

# MODÉLISATION PAR HOMOGENÉISATION DU TRANSPORT EN MILIEUX POREUX, AVEC ADSORPTION, PROCESSUS D'ÉCHANGES SURFACIQUES MULTI-SITES ET PRÉCIPITATIONS/CRISTALLISATIONS.

**Thierry Clopeau, Andro Mikelić et Carole Rosier**

LaPCS, UFR Mathématiques  
Université Claude Bernard Lyon 1  
Bât. du Doyen Jean Braconnier  
21 avenue Claude Bernard  
69622 Villeurbanne Cedex \*

**Résumé.** Nous développons la modélisation couplée chimie/transport dans un contexte de stockage en milieu poreux. On commence par des problèmes faiblement couplés : on considère que le soluté évolue dans un milieu poreux statistiquement homogène, que les réactions chimiques sont suffisamment rapides et réversibles et que le processus dominant est l'adsorption. Dans ce cas on trouve que les modèles obtenus par homogénéisation coïncident avec les modèles utilisés en chimie par Lichtner, Rubin et al déduits par modélisation directe. Nous présentons la résolution numérique des équations aux dérivées partielles décrivant des écoulements à travers un milieu poreux, en présence d'échanges massiques, de réactions chimiques et d'adsorption. L'adsorption est décrite par les formulations de Langmuir et Freundlich, qui sont des formulations physiquement réalistes pour décrire l'interaction surfacique entre un gaz et un solide. Dans les équations efficaces, obtenues en utilisant la technique d'homogénéisation périodique et stochastique des équations aux dérivées partielles paraboliques non-linéaires, on voit qu'il y a apparition d'un terme de retard dans l'équation effective. On compare ces équations avec les modèles  $K_d$  développés en utilisant une modélisation compatible avec la thermodynamique et la méthode de prise de moyenne. Finalement, nous avons développé des méthodes numériques adaptées à la présence des termes de retard, induits par l'échelle rapide.

---

\*Ce travail a été financé par le **Groupe de recherche (GDR) MOMAS, (MOdélisation MATHématique et Simulations numériques liées aux études d'entreposage souterrain de déchets radioactifs)**, comme le projet T3.04 *Contribution aux changements d'échelle dans la modélisation de processus de dissolution en milieu poreux à partir de modèles microscopiques* du groupe T3 : *Modélisation mathématique et changements d'échelles*

Puis nous considérons des modèles plus compliqués. Nous regardons les problèmes suivants :

- Les écoulements non-saturés avec transport de solutés. Ici nous sommes confrontés à l'homogénéisation des équations de Richards et nos résultats confirment la modélisation directe dans le cas d'un couplage faible avec le transport.
- L'obtention des systèmes d'équations paraboliques non-linéaires couplées, contenant des termes convectifs et des non-linéarités, dépendant de l'ensemble des concentrations des solutés présents au sein du REV.
- La modélisation des effets de dissolution et précipitation par homogénéisation. Le but est d'arriver à un problème de Stefan efficace. Les conditions de Stefan nous permettent de déterminer la frontière libre de dissolution / précipitation.