



**Institut
de mécanique
des fluides
et des solides**
UMR 7507

Journées scientifiques du GDR MoMaS

Projet de Benchmaks couplage chimie - transport

L'objectif de cette soirée est de définir un projet de benchmark sur les modèles numériques de transport réactif en milieu poreux. Les discussions préliminaires mettent en évidence la nécessité de tester en priorité la pertinence des méthodes numériques et des choix algorithmiques. La capacité des modèles à prendre en compte tel ou tel phénomène spécifique ne devrait pas être un critère discriminant.

Jérôme CARRAYROU
Maître de conférence
IUT Louis Pasteur

Les principaux problèmes numériques et algorithmiques liés à la modélisation du transport réactif en milieu poreux seront présentés :

Couplage chimie – transport : approche globale ou par séparation d'opérateur ? Quelle formulation pour l'approche globale, quel schéma de séparation d'opérateur ?

Modélisation du transport : comment maîtriser l'amplification de la diffusion numérique par l'introduction des phénomènes chimiques ? Comment maîtriser les problèmes d'instabilité numérique (concentrations négatives) ?

Modélisation de la chimie : comment surmonter les risques de non-convergence pour la chimie à l'équilibre instantané ? Comment associer une description cinétique pour certains phénomènes et une description à l'équilibre instantané pour d'autres ?

La discussion portera sur les différents problèmes numériques rencontrés ;

- recensement des problèmes ?
- quelles sont les conditions favorables à l'apparitions de ces problèmes ?
- peut-on les réunir dans un cas-test ?

sur le choix d'un ensemble de phénomènes chimiques minimal ;

- chimie en solution (acide-base, complexation, oxydo-réduction ?
- précipitation dissolution ?
- chimie aux interfaces ?
- colloïdes ?
- cinétique ?
- croissance bactérienne ?

sur la définition de critères de comparaison entre les modèles utilisés ;

- mesure du temps CPU ?
- mesure de la place mémoire ?
- solutions de références ?

**Institut de mécanique
des fluides et des solides**

2 rue Boussingault
F-67000 Strasbourg

Tél. : (33) 03 90 24 29 16

Fax : (33) 03 88 61 43 00

carrayro@imfs.u-strasbg.fr

