



# Présentation du projet Alliances

**Journées scientifiques du GdR Momas**  
**7 octobre 2004, Univ. Paris 6**  
**Ph. Montarnal, CEA Saclay DEN/DM2S**

# PLAN DE L'EXPOSE

---



- **Contexte et objectifs**
- **Architecture**
- **Qualification**
- **Exemples d'applications**
- **Conclusions et perspectives**

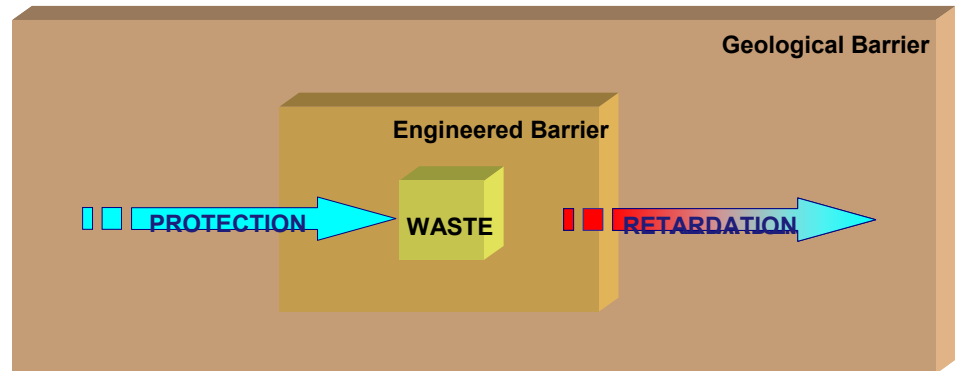
# CONTEXTE ET OBJECTIFS (1/4)



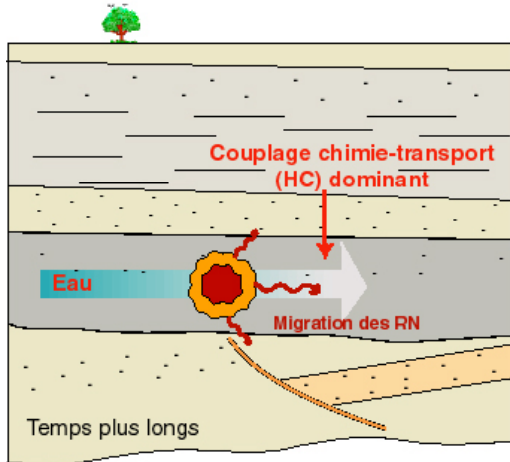
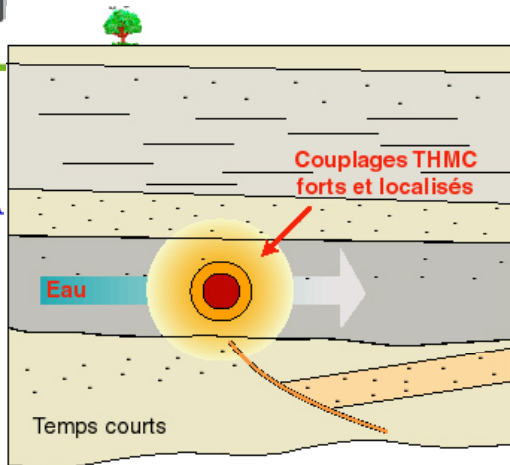
➤ **Dans le cadre de la loi de 91 sur la gestion des déchets, trois axes à explorer**

- ✓ Retraitement
- ✓ Entreposage
- ✓ Stockage en site géologique profond

➤ **Pour les deux derniers points nécessité d'étudier le comportement à long terme des déchets dans l'environnement**

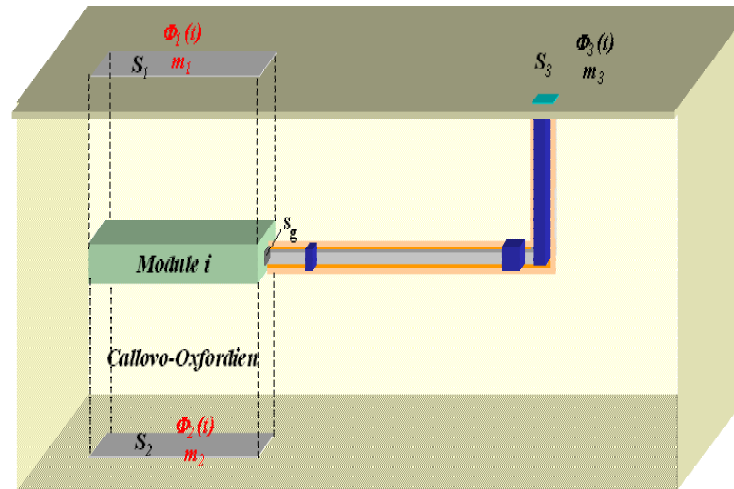
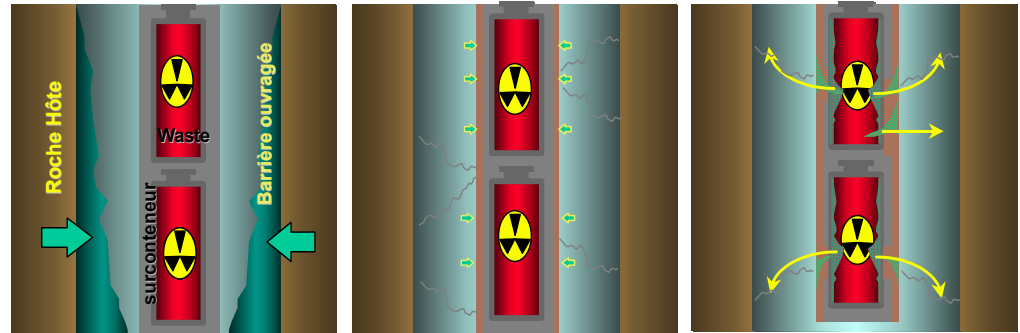


# OBJECTIFS ET CONTEXTE (2/4)



Systeme global (du colis à la biosphere)

→ Différents sous-systèmes

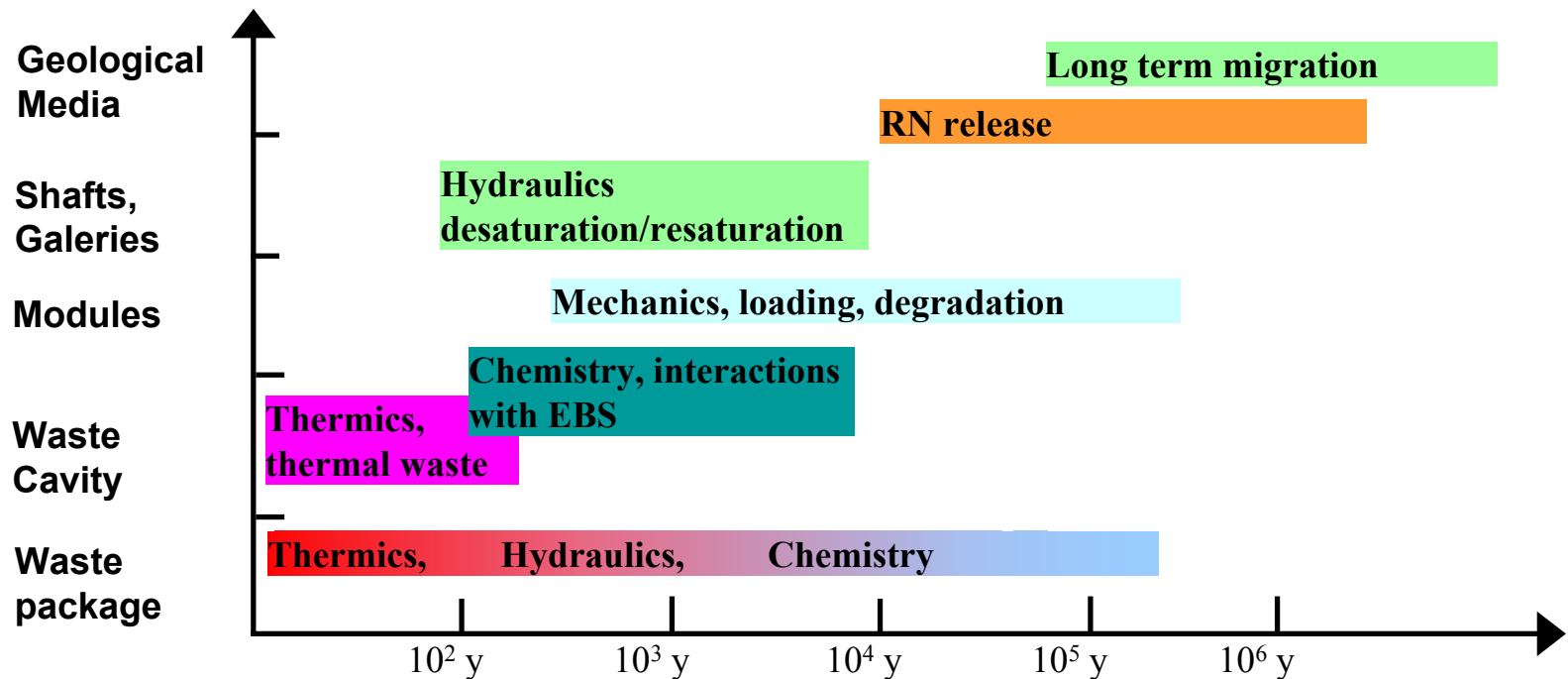


# OBJECTIFS ET CONTEXTE (3/4)



## ➤ Analyse phénoménologique des situations de stockage (APSS ANDRA) :

Analyse croisée des modèles pour chaque élément du stockage et pour chaque échelle de temps



# OBJECTIFS ET CONTEXTE (4/4)



## Besoin d'un outil de simulation

- ✓ Phénomènes multi-échelles et multi-physiques
- ✓ Analyse d'incertitudes
- ✓ Gestion des études, interface utilisateur
- ✓ Difficultés numériques
  - *Couplages forts*
  - *Contrastes des propriétés physiques*
  - *Anisotropies*



Besoin industriel pour les études de sûreté ANDRA en 2004

→ version 1



Enrichissement des modèles physiques et méthodes numériques pour des objectifs R&D → version 2

# DESCRIPTION DU PROJET (1/3)

---



## ➤ Stratégie de développement



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

# DESCRIPTION DU PROJET (2/3)

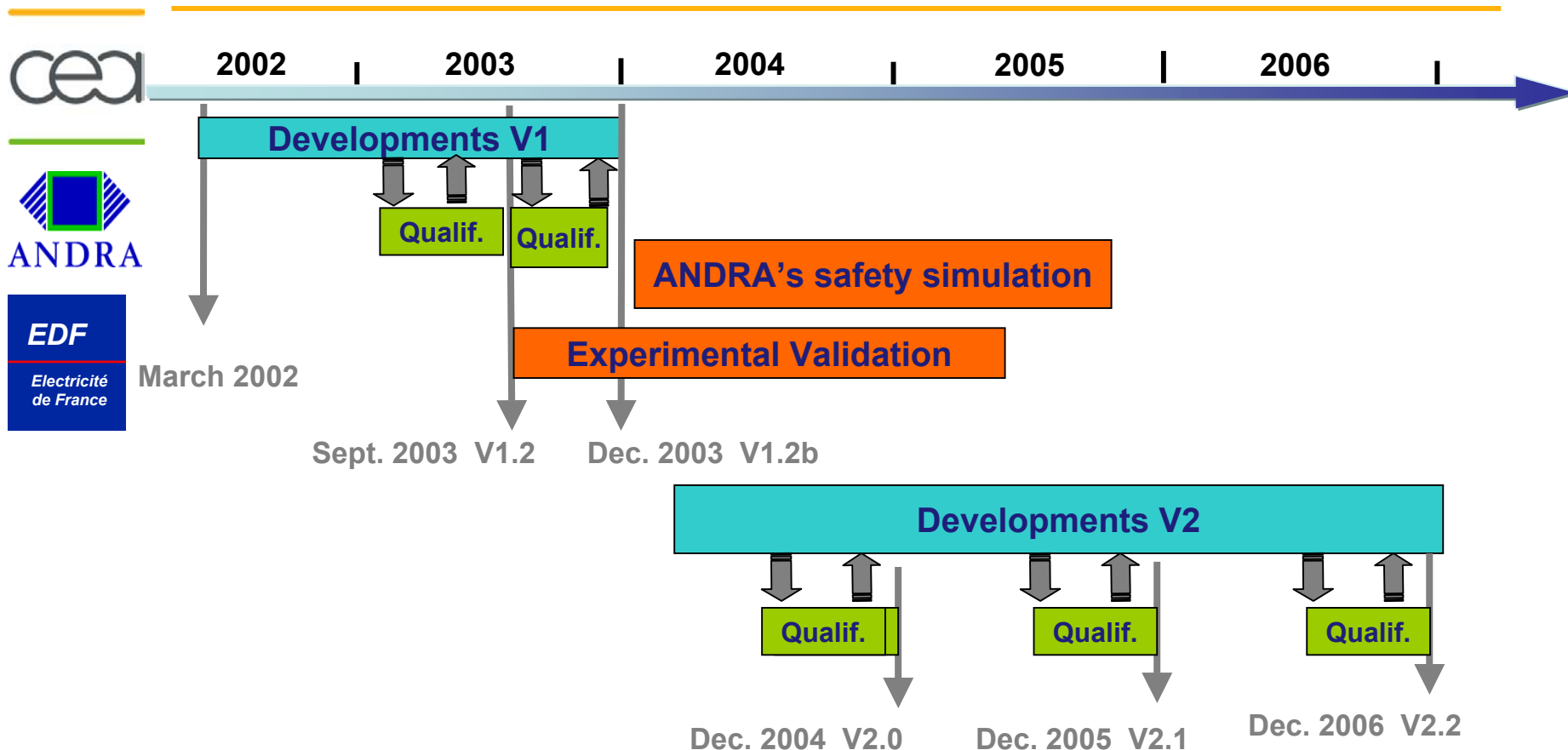


## ➤ Optimisation des ressources

- ✓ Equipe mixte CEA, ANDRA & EDF pour le développement et la validation de la plate-forme :
  - *Physiciens*
  - *Numériciens*
  - *Informaticiens*
  
- ✓ Mise en commun des développements internes : Castem au CEA et Aster à EDF
  
- ✓ Mise en place de collaborations autour des autres codes (Porflow avec ACRI, Chess avec le CIG, Traces avec IMFS...)
  
- ✓ Participations au GdR Momas, Pôle GéochimieTransport sur la partie R&D du projet (algo. couplage, schémas VF)

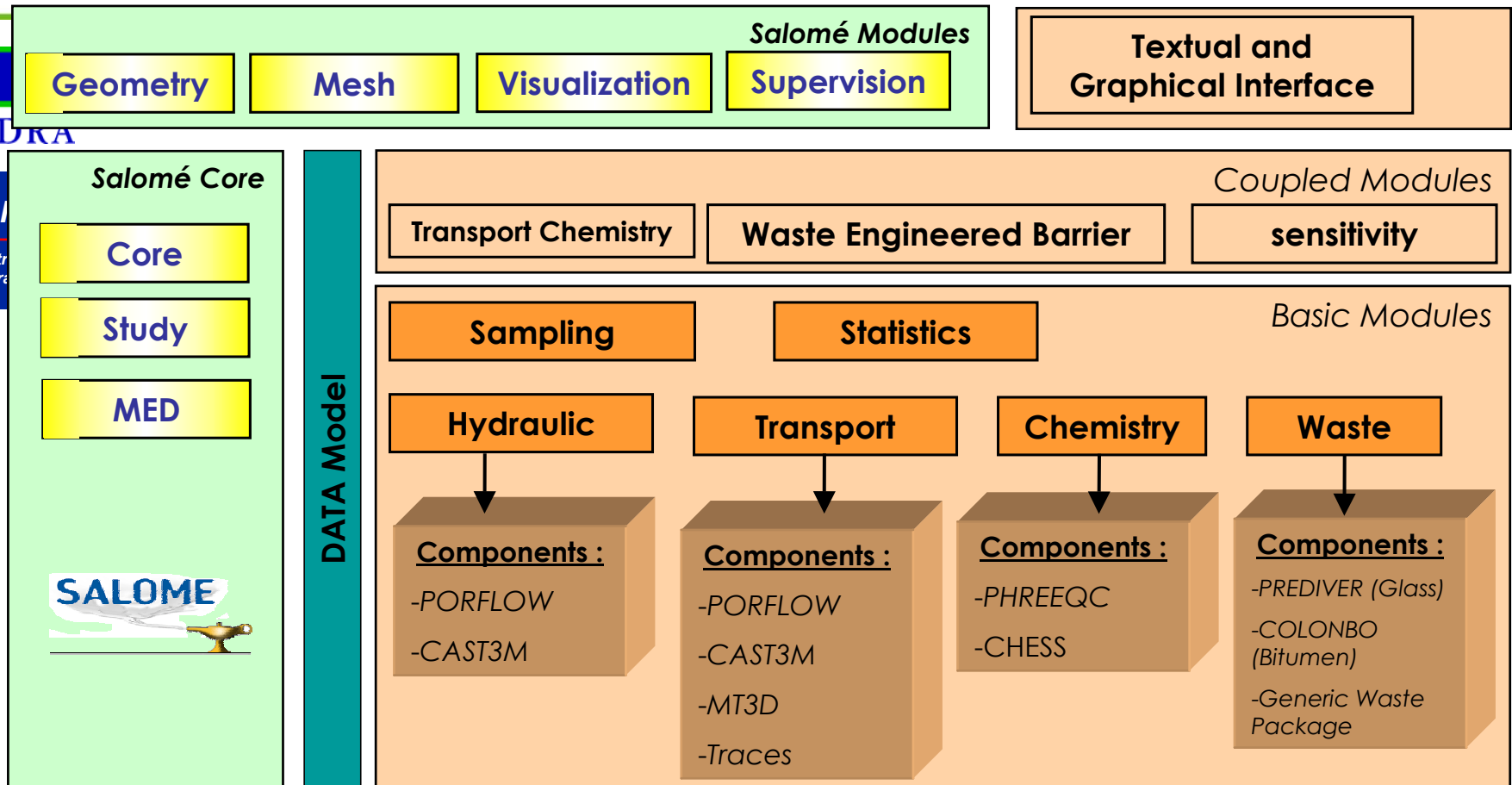


# DESCRIPTION DU PROJET (3/3)



- ✓ **V1** : Hydraulique, migration des RN, Couplage Chimie/Transport, Modèles colis,
- ✓ **V2** : Transport réactif non-saturé, couplages colis/BO, T-H-M, Thermo-Aéraulique , Sensibilité

# ARCHITECTURE (1/5)





## ➤ Langage Python :

- ✓ langage de haut niveau, technologie objet
- ✓ Encapsulation de bibliothèques C, C++ , Fortran
- ✓ Pour Alliances : noyau, algorithmes de couplages et jeux de données en Python

## ➤ Utilisation du noyau Salomé

- ✓ MED : un format unique fichier et mémoire pour le stockage, la manipulation (calcul de norme) et la sauvegarde des maillages et des champs entre les codes
- ✓ Étude : persistance des données

## ➤ Utilisation des composants Salomé

- ✓ Géométrie/Maillage
- ✓ Visualisation
- ✓ Intégration des IHM



## ➤ **Modèle de données Alliances**

- ✓ Format d'échanges entre les différents composants (maillages → champs → Codes → Champs)
- ✓ Contient la physique du problème (maillage+propriétés) et les options numériques (code+paramètres)
- ✓ Permet un passage « automatique » d'un code à l'autre

## ➤ **Intégrations des composants**

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

# ARCHITECTURE (4/5)



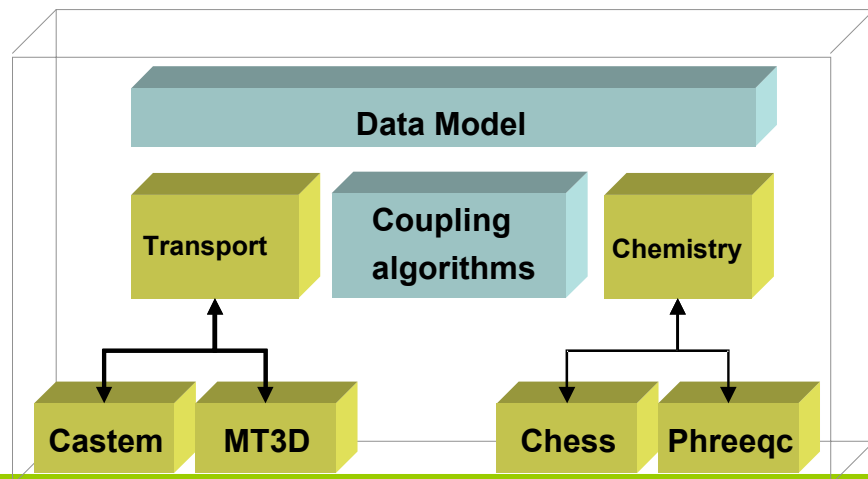
## ➤ Méthodologie de couplage

- ✓ 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 à travers différents codes
- ✓ Comparaison de codes (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

# QUALIFICATION (1/3)



## ➤ Base de qualification

- ✓ Tests unitaires → intégration informatique (environ 800 tests)
- ✓ Tests Physico-numeriques → comportement numérique par comparaison avec des solutions analytiques (environ 100 tests)
- ✓ Tests d'applications → évaluer le comportement du logiciel sur des cas réels par comparaison avec des solutions de références (17 tests)

## ➤ Processus de qualification

- ✓ Qualification réalisée par une équipe de physiciens
- ✓ Intégration des cas tests dans une base de non-régression (tests quotidiens et hebdomadaires)

# QUALIFICATION (2/3)



## ➤ Exemple de grille de tests : Transport étendu grille # 5



Fonctionnalité	Test 5.1	Test 5.2	Test 5.3	Test 5.4	Test 5.5
Dispersion 1D					
Dispersion 2D-3D					
Diffusion 1D					
Diffusion 2D					
Diffusion 3D					
Décroissance					
Filiation					
Sorption					
Précipitation					

- Pour chaque test :
- ✓ Sensibilité au maillage (taille, type d'éléments)
  - ✓ Sensibilité au pas de temps
  - ✓ Sensibilité au code (Castem, Porflow, option num.)

# QUALIFICATION (3/3)

---

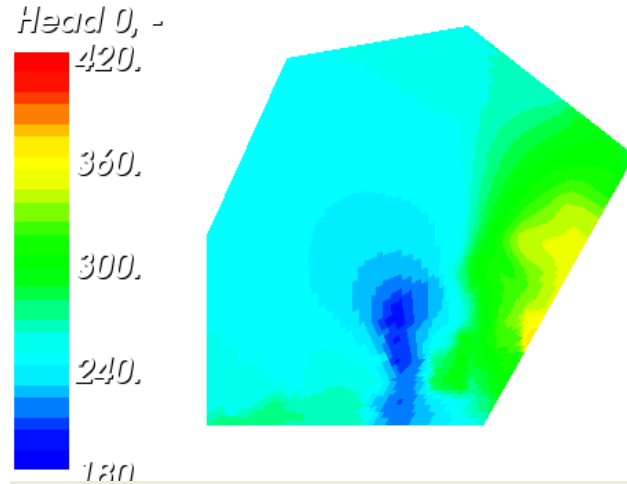
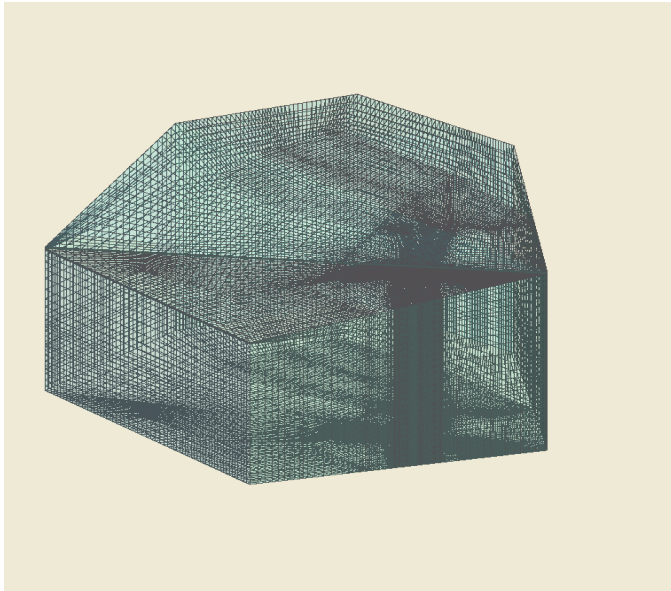


## ➤ Dossier de qualification



1. Tests unitaires d'Alliances (script et bilan quotidien)
2. Base de non régression en continu (script et bilan quotidien)
3. Plan de qualification
4. Fiches de test (analyse des résultats)

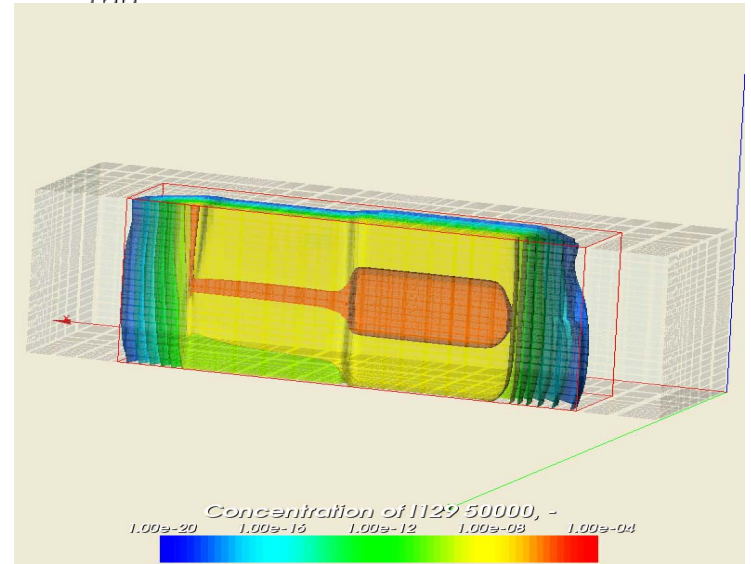
# EXEMPLES D'APPLICATIONS (1/2) : Simulation de sites de stockage



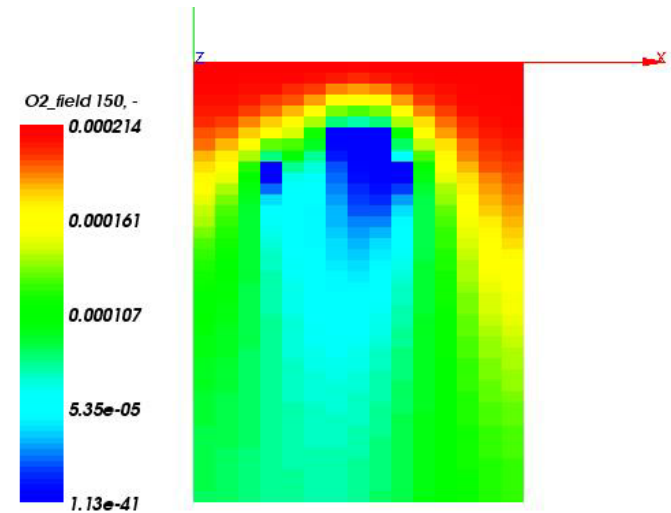
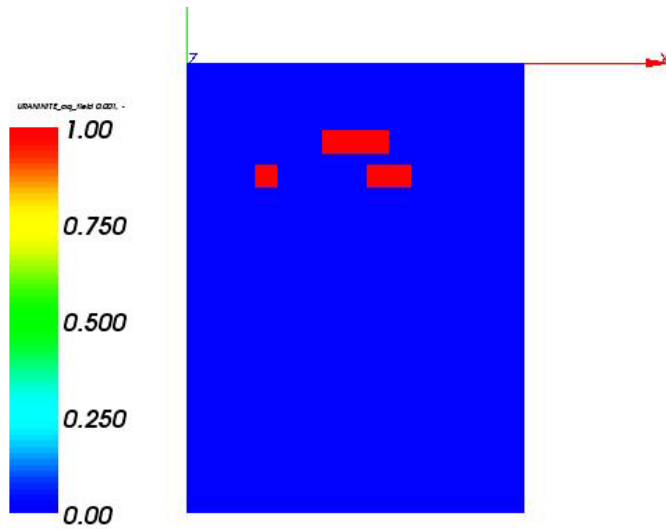
Maillage de 500 000 éléments pour un cas de scénario d'évolution normale (N-O)

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)



# EXEMPLES D'APPLICATIONS (2/2) : Migration de l'uranium en milieu naturel

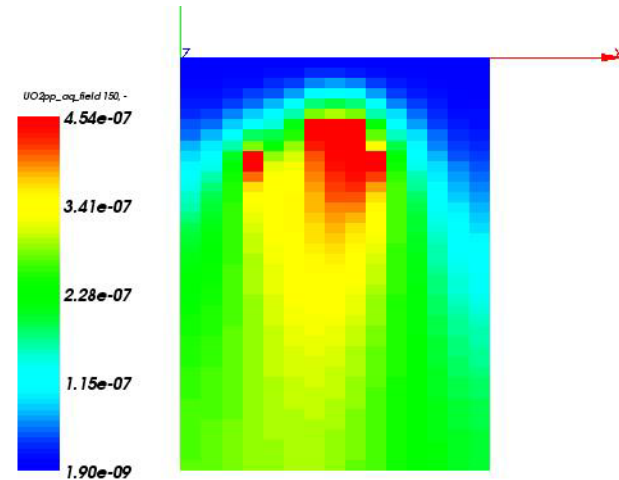


Carte de concentration :

Uraninite à l'instant initial  
(N-O)

O<sub>2</sub> à 150 ans (N-E)

UO<sub>2</sub><sup>2+</sup> à 150 ans (S-E)



# CONCLUSION ET PERSPECTIVES



## ➤ Développement en deux ans d'un outil numérique industriel

- ✓ Multi-Physiques : hydraulique, migration des RN et couplage chimie/transport
- ✓ Importante phase de qualification
- ✓ Développé pour assurer la flexibilité et l'évolution de l'outil (modèle de données commun, modularité)

## ➤ Perspectives

- ✓ Incorporation d'autres fonctionnalités
  - *Transport en milieux non-saturés*
  - *Etude de la zone endommagée en champ proche (THM)*
- ✓ Amélioration des schémas numériques et de couplages