

Méthodes numériques pour le transport et la diffusion en milieu poreux aleatoire

Atelier Incertitudes et systèmes d'évolution du GDR Mascotnum

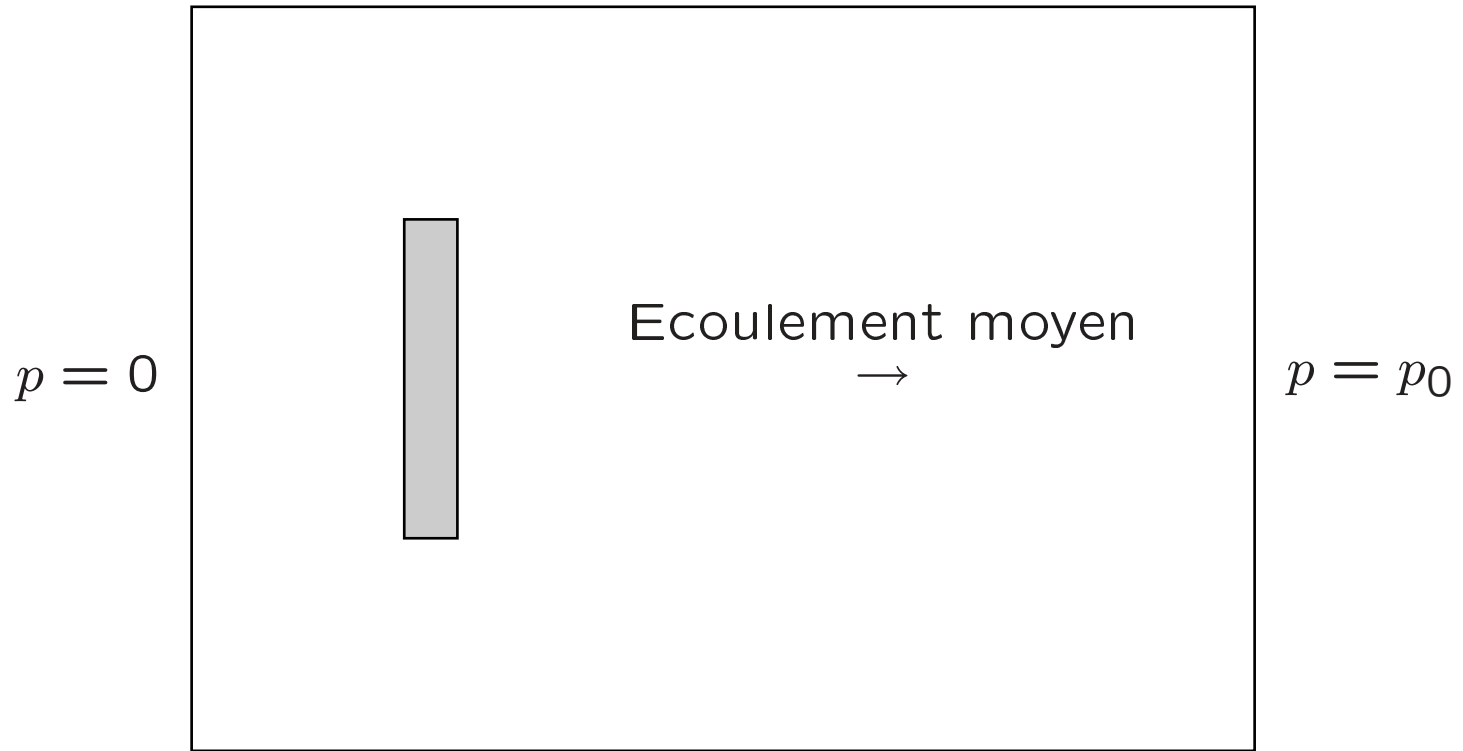
Julia Charrier, Inria Rennes et Ens Cachan Bretagne

Modélisation

Écoulement de l'eau en milieu poreux, en régime stationnaire

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

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0$$



$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0$$

Domaine pour l'équation sur la pression

Modélisation

Transport diffusion du soluté

- On suppose que le soluté est inerte, on considère uniquement une diffusion moléculaire, isotrope et constante.
- 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** :
$$\frac{\partial c(\omega, x, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (c(\omega, x, t)v(\omega, x)) - D\Delta c(\omega, x, t) = 0.$$

Modélisation

Objectif : calcul de la dispersion moyenne

On définit :

- Centre de masse : $G(\omega, t) = \int_D c(\omega, x, t) x dx$

- Extension du soluté :

$$S(\omega, t) = \int_D c(\omega, x, t) (\langle x - G, \vec{e}_1 \rangle^2 \vec{e}_1 + \langle x - G, \vec{e}_2 \rangle^2 \vec{e}_2) dx$$

- Dispersion : $D(\omega, t) = \frac{dS(\omega, t)}{dt}$.

- Dispersion moyenne : $D(t) = E_\omega[D(\omega, t)]$.

Méthode numérique

Méthode de Monte Carlo

- Objectif : calculer la dispersion moyenne $E_\omega[D(\omega, t)] = D(t)$.
- 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 $D_i(t) : \text{problème déterministe}$.
- Méthode de Monte carlo : presque-sûrement, on a

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

- On est ramené à un problème déterministe : résoudre le couplage de l'EDP elliptique et de l'EDP de transport diffusion.

Méthode numérique

Problème déterministe : Calcul de la vitesse par éléments finis

- On calcule une approximation p^h de la pression p en utilisant des éléments finis d'ordre 1, on obtient une **vitesse approchée** $v^h(x) = -a(x)\nabla_x p^h(x)$.
- Calcul de la **concentration approchée** 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.

Méthode numérique

Problème déterministe : Calcul de la concentration par une méthode particulière avec vitesse exacte

- **Proposition** Soit c_0 une fonction densité, alors dans \mathbb{R}^2 , sous des hypothèses de régularité, la solution $c(x,t)$ de l'équation de Fokker Planck :

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

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

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

- On utilise une méthode d'Euler pour obtenir une solution approchée de l'EDS : $X_{n+1} = X_n + v(X_n)\Delta t + \sqrt{2D\Delta t}N_n$

Méthode numérique

Problème déterministe : Calcul de la concentration par une méthode particulière avec vitesse approchée

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 $G(n\Delta t)$ par $\bar{G}(n\Delta t) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M X_n^j$.
- On approche l'extension du soluté $S(n\Delta t)$ par

$$\bar{S}(n\Delta t) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left[\langle X_n^j - \bar{G}(n\Delta t), \vec{e}_1 \rangle^2 \vec{e}_1 + \langle X_n^j - \bar{G}(n\Delta t), \vec{e}_2 \rangle^2 \vec{e}_2 \right]$$

- On approche la dispersion $D(n\Delta t)$ par la dérivée temporelle approchée de $\bar{S}(n\Delta t)$: $\bar{D}(n\Delta t) = \frac{\bar{S}((n+1)\Delta t) - \bar{S}(n\Delta t)}{\Delta t}$.

Analyse numérique d'un problème plus "régulier"

Equations et hypothèses : EDP elliptique

- On cherche à calculer la pression hydraulique $p(\omega, x)$.
 - **Domaine** : Un ouvert D de \mathbb{R}^2 de classe \mathcal{C}^6 .
 - **Conditions aux bords** : Conditions de type Dirichlet, avec une fonction $p_0 \in L^\infty_\omega(\Omega, H^6(\partial D))$ au bord.
 - **Champ de perméabilité a** : $a \in L^\infty(\Omega, \mathcal{C}^5(D))$, avec coercivité uniforme i.e. $\exists a_{min} > 0$ tq ω pp, $\forall x, a(\omega, x) > a_{min}$.
 - **EDP elliptique** : $\nabla \cdot (a(\omega, x) \nabla p(\omega, x)) = 0$.
- La vitesse de l'eau est : $v(\omega, x) = -a(\omega, x) \nabla p(\omega, x)$
 - On prolonge cette fonction sur \mathbb{R}^2 , on obtient une fonction $\in L^\infty_\omega(\Omega, H^5(\mathbb{R}^2)) \subset L^\infty(\Omega, \mathcal{C}^3(\mathbb{R}^2))$ à dérivées bornées
 - On prolonge également v^h , son approximation par éléments finis d'ordre 1, en une fonction appartenant à $L^\infty_\omega(\Omega, L^\infty(\mathbb{R}^2))$

Analyse numérique d'un problème plus "régulier"

Equations et hypothèses : EDP transport diffusion

La concentration en soluté $c(\omega, x, t)$ vérifie l'EDP suivante.

- **Domaine** : \mathbb{R}^2
- **Condition initiale** : $c(\omega, x, 0) = c_0(x)$
où c_0 est une densité admettant un moment d'ordre 3.
- **Equation de transport diffusion** :
$$\frac{\partial c(\omega, x, t)}{\partial t} + v(\omega, x) \cdot \nabla c(\omega, x, t) - D \Delta c(\omega, x, t) = 0.$$

Analyse numérique d'un problème plus "régulier"

Description de la méthode numérique

- On fait N simulations indépendantes du champ de perméabilité $a(\omega, x)$.
- Pour $i=1\dots N$ on a donc un champ de perméabilité $a^i(x)$, on en déduit une approximation par élément finis (d'ordre 1) de la vitesse : $v_h^i(x)$.
- Pour $i=1\dots N$, on a une vitesse $v_h^i(x)$, à partir de laquelle on construit M processus stochastiques indépendants, pour $j=1\dots M$:

$$\begin{aligned} X_{n+1}^{i,j} &= X_n^{i,j} + v_i^h(X_n^{i,j})\Delta t + \sqrt{2D\Delta t}N_n^{i,j} \\ X_0^{i,j} &\sim \text{densité } c_0 \end{aligned}$$

Analyse numérique d'un problème plus "régulier"

Description de la méthode numérique

- Pour chaque i , (ie chaque réalisation du champ de perméabilité), on approche par une méthode de Monte-Carlo :
 - Le centre de masse $G^i(n\Delta t)$ par $\bar{G}^i(n\Delta t) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M X_n^{i,j}$.
 - L'extension du soluté $S^i(n\Delta t)$ par $\bar{S}^i(n\Delta t) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left(\langle X_n^{i,j} - \bar{G}^i(n\Delta t), \vec{e}_1 \rangle^2 \vec{e}_1 + \langle X_n^{i,j} - \bar{G}^i(n\Delta t), \vec{e}_2 \rangle^2 \vec{e}_2 \right)$
 - La dispersion $D^i(n\Delta t)$ par la dérivée temporelle approchée de $\bar{S}^i(n\Delta t)$: $\bar{D}^i(n\Delta t) = \frac{\bar{S}^i((n+1)\Delta t) - \bar{S}^i(n\Delta t)}{\Delta t}$.
- Finalement, on approche l'extension moyenne par $\frac{\sum_{i=1}^N \bar{S}^i}{N}$ et la dispersion moyenne par $\frac{\sum_{i=1}^N \bar{D}^i}{N}$.

Analyse numérique d'un problème plus "régulier"

Erreur commise sur l'extension moyenne

- L'erreur commise sur l'extension moyenne est alors

$$E(\omega, \xi, t) = E_\omega[S(\omega, t)] - \frac{\sum_{i=1}^N \bar{S}^i(\xi, t)}{N}.$$

- On est donc ramené à évaluer, pour ϕ régulière, à croissance polynomiale, la quantité :

$$E_\omega E_\xi[\phi(X)] - \frac{1}{N} \frac{1}{M} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \phi(X_n^{i,j}) = E_1 + E_2 + E_3$$

Analyse numérique d'un problème plus "régulier"

Erreur commise sur l'extension moyenne

•

$$E_1 = E_\omega[E_\xi[\phi(X)] - E_\xi[\phi(X_n^{i,j})]]$$

or ω pp,

$$|E_\xi[\phi(X)] - E_\xi[\phi(X_n^{i,j})]| \leq CE[X_0^3](\Delta t + \|v - v^h\|_{L^\infty})$$

•

$$E_2 = E_\omega[E_\xi[\phi(X_n^{i,j})]] - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_\xi[\phi(X_n^{i,j})]$$

donc

$$\|E_2\|_{L_\omega^2} \leq \frac{1}{\sqrt{N}} \|E_\xi[\phi(X_n^{i,j})]\|_{L_\omega^2}$$

Analyse numérique d'un problème plus "régulier"

Erreur commise sur l'extension moyenne

•

$$E_3 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (E_\xi[\phi(X_n^{i,j})] - \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \phi(X_n^{i,j}))$$

or $\forall i, \omega_{pp}$

$$\|E_\xi[\phi(X_n^{i,j})] - \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \phi(X_n^{i,j})\|_{L_\xi^2} \leq \frac{1}{\sqrt{M}} \|\phi(X_n^{i,j})\|_{L_\xi^2}$$

Proposition

$$\|E\|_{L_\omega^2 L_\xi^2 L_{t \leq T}^\infty} \leq C \left(\frac{1}{\sqrt{N}} + \frac{1}{\sqrt{M}} + \Delta t + h |\ln h| \right) E[X_0^3]$$

où C est une constante indépendante de X_0, t, h, N et M .

Méthodes spectrales stochastiques : cas d'une EDP elliptique

Description du problème

- Soit D un domaine polygonal, convexe, borné de \mathbb{R}^d .
- Soit (Ω, \mathcal{F}, P) un espace de probabilité.
- Soient $a, f : \Omega \times D \rightarrow \mathbb{R}$ des fonctions $\mathcal{F} \otimes B(D)$ mesurables.
- On cherche une fonction $u : \Omega \times D \rightarrow \mathbb{R}$ telle que pour P -presque tout ω dans Ω , on ait

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

Méthodes spectrales stochastiques : cas d'une EDP elliptique

Introduction

- **Objectifs** : Obtenir la loi de la solution.
Coût compétitif avec les méthodes de Monte-Carlo.
- **Hypothèses requises** : du même type que pour le problème déterministe, mais uniformément par rapport à ω 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.

Méthodes spectrales stochastiques : cas d'une EDP elliptique

Approximation du 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 décorrélées (idéalement indépendantes) et facilement simulables. N petit.
- Deux principales méthodes utilisées :

– Développement de Karhunen-Loève :

$$a(\omega, x) = E_\omega[a](x) + \sum_{n=1}^{+\infty} \sqrt{\lambda_n} b_n(x) Y_n(\omega) .$$

– Décomposition en polynômes du chaos (éventuellement général-

isé) :
$$a(\omega, x) = \sum_{n=1}^{+\infty} a_n(x) \phi_n(Y(\omega)) .$$

Méthodes spectrales stochastiques : cas d'une EDP elliptique

Problème équivalent

Le problème ?? 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 :

$$\begin{aligned} &\int_\Gamma \int_D \rho(y) a(y, x) \nabla_x u(y, x) \cdot \nabla_x v(y, x) dx dy \\ &= \int_\Gamma \int_D \rho(y) f(y, x) v(y, x) dx dy \\ &\forall v \in L^2_\rho(\Gamma, H_0^1(D)) \end{aligned}$$

Où Γ est inclus dans \mathbb{R}^N (support des variables aléatoires).

Méthodes spectrales stochastiques : cas d'une EDP elliptique

Méthodes intrusives : type Galerkin

On cherche à approcher $u \in L^2_\rho(\Gamma, H^1_0(D))$ telle que $\forall v \in L^2_\rho(\Gamma, H^1_0(D))$

$$\int_\Gamma \int_D \rho(y) a(y, x) \nabla_x u(y, x) \cdot \nabla_x v(y, x) dx dy = \int_\Gamma \int_D \rho(y) f(y, x) v(y, x) dx dy$$

- X sous espace vectoriel de dimension finie de $H^1_0(D)$:
espace d'éléments finis...pour l'approximation en x .
- Y sous espace vectoriel de dimension finie de $L^2(\Gamma)$:
espace de polynômes ou de polynômes par morceaux...pour l'approximation en y .
- On résout la formulation variationnelle sur le sous espace de dimension finie $X \otimes Y$: 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
→ on a alors $\dim Y$ "problèmes déterministes".

Méthodes spectrales stochastiques : cas d'une EDP elliptique

Méthodes non intrusives : collocation

On cherche u telle que : $\forall y \in \Gamma$

$$-\nabla_x(a(y, x)\nabla_x u(y, x)) = f(y, x)$$

$$u(y, x) = 0$$

- On choisit des points de Γ : $y_1 \dots y_M$, on calcule les M solutions $u(y_i, \cdot)$ des problèmes déterministes correspondants:

$$-\nabla_x(a(y_i, x)\nabla_x u(y_i, x)) = f(y_i, x)$$

$$u(y_i, x) = 0$$

- 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.

Méthodes spectrales stochastiques : cas d'une EDP elliptique

Méthodes non intrusives : collocation

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.

Méthodes spectrales stochastiques : cas d'une EDP elliptique

Cadre d'application

- Sous certaines hypothèses on montre la convergence de ces méthodes, et obtient un majorant de l'erreur, 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.

Méthodes spectrales stochastiques : cas d'une EDP elliptique

Intrusif/non intrusif

- Avantages de l'intrusif :
 - Problème toujours 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.

Méthodes spectrales stochastiques : cas d'une EDP elliptique

Bibliographie

- I. Babuska, R. Tempone and Georgios E. Zouraris
Solving elliptic boundary value problems with uncertain coefficients by the finite element method : the stochastic formulation, 2004.
- I. Babuska, F. Nobile and R. Tempone
A stochastic collocation method for elliptic partial differential equations with random input data, 2007.
- F. Nobile, R. Tempone and C. Webster
An anisotropic sparse grid stochastic collocation method for partial differential equations with random input data , 2008.
- Voir aussi : Ghanem et Spanos, Xiu et Karniadakis pour les polynômes du chaos entre autres.