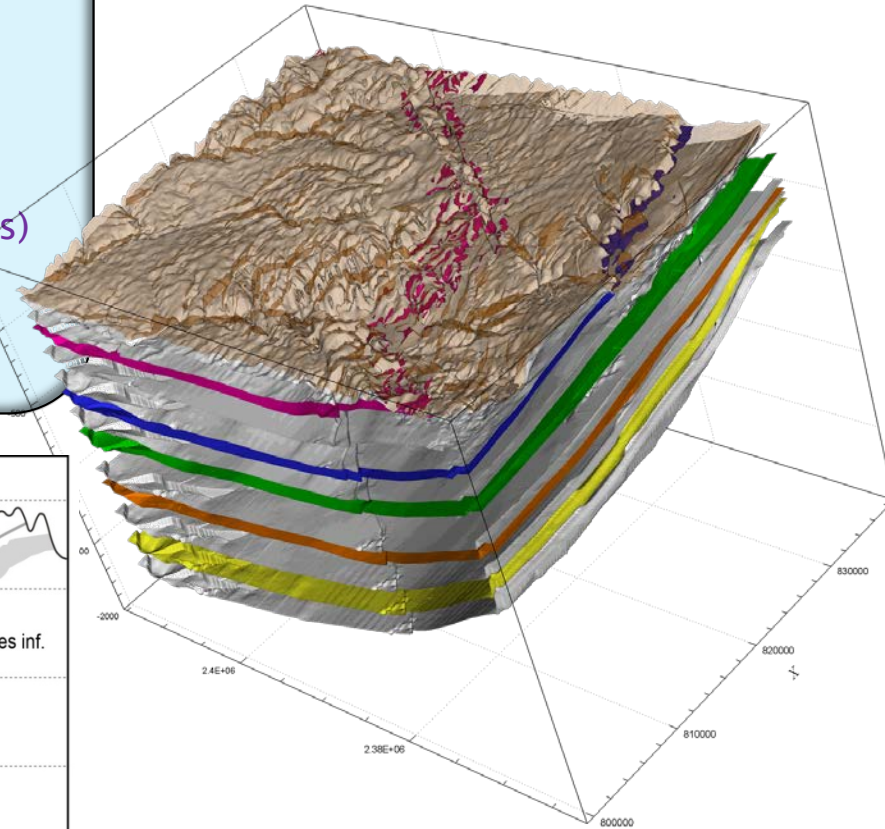
Colis de déchets, clés d'ancrage, jeux, scellements, remblais, galeries de liaison et de ventilation, puits et descenderies inclinées



Le milieu géologique, à représenter de façon réaliste

Système multicouche

- 16 couches lithologiques d'épaisseur variable sur 1000 m d'étendue verticale
- un secteur de plusieurs centaines de km²
- affleurements
- inclusions (macrostructures sédimentaires)
- pendage
- topographie de surface (relief, rivières)



Résolution des équation de l'hydraulique et du transport de solutés en milieu poreux, saturé ou non en eau (diphasique)

- » Besoin en méthodes de résolution performantes et robustes
- » De type volumes finis ou éléments finis mixtes hybrides (EFMH)

(ex. Porflow, Traces, Tough2)

- Contraintes sur le type de maillage
 - + *Maillages structurés ou maillages majoritairement hexaédriques*
- Contraintes sur la forme et la taille des mailles
 - + *Critères d'orthogonalité*
 - + *Tailles et étirements limités en lien avec la physique et le numérique*
- Contraintes sur le nombre total de mailles
 - + *Capacité des outils à gérer plusieurs millions ou dizaines de millions de DDL*
 - + *Mémoire et performance des machines de calcul et outils de post-traitement*



Des typologies et des tailles de maillages à adapter aux problèmes posés

Des axes de R&D spécifiques aux maillages

Les enjeux

- » Plus grande fidélité des maillages à la réalité géométrique du milieu géologique et des ouvrages de stockage
- » Intégration multi-échelle des objets modélisés (réduction du nombre de compartiments enchaînés)
- » Optimisation des maillages
 - Gestion des contrastes de paramètres
 - Gestion de fronts de propagation

Les moyens et travaux de R&D

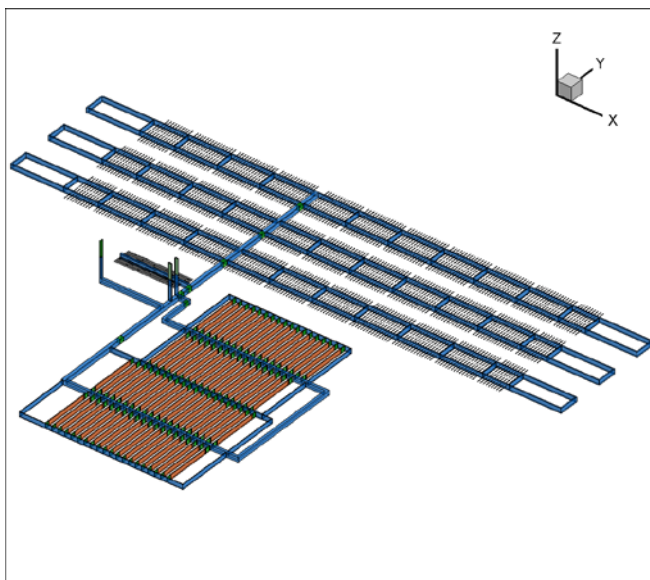
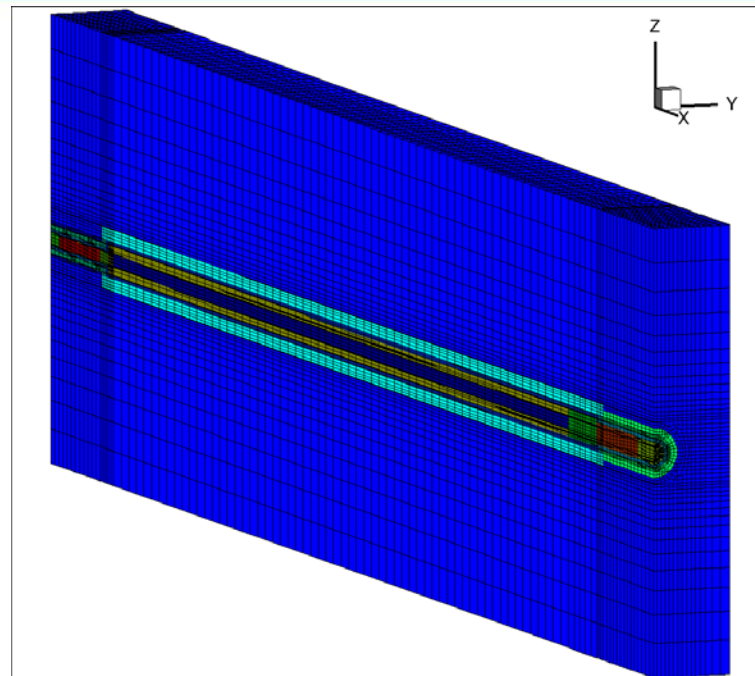
- » L'accroissement des capacités des calculateurs (mémoires, vitesse des processeurs, HPC)
 - Plus de mailles pour une simulation conduite en un temps équivalent
 - Pouvoir mener plus d'études de sensibilité
- » Des typologies de maillage adaptées, qualifiées sur les outils de calcul de l'Andra
 - Maillages mixtes (hybrides)
 - Maillages non conformes
- » Des techniques et des outils innovants basés sur l'adaptation de maillage
 - Remaillage adaptatif hexaédrique (en partenariat avec Inria)
 - Décomposition de domaine pour le calcul parallèle à mémoire distribuée (MPI)
 - Changements d'échelles non-conformes pour les simulations les plus coûteuses

» en champ proche

- maillages non structurés, 3D, conformes, volumes cylindriques

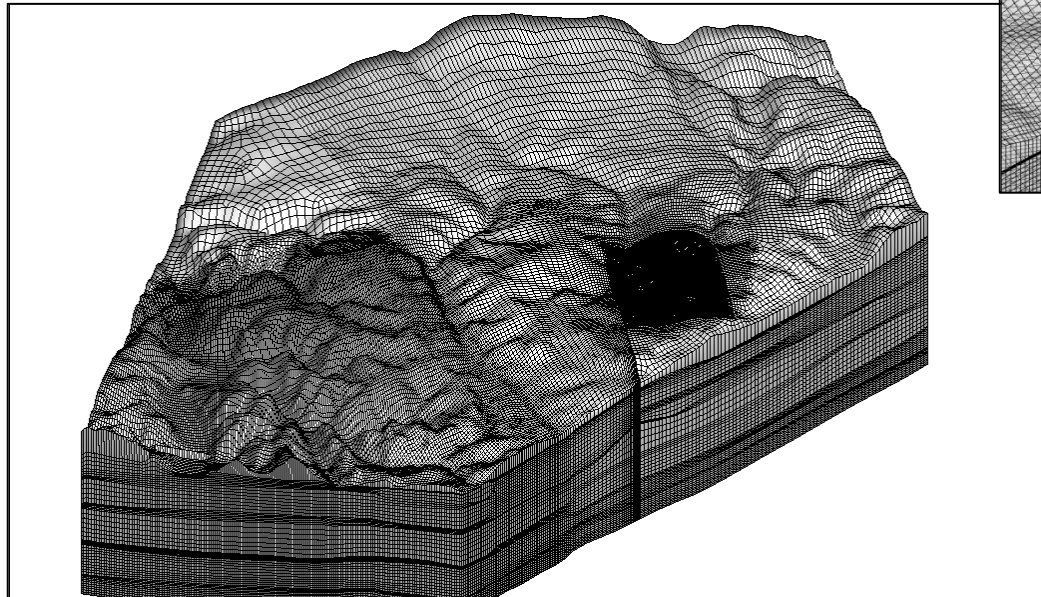
» en champ lointain

- maillages structurés, 3D, conformes ou non conformes, volumes parallélépipédiques
- intégration de l'ensemble des composants du stockage dans un même modèle

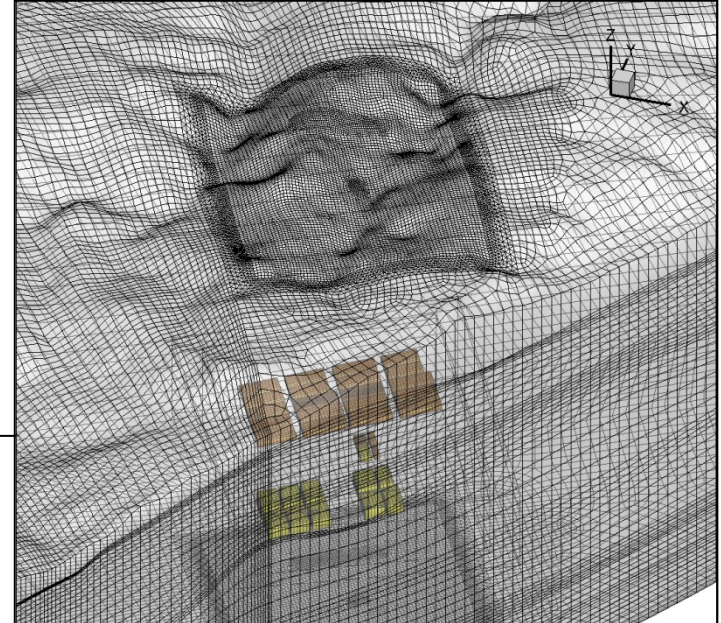


	Champ proche	Champ lointain
Type	Non structuré	Structuré
Taille	< 5 millions	10 à 20 millions

- » Maillages 3D non structurés hybrides majoritairement hexaédriques
- » Multicouche respectant la géométrie des couches géologiques (topographie de surface, pendage, variation d'épaisseur des couches, affleurements)
- » Tout le stockage modélisé par boîtes
- » Environ 2 200 000 éléments



Maillage du modèle hydrogéologique de sûreté



Zoom sur la zone de stockage

En cours de construction :

- » Ouvrages de stockage détaillés (galeries, puits et descenderies, alvéoles MAVL)
- » Plusieurs maillages à différents temps (évolution géodynamique du milieu)
- » 3 à 4 millions d'éléments

Principe :

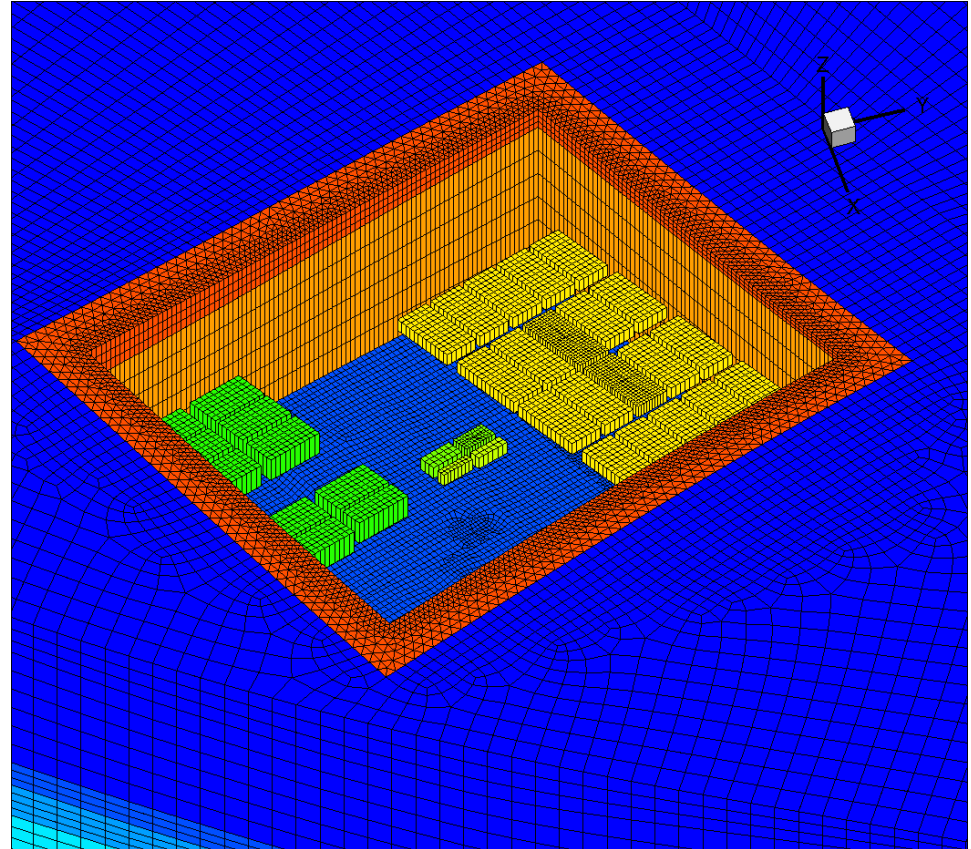
- » Maillages non structurés majoritairement hexaédriques et localement mixtes
 - Hexaèdres + prismes/pyramides/tétraèdres

Avantages :

- » Transition plus rapide des zones de maillage fin aux zones de maillage grossier
 - Moins de mailles dans le domaine complet
 - Plus de mailles dans les zones d'intérêt (sources, exutoires, interfaces)

Domaine d'application :

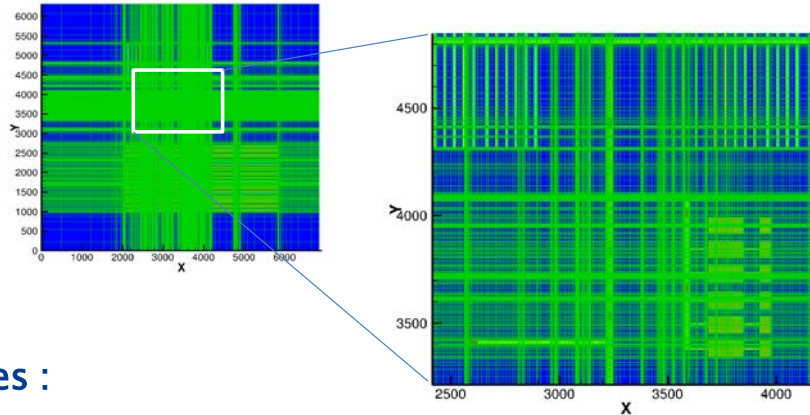
- » Modèle hydrogéologique de sûreté
 - Zone de transition entre les ouvrages de stockage (échelle métrique) et le milieu géologique (échelle hectométrique)
 - Localement pour le maillage de la topographie de surface (reliefs, rivières, affleurements)



*Exemple d'application :
zone de maillage hybride autour des ouvrages de stockage*

Principe :

- » Déraffinement non conforme des maillages structurés

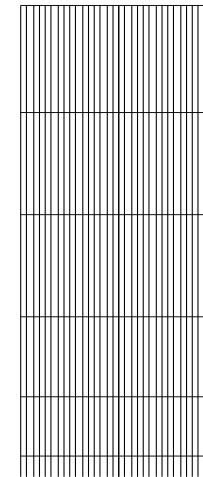


Avantages :

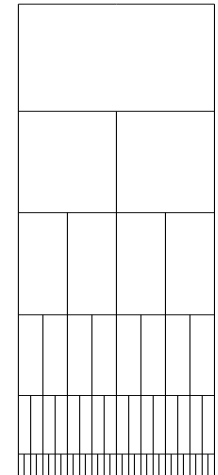
- » Limitation de la propagation de zones très raffinées hors des zones d'intérêt
 - Limiter l'allongement/aplatissement des parallépipèdes
 - Réduire le nombre total de mailles sans compromis sur les résultats
 - Permettre un raffinement plus poussé localement

Application :

- » Un outil dédié travaillant par fusion d'éléments dans un plan 2D
 - Contrôle de la direction et du niveau de déraffinement par sous-zone
 - Gestion des frontières (entre matériaux et du domaine)
 - Extrusion du maillage 2D déraffiné pour obtenir le maillage 3D non conforme
- » Qualification sur un maillage 3D représentatif (peignes d'alvéoles HAVL)
 - Gains potentiels importants en nombre d'éléments (30%)
 - Ecarts sur les résultats faibles et maîtrisés
 - Gains potentiels en temps de calcul très importants pour le transport de solutés (65%)
- » Application ciblée pour les calculs préparatoires aux calculs de sûreté en champ lointain



192 mailles



63 mailles

En partenariat avec Inria (équipe GAMMA3)

Principe :

- » Maillage adaptatif d'une alvéole de stockage gérant les contrastes de paramètres et les fronts de propagation

Objectifs :

- » Raffiner localement le maillage pour améliorer la précision de la solution
- » Garder un maillage hexaédrique conforme
- » Intégrer la méthodologie dans une boucle itérative
- » Analyser la solution via un estimateur d'erreur a posteriori

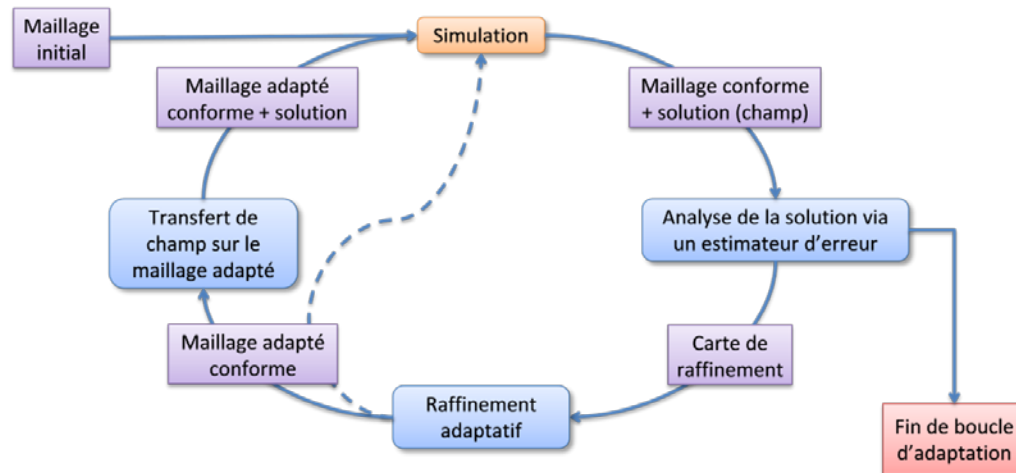
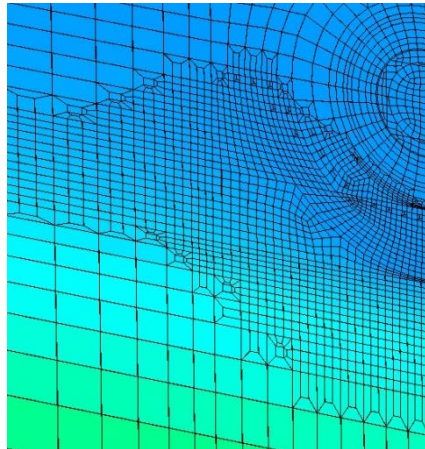


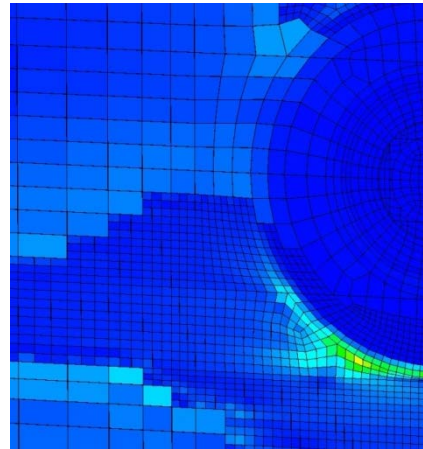
Schéma général du remaillage adaptatif

Application : calcul hydraulique

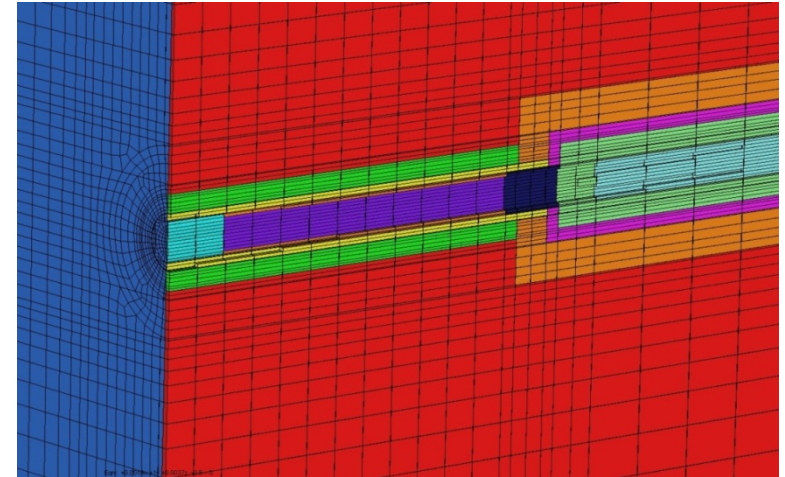
» Maillage initial : 100 000 éléments



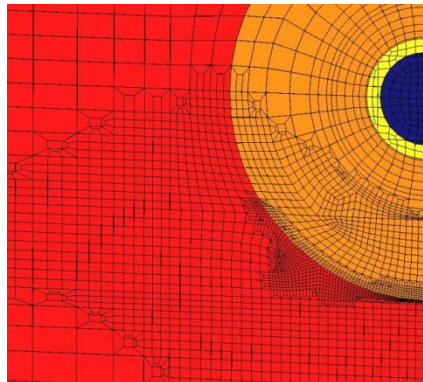
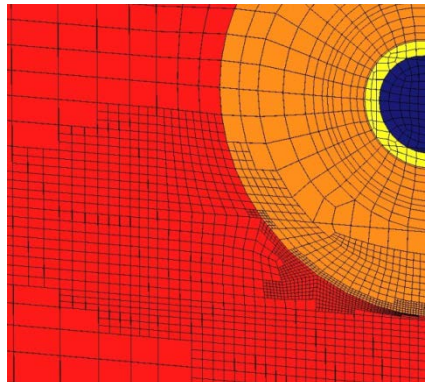
Maillage adapté conforme



Maillage adapté non conforme



Maillage initial



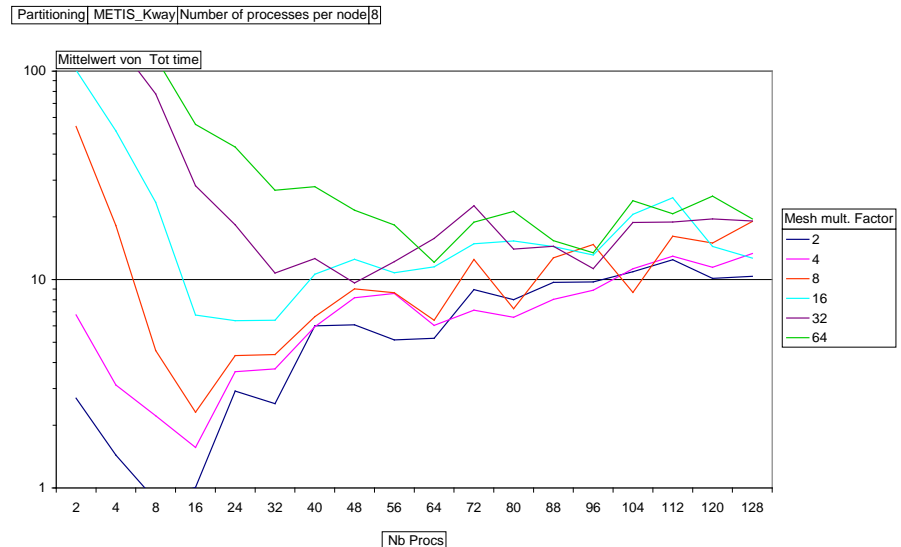
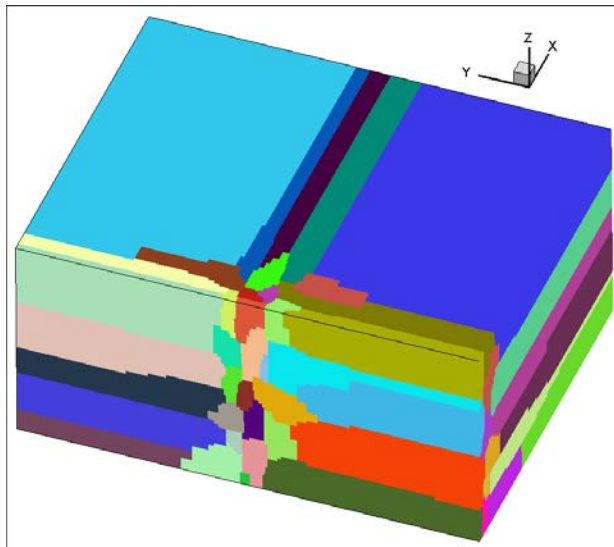
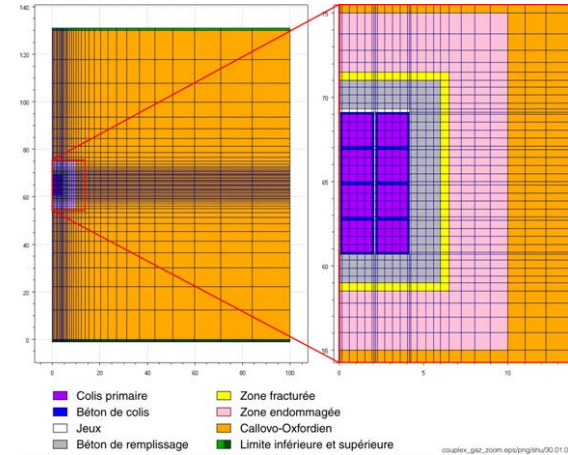
Maillage adapté à deux itérations successives

- » 5 itérations (maillage final > 10 millions d'éléments)
- » Champ considéré : pression
- » Bonne cohérence entre l'adaptation du maillage et la physique modélisée
- » Croissance rapide du nombre d'éléments

Exploitation des capacités de calcul haute performance des outils de calcul

Application avec Tough2-MP (MPI) :

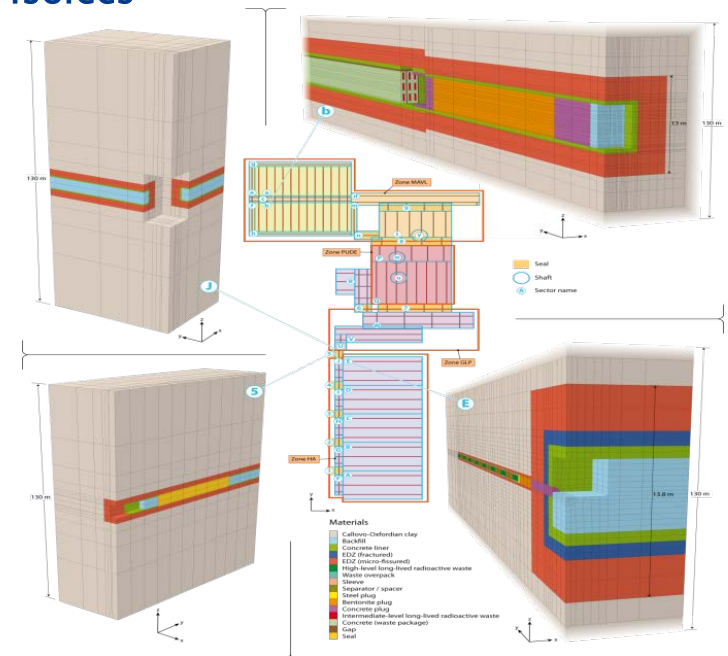
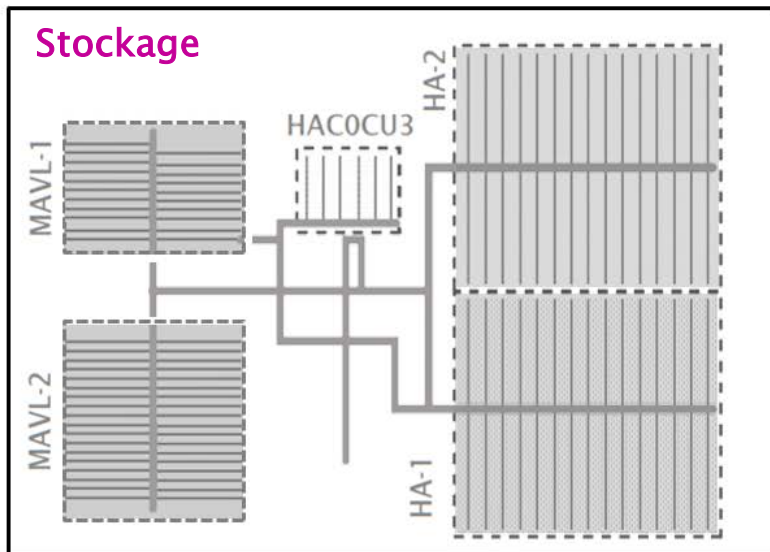
- » Simulation du transitoire hydraulique-gaz autour d'une alvéole de stockage MAVL (exercice Couplex-Gaz)
- » Mise au point d'une méthodologie d'optimisation de la scalabilité du code sur le cluster de l'Andra :
 - Choix du partitionneur (METIS) mis en œuvre
 - Choix de la configuration parallèle
(nombre de nœuds/nombre de cœurs par nœud)
 - Choix de la taille optimale des partitions



- ❑ Simulation 3D diphasique du stockage et de la roche hôte
- ❑ Prenant en compte les différents composants du stockage aux différentes échelles spatiales
- ❑ Sur plusieurs centaines de milliers d'années
 - **Couplage non-conforme des petites aux grandes échelles pour réduire le temps de simulation**

Méthode de changement d'échelle

1. Division du stockage en zones elles-mêmes subdivisées en secteurs
2. Regroupement des secteurs périodiques et symétriques par multiplication des volumes, des surfaces et des variables d'état extensives
3. Fermeture du modèle en connectant tous les secteurs résultant et les zones isolées



Le maillage pour la simulation numérique des stockages de déchets radioactifs à l'Andra

- » des contraintes spécifiques fortes
- » des typologies et des tailles de maillages adaptées en conséquence

Actions de R&D menées par l'Andra et ses partenaires et besoins à court et moyen terme

- » Recours au maillage mixte/hybride (non structuré) et au maillage non conforme (structuré)
- » Adaptation/optimisation de maillages pour mieux gérer les contrastes de paramètres et la propagation des fronts :
 - Fronts chimiques réactionnels
 - Front de saturation/désaturation
 - Fronts de transport convectif/diffusif
 - ...
- » Prise en compte explicite des fractures/fissures localisées
 - Endommagement mécanique de la roche au creusement, puis auto-colmatage
 -
- » Mise en œuvre de techniques de décomposition de domaines :
 - en espace pour les calculs parallèles MPI (prise en compte de la taille croissante des modèles)
 - en temps (pas de temps local par sous-domaine, thèse avec Inria)
- » Techniques de changements d'échelle non-conforme en diphasique à l'échelle du stockage