Algorithmes et modèles pour les problèmes de transport avec chimie,

N. Bouillard, R. Eymard, R Herbin Ph. Montarnal

Les différents types de stockage ou d'entreposage des déchets radioactifs posent tous le problème de la migration des radionucléides à travers les différentes barrières envisagées. La modélisation de cette migration prend en compte des phénomènes de transport des espèces dans les barrières (considérées comme milieux poreux) ainsi que les différentes réactions chimiques intervenant dans ce milieu.
Le but de ce travail est de développer des algorithmes de résolution numérique pour le transport de M espèces chimiques réactives dans un milieu poreux saturé, de porosité constante égale à ω.
Pour chaque espèce j, on note $\mathcal{C}_j$ la concentration de sa phase mobile, $\mathcal{F}_j$ la concentration de sa phase fixée, on note $\mathcal{T}_j$ sa concentration totale. Un modèle de transport classique s'écrit :

$$\begin{cases} \omega\partial_t\mathcal{T}_j - \mathcal{L}(\mathcal{C}_j) = 0, \\ \mathcal{C}_j = \Psi_j(\mathcal{T}_1, \ldots, \mathcal{T}_M), \end{cases}$$

où $\mathcal{L}$ est l'opérateur de transport, défini par :

$$\mathcal{L}(c) = -\mathbf{u}\cdot\nabla c + \mathrm{div}(\mathbf{D}\nabla c), \tag{1}$$

et Ψ_j est l'opérateur chimique pour la composante j, fonction des concentrations totales $\mathcal{T}_1, \ldots, \mathcal{T}_M$. $\mathbf{u}$ est la vitesse de Darcy et $\mathbf{D}$ le tenseur de diffusion-dispersion. Pour la mise en oeuvre nous avons fait le choix d'utiliser un code de chimie externe, le code CHESS de l'Ecole des Mines de Paris.
On discrétise les équations à l'aide d'un schéma volumes finis décentré amont. Le système ainsi obtenu peut se mettre sous la forme

$$A\mathcal{P}^n(\mathcal{X}^{n+1}) + B\mathcal{X}^{n+1} = S^n,$$

où A et B sont des matrices, $\mathcal{P}^n$ un opérateur non linéaire dépendant de n et des opérateurs de chimie Ψ_j ainsi que des propriétés de transport; $\mathcal{X}$ représente $\mathcal{T}$, $\mathcal{C}$ ou $\mathcal{F}$.
On met en oeuvre sur ce système plusieurs techniques de résolution, en particulier les méthode de Newton et du point fixe. Dans le cas de la méthode de Newton, le calcul de la Jacobienne s'effectue par différentiation numérique.

Nous avons également mis en oeuvre une méthode de gradient conjugué récemment introduite pour des codes d'ingénierie pétrolière. Les premiers résultats obtenus démontrent l'intérêt de cette méthode par rapport à un point fixe.

Enfin, nous avons établi un premier petit modèle de dissolution-précipitation qui nous paraît intéressant à étudier sur le plan mathématique, ainsi que sur le plan de l'analyse des méthodes numériques.

$$\begin{cases} u_t - a\Delta u = -w_t \\ v_t - b\Delta v = -w_t \\ w_t = cF(u,v)\chi_{\{w>0\}} \end{cases}$$

avec $F(u,v) = u^\alpha v^\beta - K$, u et v sont les concentrations molaires en solution de deux espèces, w est la quantité de précipité formé, c est la cinétique de la formation de précipité ; α et β les coefficients stoechiométriques.
Ce modèle contient l'apparition de précipité et sa redissolution.