

# Diffusion et transport dans un milieu poreux 2D hétérogène

Julia Charrier

Réunion projet Micas

27 janvier 2009

# Plan

- 1 **Modèle physique et résolution numérique**
  - Modèle physique
  - Méthode de Monte Carlo
- 2 **Analyse numérique d'un problème plus simple**
  - Nouvelles hypothèses
  - Méthode numérique
  - Analyse numérique : travail en cours
  - Objectifs
- 3 **Méthodes spectrales stochastiques : cas d'une edp elliptique**
  - Equation et hypothèses
  - Description du champ aléatoire
  - Un problème déterministe en grande dimension
  - Méthodes intrusives
  - Méthodes non intrusives
  - Conclusion
  - Objectifs

# Ecoulement de l'eau en régime stationnaire

- On suppose la porosité constante, égale à 1.
- Incertitudes sur la perméabilité  
→ champ de perméabilité aléatoire  $a(\omega, x)$ : loi lognormale avec noyau de covariance exponentiel.
- On cherche à calculer la pression hydraulique  $h(\omega, x)$ :
  - ▶ **Domaine** : Un rectangle  $D$ .
  - ▶ **Conditions aux bords** : Conditions mixtes Dirichlet-Neumann.
  - ▶ **EDP elliptique** :  $\nabla \cdot (a(\omega, x) \nabla h(\omega, x)) = 0$
  - ▶ La vitesse de l'eau est :  $v(\omega, x) = -a(\omega, x) \nabla h(\omega, x)$ .

# Schéma

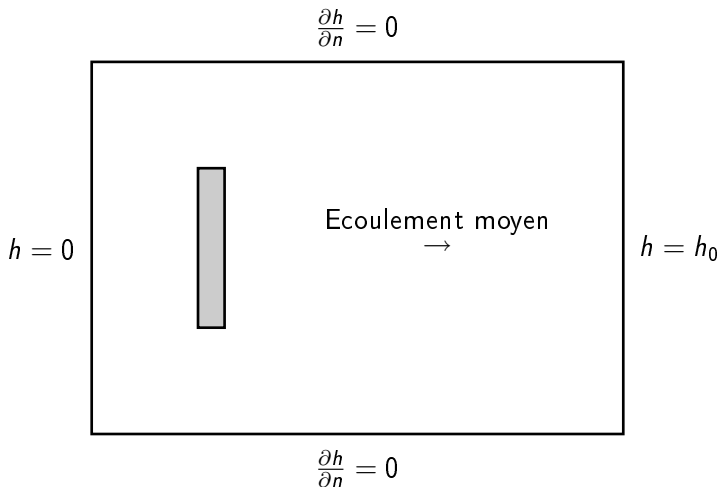


Figure: Domaine pour l'équation sur la pression

# Transport diffusion du soluté

- On suppose que le soluté est inerte, on considère uniquement une diffusion moléculaire isotrope.
- On cherche à calculer la concentration en soluté  $c(\omega, x, t)$ .

**Domaine** : Un rectangle  $D$ .

**Conditions aux bords** : Conditions de Dirichlet homogènes.

**Condition initiale** :  $c(\omega, x, 0) = c_0(x)$

**Equation de transport diffusion** :

$$\frac{\partial c(\omega, x, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (c(\omega, x, t)v(\omega, x)) - D\Delta c(\omega, x, t) = 0.$$

## Objectif : calcul de la dispersion moyenne

On définit :

- Masse totale :  $M(\omega, t) = \int_D c(\omega, x, t) dx$
- Centre de masse :  $x_G(\omega, t) = \frac{1}{M(\omega, t)} \int_D c(\omega, x, t) x dx$
- Extension du soluté :  
 $S(\omega, t) = \frac{1}{M(\omega, t)} \int_D c(\omega, x, t) \|x - x_G\| (x - x_G) dx$
- Dispersion :  $D(\omega, t) = \frac{dS(\omega, t)}{dt}$ .
- Dispersion moyenne :  $D(t) = E_\omega[D(\omega, t)]$ .

## Description générale de la méthode (PARADIS)

- Objectif : calculer la dispersion moyenne  $E_{\omega}[D(w, t)] = D(t)$ .
- On fait N simulations indépendantes du champ aléatoire  $a(\omega, x)$  :  $a_1(x), \dots, a_N(x)$ .
- Pour chacune de ces simulations  $a_i$  on approche numériquement la dispersion  $D_i(t)$  : problème déterministe.
- Méthode de Monte carlo :

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N D_i \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} D.$$

# Problème déterministe

- On approche les valeurs de la pression  $h$  en utilisant des éléments finis, on obtient une **vitesse approchée**  $v^h$ .
- Calcul de la concentration dans le cas où on connaît la vitesse exacte :  
On utilise une méthode particulière pour résoudre l'équation de transport diffusion, qui se base sur l'équation de Fokker-Planck :



## Theorem

Dans  $\mathbb{R}^2$ , sous des hypothèses de régularité, la solution  $c(x,t)$  de l'équation de Fokker Planck :

$$\begin{aligned}\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} + \nabla \cdot (v(x)c(x,t)) - D\Delta c(x,t) &= 0 \\ c(x,0) &= c_0(x)\end{aligned}$$

est la fonction densité de la solution de l'équation différentielle stochastique :

$$\begin{aligned}dX &= v(X)ds + \sqrt{2D}dW \\ X(0) &\sim \text{densité } c_0\end{aligned}$$

Avec un domaine borné, et dans le cas de conditions de Dirichlet, on obtient un résultat similaire en tuant les particules qui

- On utilise une méthode d'Euler pour obtenir une solution approchée de l'EDS :  $X_{n+1} = X_n + v(X_n)\Delta t + \sqrt{2D\Delta t}N_n$
- Calcul de la concentration à partir de la vitesse approchée  $v^h$ :  
On construit M suites indépendantes :

$$X_{n+1}^j = X_n^j + v^h(X_n^j)\Delta t + \sqrt{2D\Delta t}N_n^j$$

$$X_0^j \sim \text{densité } c_0$$

- On applique une méthode Monte Carlo pour approcher les moments d'ordre 1 et 2 de X:
  - ▶ On approche le centre de masse  $x_G^i(n\Delta t)$  par  $\bar{x}_G^i(n\Delta t) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M X_n^j$ .
  - ▶ On approche l'extension du soluté  $S^i(n\Delta t)$  par  $\bar{S}^i(n\Delta t) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \| X_n^j - \bar{x}_G^i(n\Delta t) \| (X_n^j - \bar{x}_G^i(n\Delta t))$ .
  - ▶ On approche la dispersion  $D^i(n\Delta t)$  par la dérivée temporelle approchée de  $\bar{S}^i(n\Delta t)$ .

## Equation sur la pression

- Toutes les hypothèses sont vérifiées uniformément par rapport à  $\omega$ .
- On cherche à calculer la pression hydraulique  $h(\omega, x)$ .

**Domaine** : Un ouvert  $D$  de classe  $\mathcal{C}^7$  (à préciser).

**Conditions aux bords** : Conditions de type Dirichlet, avec une fonction  $h_0 \in H^8$  au bord.

**Régularité du champ de perméabilité  $a$**  :  $\mathcal{C}^6$ .

**EDP elliptique** :  $\nabla \cdot (a(\omega, x) \nabla h(\omega, x)) = 0$ .

La vitesse de l'eau est :  $v(\omega, x) = -a(\omega, x) \nabla h(\omega, x)$ , on prolonge cette fonction sur  $\mathbb{R}^2$ , on obtient une fonction  $\mathcal{C}^4(\mathbb{R}^2)$  à dérivées bornées, on prolonge également  $v^h$  (à préciser).

# Schéma

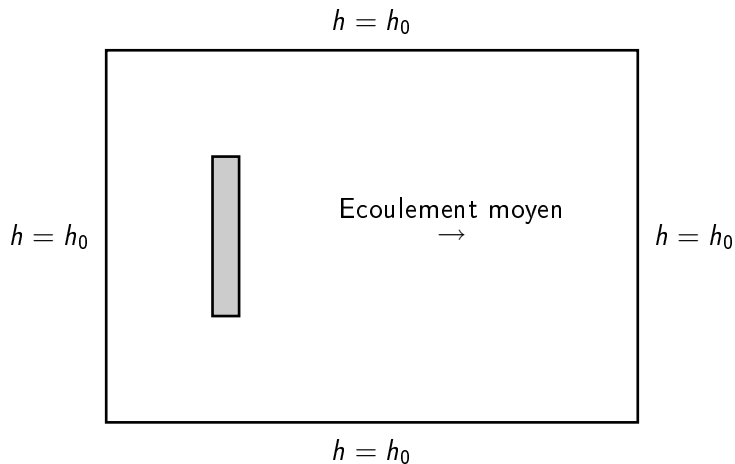


Figure: Domaine pour l'équation sur la pression



# Equation sur la concentration

- On cherche à calculer la concentration en soluté  $c(\omega, x, t)$ .
  - ▶ **Domaine** :  $\mathbb{R}^2$
  - ▶ **Conditions aux bords** :  $c(\omega, \cdot, t)$  tend vers 0 à l'infini.
  - ▶ **Condition initiale** :  $c(\omega, x, 0) = c_0(x)$  où  $c_0$  est une fonction  $\mathcal{C}^4(\mathbb{R}^2)$  bornée, à dérivées bornées.
  - ▶ **Equation de transport diffusion** :
$$\frac{\partial c(\omega, x, t)}{\partial t} + v(\omega, x) \cdot \nabla c(\omega, x, t) - D \Delta c(\omega, x, t) = 0.$$

# Méthode numérique

- On fait  $N$  simulations indépendantes du champ aléatoire  $a(\omega, x)$  :  $a_1(x), \dots, a_N(x) \rightarrow$  méthode de Monte Carlo
- Pour chacune de ces simulations  $a_i$  on approche numériquement la pression  $h_i(x)$  en utilisant des éléments finis (d'ordre supérieur ou égal à deux ), on obtient une vitesse approchée  $v_i^h$ .
- Calcul de la concentration à partir de la vitesse exacte : on voit ici l'équation de transport-diffusion comme une équation de Kolmogorov backward.

## Theorem

Dans  $\mathbb{R}^2$ , sous des hypothèses de régularité, la solution  $c(x,t)$  de l'équation de Kolmogorov backward :

$$\begin{aligned}\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} + v(x) \cdot \nabla c(x,t) - D\Delta c(x,t) &= 0 \\ c(x,0) &= c_0(x)\end{aligned}$$

est  $c(x,t) = E[c_0(X(t))]$  où  $X$  est la solution de l'équation différentielle stochastique :

$$\begin{aligned}dX &= -v(X)ds + \sqrt{2D}dW \\ X(0) &= x\end{aligned}$$

- Calcul de la concentration à partir de la vitesse approchée :  
Pour  $j=1\dots M$ , on fait des simulations indépendantes du schéma d'Euler de discrétisation pour l'eds avec la vitesse approchée  $v_i^h$ :

$$\begin{aligned} X_{n+1}^{i,j} &= X_n^{i,j} - v_i^h \Delta t + \sqrt{2D\Delta t} N_n^{i,j} \\ X_0^{i,j} &= x \end{aligned}$$

- On approche  $c_i(x, n\Delta t)$  par  $\frac{1}{M} \sum_{j=1}^M c_0(X_n^{i,j}) \rightarrow$  méthode de Monte Carlo
- On approche finalement  $E_\omega[c(\omega, x, n\Delta t)]$  par  $\frac{1}{M} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N c_0(X_n^{i,j}) \rightarrow$  méthode de Monte Carlo



## Analyse numérique : travail en cours

- On majore l'erreur commise en approchant  $E_\omega[c(\omega, x, n\Delta t)]$  par  $\frac{1}{M} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N c_0(X_n^{i,j})$  :

### Proposition

On fixe un temps maximal  $T$ , on pose

$$E = E_\omega[c(\omega, x, n\Delta t)] - \frac{1}{M} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N c_0(X_n^{i,j}),$$

alors il existe deux constantes  $C_1, C_2$  indépendantes de  $\Delta t, N, M$  et  $h$  telles que :

$$\begin{aligned} \| E \|_{L_x^\infty L_{t \leq T}^\infty L_\omega^2 L_\xi^2} &\leq C_1 \Delta t + \frac{\text{lip} c_0}{\text{lip} v} e^{\text{lip} v T} \| v - v^h \|_{L_x^\infty L_\omega^\infty} \\ &+ \| c_0 \|_{L_x^\infty} \left( \frac{1}{\sqrt{N}} + \frac{1}{\sqrt{M}} \right) \\ &\leq (\text{\grave{a pr\^e}ciser}) C_1 \Delta t + C_2 h + \| c_0 \|_{L_x^\infty} \left( \frac{1}{\sqrt{N}} + \frac{1}{\sqrt{M}} \right) \end{aligned}$$

## Objectifs pour la suite :

- Terminer l'analyse numérique de ce problème, puis faire l'analyse numérique d'un problème plus proche du problème initial, quelques pistes :
  - ▶ Affaiblir les hypothèses de régularité.
  - ▶ Utiliser l'EDS associée à l'équation de Fokker Planck.
  - ▶ Evaluer l'erreur sur la macro dispersion ?.
  - ▶ Faire une majoration d'erreur plus précise, qui utilise l'erreur  $H^1$  des éléments finis.
  - ▶ Traiter l'équation de transport-diffusion sur un domaine borné, avec des conditions au bord.
- Traiter le cas avec dispersion cinématique.

# Equation

- Soit  $D$  un domaine polygonal, convexe, borné de  $\mathbb{R}^d$  et  $(\Omega, \mathcal{F}, P)$  un espace de probabilité. On considère le problème elliptique linéaire stochastique avec conditions au bord suivant :  
trouver une fonction stochastique  $u : \Omega \times D \rightarrow \mathbb{R}$  telle que pour  $P$ -presque tout  $\omega$  dans  $\Omega$ , on ait

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (a(\omega, \cdot) \nabla u(\omega, \cdot)) &= f(\omega, \cdot) \text{ sur } D \\ u(\omega, \cdot) &= 0 \text{ sur } \partial D. \end{aligned}$$

Où  $a, f : \Omega \times D \rightarrow \mathbb{R}$  sont des fonctions stochastiques  $\mathcal{F} \otimes B(D)$  mesurables (où  $B(D)$  est la tribu borélienne sur  $D$ ).

# Introduction

- **Objectifs** : Obtenir la loi de la solution, pas seulement l'espérance.  
Coût compétitif avec les méthodes de Monte-Carlo.
- **Hypothèses requises** : du même type que pour le problème déterministe, mais uniformément par rapport à  $\omega$  pour que le problème soit bien posé et des hypothèses supplémentaires pour l'analyse numérique de la méthode.
- **Deux types de méthodes spectrales stochastiques** : intrusives et non-intrusives.

# Champ aléatoire

- On approche le champ aléatoire  $a(\omega, x)$  par une fonction  $\tilde{a}(x, Y_1(\omega), \dots, Y_N(\omega))$  de  $N$  variables aléatoires
- But : variables aléatoires  $Y_i$  décorréllées (idéalement indépendantes) et facilement simulables.  $N$  petit.
- Deux principales méthodes utilisées :
  - ▶ Développement de Karhunen-Loève :  
$$a(\omega, x) = E_\omega[a](x) + \sum_{n=1}^{+\infty} \sqrt{\lambda_n} b_n(x) Y_n(\omega)$$
 convergence  $L_x^\infty L_\omega^2$ .
  - ▶ Décomposition en polynômes du chaos (éventuellement généralisé) :  
$$a(\omega, x) = \sum_{n=1}^{+\infty} a_n(x) \phi_n(Y(\omega))$$
 convergence  $L_x^2 L_\omega^2$ .

## Problème déterministe équivalent

- Le problème 1 est équivalent à :  $\forall y \in \Gamma$

$$\begin{aligned} -\nabla_x(a(y,x)\nabla_x u(y,x)) &= f(y,x) \text{ dans } L^2(D) \\ u(y,x) &= 0 \end{aligned}$$

équivalent à la formulation variationnelle globale : trouver  $u \in L^2_\rho(\Gamma, H_0^1(D))$  telle que :

$$\begin{aligned} &\int_\Gamma \int_D \rho(y)a(y,x)\nabla_x u(y,x) \cdot \nabla_x v(y,x) dx dy \\ &= \int_\Gamma \int_D \rho(y)f(y,x)v(y,x) dx dy \end{aligned}$$

$$\forall v \in L^2_\rho(\Gamma, H_0^1(D))$$

Où  $\Gamma$  est un pavé inclus dans  $\mathbb{R}^N$  (support des variables aléatoires).

## Méthodes intrusives: type Galerkin

- $X$  sous espace vectoriel de dimension finie de  $H_0^1(D)$  : espace d'éléments finis...pour l'approximation en  $x$ .
- $Y$  sous espace vectoriel de dimension finie de  $L^2(\Gamma)$ : espace d'éléments finis, ou de polynômes ou de polynômes par morceaux...pour l'approximation en  $y$ .
- On résout la formulation variationnelle 1 sur  $X \otimes Y$  : on obtient une solution approchée de  $u$  dans  $X \otimes Y$  par résolution d'un système linéaire de grande taille ( $\dim Y \times$  la taille d'un problème déterministe).
- On peut dans certains cas découpler ce système  $\rightarrow$  on a alors  $\dim Y$  "problèmes déterministes".

## Méthodes non intrusives : collocation

- On choisit des points de  $\Gamma$  :  $y_1, \dots, y_M$ , on calcule les  $M$  solutions de problèmes déterministes correspondant.
- On reconstruit la solution  $u(y, x)$  à partir de ses valeurs en  $y_1, \dots, y_M$  : soit par interpolation, soit en cherchant ses coefficients dans une base de polynômes du chaos par calcul approché d'intégrales.
- **Choix des  $y_i$  :**  
il faut en prendre un nombre minimal permettant de reconstruire la solution correctement.  
→ Problème d'interpolation et de quadrature en dimension  $> 1$ .  
On peut utiliser des produits tensoriels de points de quadrature, éventuellement des sparse grid (anisotropiques de préférence) qui permettent de diminuer nettement le nombre de points nécessaires.



# Cadre d'application

- Sous certaines hypothèses on montre la convergence de ces méthodes, et obtient un majorant de la vitesse, qui découlent essentiellement de l'analyticité de  $u$  par rapport à  $y$  sur  $\Gamma + \epsilon$ .
- La méthode est compétitive dans les cas où:
  - ▶ L'incertitude est importante.
  - ▶ On peut décrire le champ  $a(\omega, x)$  par un faible nombre de variables aléatoires.  
Dans le cas d'un développement de Karhunen-Loève : cas où la longueur de corrélation est grande / taille du domaine et la fonction de corrélation régulière.

# Intrusif / non intrusif

- Avantages de l'intrusif :
  - ▶ Problème bien posé.
  - ▶ Majoration d'erreur type projection, bien connue.
- Avantages du non-intrusif :
  - ▶ On peut paralléliser et utiliser un code déterministe.
  - ▶ Systèmes découplés.
  - ▶ S'adapte pour les edp non linéaires, et au cas où le champ n'est pas fonction linéaire des variables aléatoires.

# Objectif

- Mettre en place une méthode spectrale pour le couplage des deux EDP présenté précédemment :
  - ▶ compétitive avec la méthode de Monte Carlo,
  - ▶ qui permette d'obtenir la loi de la "solution".
  - ▶ Faire l'analyse numérique de cette méthode.