

ALLIANCES

Simulation Platform
For Nuclear Waste Repository



Présentation de la plate-forme Alliances, Mise en œuvre et couplage d'un composant Cast3M

Ph. Montarnal

**Contributions Alliances et/ou Cast3M : E. Adam, A. Bengaouer, G. Bernard-Michel, E. Deville,
M. Lamoureux, C. Le Potier, F. Malvagi, Ph. Montarnal, C. Mügler
CEA Saclay DEN/DM2S/SFME**

PLAN DE L'EXPOSE



- **Contexte**
- **Architecture**
- **Composant Cast3M**
- **Qualification, utilisations actuelles**
- **Perspectives**



➤ Plate-forme de modélisation **CEA-ANDRA-EDF** pour la simulation des stockages et des entreposages de déchets nucléaires :

- ✓ Intégration de codes existants avec un **environnement commun**
- ✓ Développement d'**algorithmes de couplage** entre ces codes
- ✓ Réutilisation des composants et outils **open-source Salome** (Géométrie, Maillages, Visualisation)

⌚ Besoin industriel pour les études de sûreté ANDRA en 2004

→ version 1

⌚ Enrichissement des modèles physiques et méthodes numériques pour une utilisation plus étendue

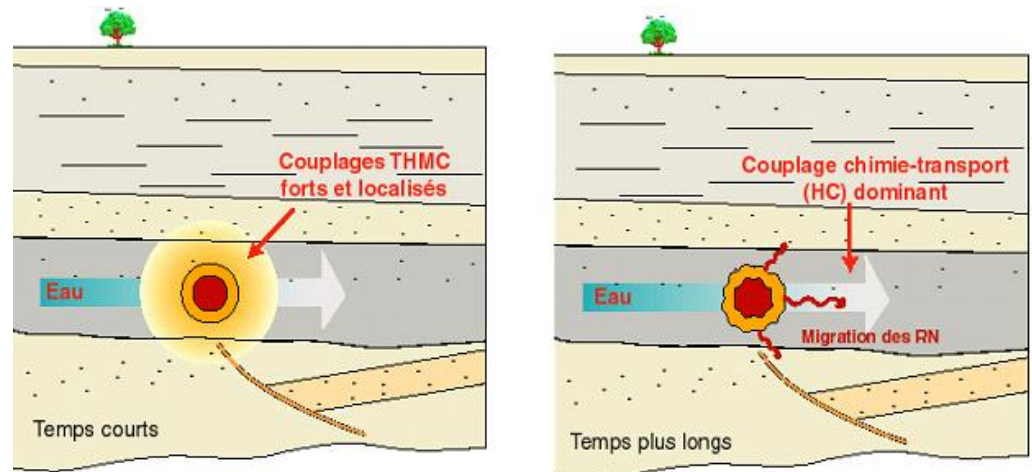
→ version 2

CONTEXTE ALLIANCES



➤ Processus physiques mis en jeu

- ✓ Hydraulique et transport en milieux poreux
- ✓ Géochimie
- ✓ Modèles de colis et de corrosion
- ✓ Thermique
- ✓ Mécanique
- ✓ Thermo-Aéraulique



ARCHITECTURE



➤ **Langage Python :**

- ✓ Langage de haut niveau, technologie objet
- ✓ Accès à des bibliothèques C, C++ , Fortran (encapsulation de codes existants)
- ✓ Pour Alliances : Modèle de données, algorithmes de couplages et jeux de données en Python

➤ **Format MED :** Format unique fichier et mémoire pour le stockage, la manipulation (calcul de norme), l'échange entre codes et la sauvegarde des maillages et des champs

➤ **Intégrations des composants numériques**

- ✓ Sous forme de classes et méthodes Python
- ✓ « Boite noire » ou mémoire (bibliothèques dynamiques)
- ✓ Échanges au format MED

➤ **Composants Salome**

- ✓ Visualisation
- ✓ Interface graphique et sauvegarde des données
- ✓ Géométrie
- ✓ Maillage

➤ **Interface utilisateur : script Python (actuellement) et interface graphique (en cours)**

ARCHITECTURE



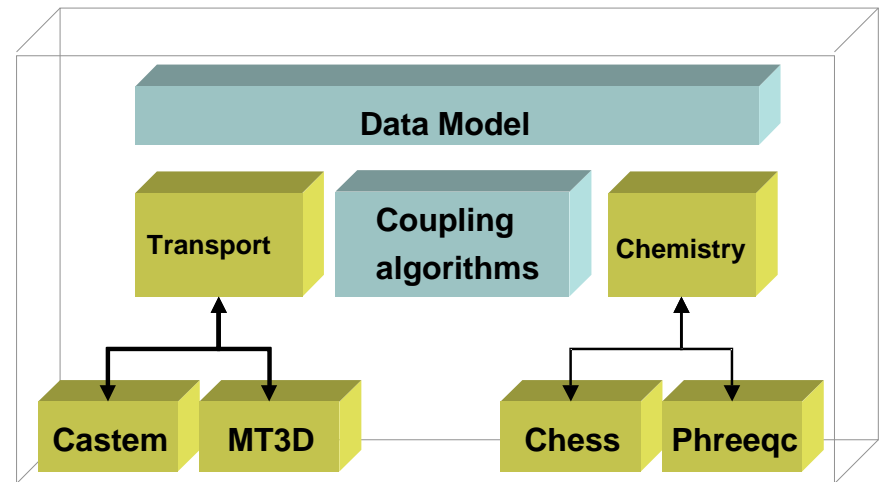
➤ Méthodologie de couplage

- ✓ Plusieurs codes pour une même application
- ✓ Chaque code est intégré avec une interface unifiée
- ✓ Echange de données **via la mémoire**
- ✓ Algorithmes de couplage écrits au niveau Alliances indépendamment des différents codes (Point fixe, Newton, Gradient conjugué non linéaire)

⇒ Avantages

- ✓ Séparation entre chaque partie
- ✓ Facilité d'évolution (codes et algorithmes)

Exemple pour
Chimie/Transport





➤ Type d'utilisation et atouts

- ✓ Uniformisation de l'interface utilisateurs et des formats maillage et champs à travers différents codes
- ✓ Comparaison de codes pour une même application (ex. : Porflow/Castem)
 - *Même jeux de données*
 - *Même format de sortie (champ, tables)*
 - *Possibilités de comparaison et de calcul de norme sur les sorties*
- ✓ Chaînage (Hydraulique/Transport, Colis/BO, Alvéoles/Site ...):
 - *format MED pour les échanges entre codes*
 - *Modèle de données commun pour différents problèmes physiques (porosité pour hydraulique et transport)*
- ✓ Couplages de codes



➤ Quelques mots sur Salome

- ✓ Plate-forme de développement générique de pré/post –traitement et de couplage de codes pour la simulation numérique
- ✓ Produite sous forme de logiciel libre dans le cadre du RNTL SALOME (21 partenaires, Open Source)

➤ Utilisation dans Alliances (version 1)

- ✓ Format MED
- ✓ Visualisation
 - *Technologie VTK, format MED*
 - *Visualisation 1D, 2D et 3D*
 - *Déformation, Iso-Valeurs, Plan de coupe, Vecteurs, Lignes de courant*
 - *Animation*
- ✓ Interface graphique
 - *Hydraulique et transport-chimie sur la version 1.3*
 - *Utilisation du module new-Data sur la version 2 : génération automatique à partir du modèle de données et liens bidirectionnels avec le jeu de données*

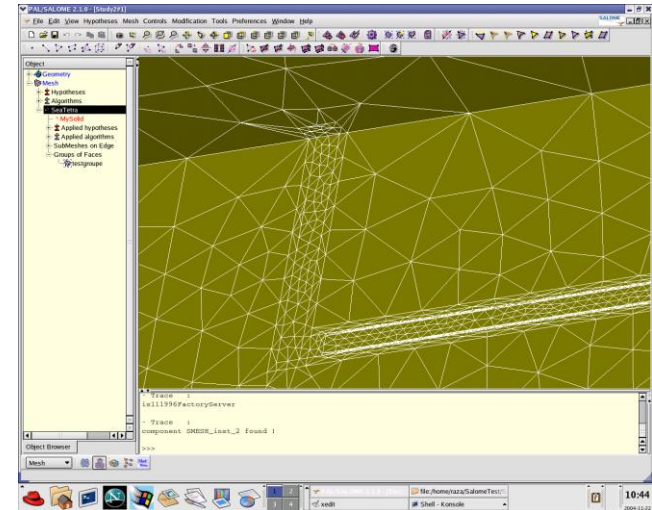


➤ Utilisation prévus dans Alliances (en cours de test)

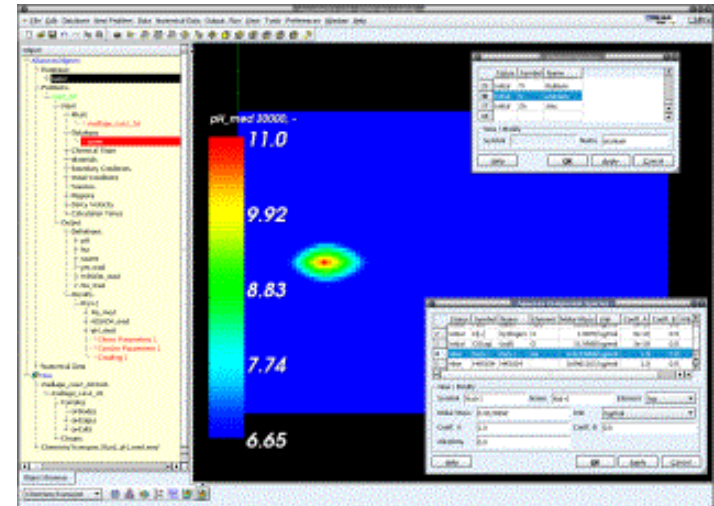
- ✓ Géométrie, Maillage
 - *Gestion de CAO*
 - *Algorithmes de maillages 2D (MEFISTO), 3D (NETGEN)*
 - *Liens vers des maillages commerciaux (GSH3D)*
 - *Outils de contrôle, correction et édition de maillages*
- ✓ Supervision : Enchaînement et distribution multi-machines des calculs
- ✓ Etude : sauvegarde des données
- ✓ Objectif : mener un calcul complet dans l'interface Salome (Géométrie, Maillage, Lancement distribué, Visualisation)

➤ Liens Cast3M/Salome (hors Alliances)

Drivers MED/Cast3M pour les maillages (OK) et champs (en cours)



Maillage SEA (L. Razafindrazaka)



IHM en Chimie-Transport

COMPOSANT CAST3M



➤ **Intégration du composant Cast3M dans Alliances réalisée par F. Malvagi (issu des travaux GIBOC et du composant Cast3M thermique)**

➤ **Principes**

- ✓ Intégration sous forme de librairie dynamique
- ✓ Interfaces en C et Python : connections Python/C/Fortran
- ✓ Pilotage/Couplage via Python entre Cast3M et d'autres Codes

Rq : Cette intégration a été reprise dans le cadre des projets Pleiades et Pactole

COMPOSANT CAST3M



➤ Interface Alliances/Cast3M niveau mémoire

- ✓ « Exécution » de phrases gibianes
- ✓ Accès bi-directionnels aux objets
 - *Entiers, Flottants, Listes, Tables*
 - *Maillages*
 - *Champs par éléments*
 - *Liste des valeurs d'un champ par éléments*
- ✓ Traducteurs MED \leftrightarrow Cast3M des maillages et champs par éléments

➤ Interface Alliances/Cast3M niveau fichier

- ✓ Traduction des fichiers de maillages créés par Gibi en maillages MED

COMPOSANT CAST3M



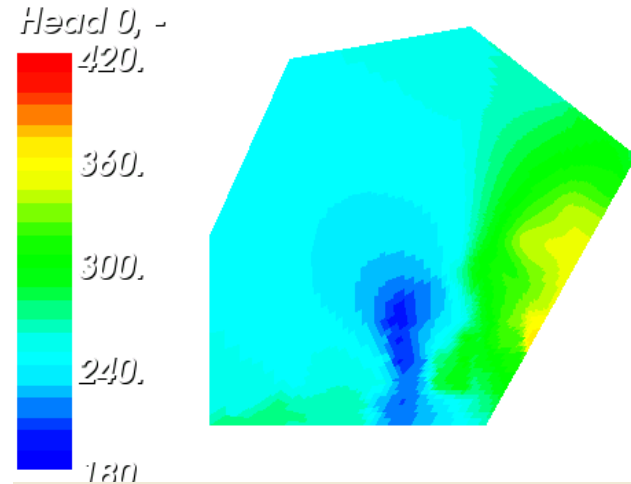
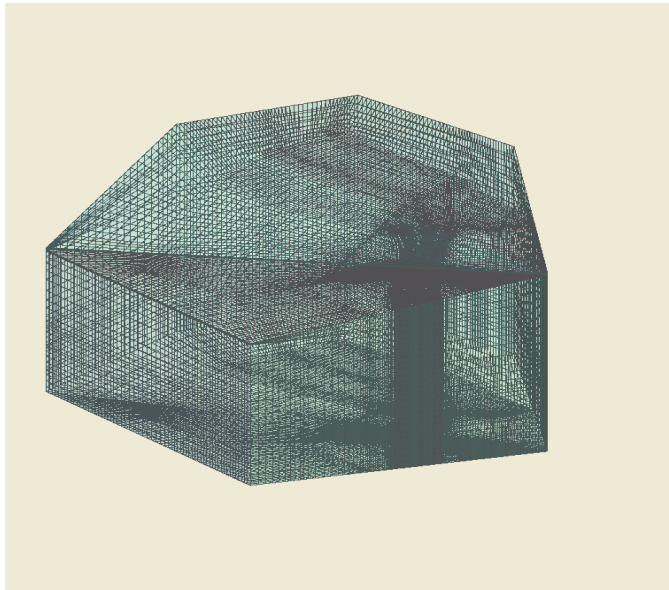
➤ Calculs de sûreté

- ✓ Hydraulique saturée (Darcy) et transport généralisé (convection/diffusion/dispersion+retard non linéaire+précipitation/dissolution+décroissance radioactive) en milieux poreux

- ✓ Améliorations apportées dans Cast3M (G. Bernard-Michel et C. Le Potier) :
 - *Développement d'un nouveau schéma VF pour l'équation de diffusion/convection*
 - *Amélioration de la procédure de transport généralisé*
 - *Accès aux solveurs itératifs de KRES*
 - *Amélioration des pré conditionneurs de KRES*

- ✓ Lancement à partir d'un script Alliances et d'un maillage MED identique Castem/Porflow → comparaison et complémentarité des codes (chaînage croisé hydro/transport avec Castem/Porflow)

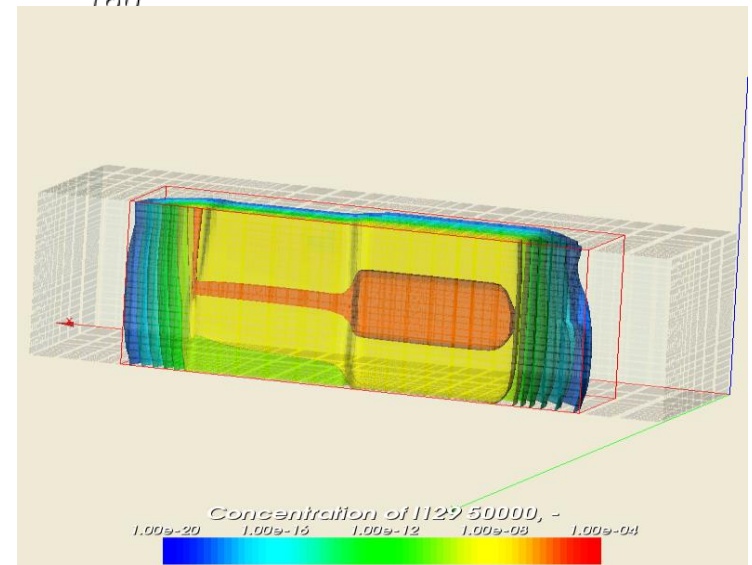
EXEMPLES D'APPLICATIONS : Simulation de sites de stockage (G. Bernard-Michel, C. Le Potier, M. Lamoureux, E. Treille)



Maillage de 500 000 éléments pour un cas de scénario d'évolution normale (N-O)

Charges hydrauliques a $z=-130$ m pour un cas de scénario d'évolution normale (N-E)

Concentration de l'I129 à 50 000 ans pour un cas de scénario d'évolution altérée (S-E)





➤ Couplage chimie-transport :

- ✓ Système à résoudre

$$\omega \frac{\partial A_j}{\partial t} + \omega \frac{\partial F_j(A)}{\partial t} - \nabla \cdot (\bar{D} \nabla A_j - A_j \bar{u}) = \phi_j$$

Rq : Le couplage entre le transport et la chimie se fait via la fonction $F_j(A)$

- ✓ Algorithme de type point fixe actuellement mis en œuvre :

- ✓ *Étape de transport (convection/diffusion/dispersion) pour chaque espèce*

- Entrée : terme source lié aux concentrations fixées

- Sortie : concentration aqueuse

$$\omega \frac{A_j^{n+1,k+1/2} - A_j^n}{\Delta t} + L(A_j^{n+1,k+1/2}) = S_j^n - \omega \frac{F_j^{n+1,k} - F_j^n}{\Delta t}$$

- ✓ *Étape de chimie (spéciation aqueuse, précipitation/dissolution, sorption, cinétique) pour chaque maille*

- Entrée : concentration totale

- Sortie : concentration fixée

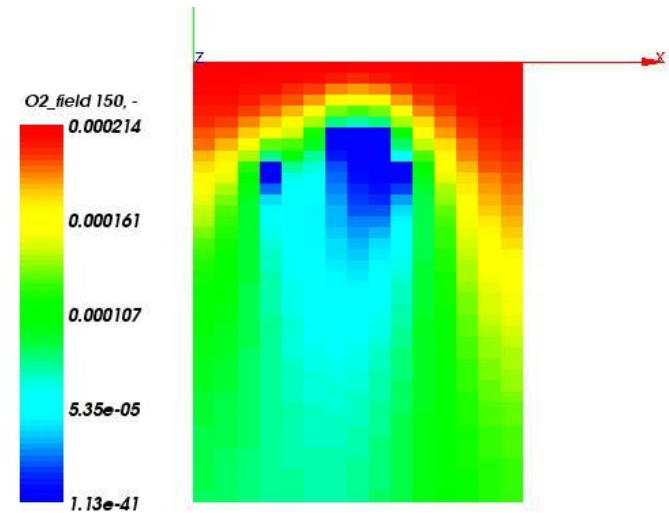
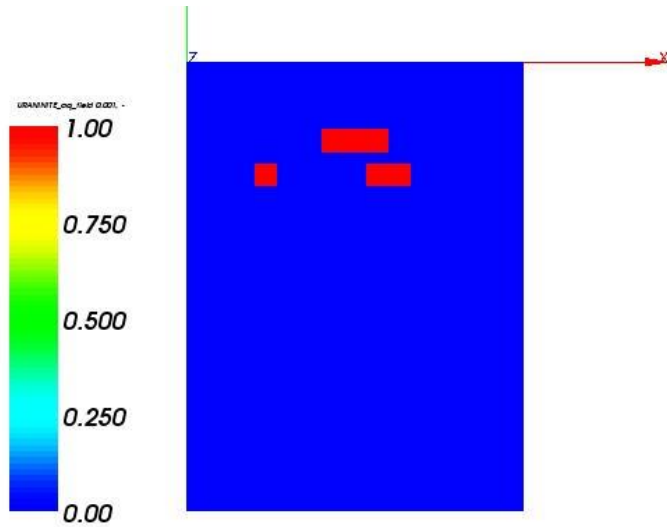
$$F^{n+1,k+1} = f_C(T^{n+1,k+1} = A^{n+1,k+1/2} + F^{n+1,k})$$



➤ Couplage chimie-transport (suite)

- ✓ Couplages Chess, Phreeqc/Cast3M, MT3D
 - *Chess : spéciation chimique, Logiciel ENSMP, Écrit en C++, Accessible par Python via swig*
 - *Phreeqc : spéciation chimique, Logiciel USGS, Écrit en C, Accessible par Python via swig*
 - *MT3D : transport, spéciation chimique, Logiciel USGS, Écrit en F90, Accessible par Python via f2py*
- ✓ Algorithme de couplage en Python « indépendant » des codes ;
Echange à chaque étape des concentrations
- ✓ Travaux de thèse sur des algorithmes de type gradient conjugués non-linéaires (N. Bouillard) → conserve l'approche « couplage de codes » mais algorithme plus implicite
- ✓ Applications
 - *Dégradation des matrices de conditionnement*
 - *Influence de la spéciation sur la migration des RN*

EXEMPLES D'APPLICATIONS : Migration de l'uranium en milieu naturel (C. Mügler, M. Descotes, Julie Colin)

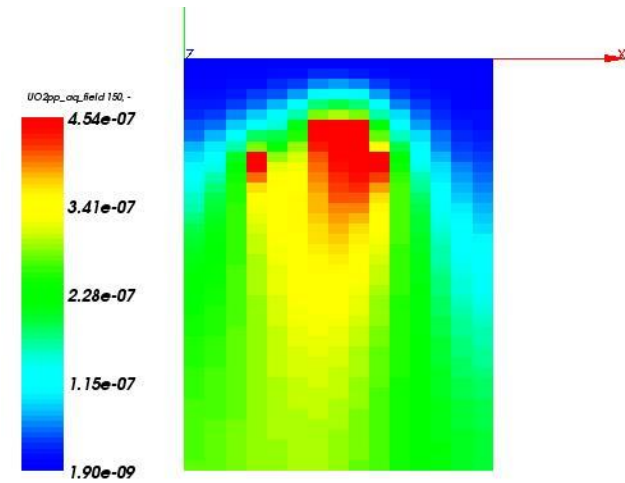


Carte de concentration :

Uraninite à l'instant initial
(N-O)

O₂ à 150 ans (N-E)

UO₂²⁺ à 150 ans (S-E)



COMPOSANT CAST3M



➤ **Avantages**

- ✓ Technique générique et réutilisable pour d'autres applications utilisant Cast3M (Pleiades, Pactole) et aussi pour d'autres codes GIBIANE/Esope
- ✓ Pilotage Python accessible à des développeurs non experts des technologies C, C++
- ✓ Très bien adaptés aux problématiques de couplage de codes
 - *Efficacité de l'échange mémoire*
 - *Écriture intuitive des algorithmes de couplage*

➤ **Inconvénients**

- ✓ Cohabitation en mémoire des maillages et champs MED et Cast3M
- ✓ Debugage complexe

➤ **Actions en cours et questions ouvertes**

- ✓ Intégration « boîte noire » pour les cas hors-couplage
- ✓ Mutualisation des intégrations Alliances/Pleiades → évolution dans cast3M ?
- ✓ Amélioration de la procédure de fermeture/réouverture du composant et de gestion de différents maillages successifs

QUALIFICATION



➤ **Objectifs**

- ✓ Vérifier l'intégration (mêmes résultats hors et dans Alliances)
- ✓ Qualifier les couplages

➤ **Trois niveaux de qualification**

- ✓ Tests unitaires d'intégrations informatiques
- ✓ Comparaisons à des solutions analytiques
- ✓ Traitements cas réels

➤ **Travaux fin 2003 sur des cas préliminaires des études de sûreté ANDRA**

UTILISATIONS ACTUELLES



➤ **Version 1.2 livrée début 2004**

- ✓ Hydro, Transport, Couplage chimie-transport
- ✓ Cast3M, Porflow, Chess, Phreeqc, MT3D

➤ **Version 1.3 livrée mi 2004**

- ✓ Hydraulique insaturée, Modèles de colis
- ✓ Colombo, Prediver

➤ **Utilisations**

- ✓ Calculs de sûreté depuis début 2004 par l'ANDRA et ses sous-traitants
- ✓ Perturbation alcaline dans le cadre du stockage (ANDRA)
- ✓ Migration de l'Uranium en milieu naturel (DM2S/DPC)
- ✓ Simulation d'expériences de diffusion en transport réactif (DPC)

➤ **Diffusion**

- ✓ Partenaires + Collaborations spécifiques (Posiva, Brgm, GdR Momas)
- ✓ Licence en cours de définition

PERPECTIVES



➤ **Version 2.0 (début 2005)**

- ✓ Nouvelles fonctionnalités : Analyse de sensibilité, Thermo-Hydraulique, Thermo-Aéraulique,
- ✓ Nouvelles intégrations : Kalif, Aster, Trio-U

➤ **Version 2.x**

- ✓ Nouvelles fonctionnalités : THM, Transport réactif en milieux insaturés, couplages modèles de colis et corrosion avec l'environnement, couplages THM avec Thermo-Aéraulique
- ✓ Nouvelles méthodes de couplages : algorithmes gradient conjugués non-linéaires