

Algorithmes et modèles pour les problèmes de transport avec chimie

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

MOMAS, novembre 2003

Le problème de transport-chimie

- Migration des radionucléides à travers les différentes barrières envisagées pour le stockage ou l'entreposage des déchets radioactifs.

Le problème de transport-chimie

- Migration des radionucléides à travers les différentes barrières envisagées pour le stockage ou l'entreposage des déchets radioactifs.
- Système nonlinéaire couplé faisant intervenir un "opérateur de transport" et un "opérateur de chimie".

Le problème de transport-chimie

- Migration des radionucléides à travers les différentes barrières envisagées pour le stockage ou l'entreposage des déchets radioactifs.
- Système nonlinéaire couplé faisant intervenir un "opérateur de transport" et un "opérateur de chimie".
- Actuellement : méthode de point fixe. But: améliorer la performance de la méthode numérique.

Le problème de transport-chimie

- Migration des radionucléides à travers les différentes barrières envisagées pour le stockage ou l'entreposage des déchets radioactifs.
- Système nonlinéaire couplé faisant intervenir un "opérateur de transport" et un "opérateur de chimie".
- Actuellement : méthode de point fixe. But: améliorer la performance de la méthode numérique.
- Etude des propriétés du problème discret pour un cas simple (précipitation-dissolution).

Le modèle transport-chimie

■ pour l'espèce j :

C_j concentration de sa phase mobile,

\mathcal{F}_j la concentration de sa phase sorbée,

\mathcal{T}_j sa concentration totale : $\mathcal{T}_j = C_j + \mathcal{F}_j$

Le modèle transport-chimie

- pour l'espèce j :

\mathcal{C}_j concentration de sa phase mobile,

\mathcal{F}_j la concentration de sa phase sorbée,

\mathcal{T}_j sa concentration totale : $\mathcal{T}_j = \mathcal{C}_j + \mathcal{F}_j$

- Conservation de la masse et équilibre chimique:

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

Le modèle transport-chimie

- pour l'espèce j :

\mathcal{C}_j concentration de sa phase mobile,

\mathcal{F}_j la concentration de sa phase sorbée,

\mathcal{T}_j sa concentration totale : $\mathcal{T}_j = \mathcal{C}_j + \mathcal{F}_j$

- Conservation de la masse et équilibre chimique:

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

- Ψ_j : opérateur chimie pour la composante j

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

Discrétisation

- Volumes finis 1D avec décentrement amont pour le terme de convection.

Discrétisation

- Volumes finis 1D avec décentrement amont pour le terme de convection.
- $\mathcal{C} = (\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_M)$ avec $\mathcal{C}_i \in \mathbb{R}^{card(\text{maillage})}$

Discrétisation

- Volumes finis 1D avec décentrement amont pour le terme de convection.

- $\mathcal{C} = (\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_M)$ avec $\mathcal{C}_i \in \mathbb{R}^{card(\text{maillage})}$



$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{M}\mathcal{C}^{n+1} + \mathcal{F}^{n+1} = \mathcal{C}^n + \mathcal{F}^n + \mathcal{K}^n, \\ \mathcal{C}^{n+1} = \psi(\mathcal{T}^{n+1}), \\ \mathcal{C}^{n+1} + \mathcal{F}^{n+1} = \mathcal{T}^{n+1}. \end{array} \right.$$

Discrétisation

- Volumes finis 1D avec décentrement amont pour le terme de convection.

- $\mathcal{C} = (\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_M)$ avec $\mathcal{C}_i \in \mathbb{R}^{card(\text{maillage})}$



$$\begin{cases} \mathcal{M}\mathcal{C}^{n+1} + \mathcal{F}^{n+1} = \mathcal{C}^n + \mathcal{F}^n + \mathcal{K}^n, \\ \mathcal{C}^{n+1} = \psi(\mathcal{T}^{n+1}), \\ \mathcal{C}^{n+1} + \mathcal{F}^{n+1} = \mathcal{T}^{n+1}. \end{cases}$$

- ψ calculé par Chess (code Ecole des Mines)
 \mathcal{K}^n : termes sources, C.L. et maillage.

Point fixe

Exemple de point fixe, itération ℓ (à $\mathcal{C}^{n+1,\ell}$, $\mathcal{T}^{n+1,\ell}$ et $\mathcal{F}^{n+1,\ell}$ connus) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{M}\tilde{\mathcal{C}} = -\mathcal{F}^{n+1,\ell} + \mathcal{C}^n + \mathcal{F}^n + \mathcal{K}^n, \\ \mathcal{T}^{n+1,\ell+1} = \tilde{\mathcal{C}} + \mathcal{F}^{n+1,\ell} \\ \mathcal{C}^{n+1,\ell+1} = \psi(\mathcal{T}^{n+1,\ell+1}), \\ \mathcal{F}^{n+1,\ell+1} = \mathcal{T}^{n+1,\ell+1} - \mathcal{C}^{n+1,\ell+1}. \end{array} \right.$$

Newton

On résout le système

$$f \begin{pmatrix} \mathcal{C}^{n+1} \\ \mathcal{F}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{M}\mathcal{C}^{n+1} + \mathcal{F}^{n+1} - \mathcal{C}^n + \mathcal{F}^n + \mathcal{K}^n \\ \mathcal{C}^{n+1} - \psi(\mathcal{C}^{n+1} + \mathcal{F}^{n+1}) \end{pmatrix} = 0$$

par la méthode de Newton, en calculant $\nabla\psi$ par différenciation numérique.

Gradient conjugué

On suppose que $g = \nabla f$, et on minimise f par le GC non linéaire (adaptation de l'algorithme de Polak Ribière).

Coût des différentes méthodes

Algo	appels chimie	systemes lineaires
Point fixe	1	M de taille $card(\text{maillage})$
Newton	$1 + M$	1 de taille $M \times card(\text{maillage})$
GC	2	M de taille $card(\text{maillage})$

Comparaison Newton Point fixe

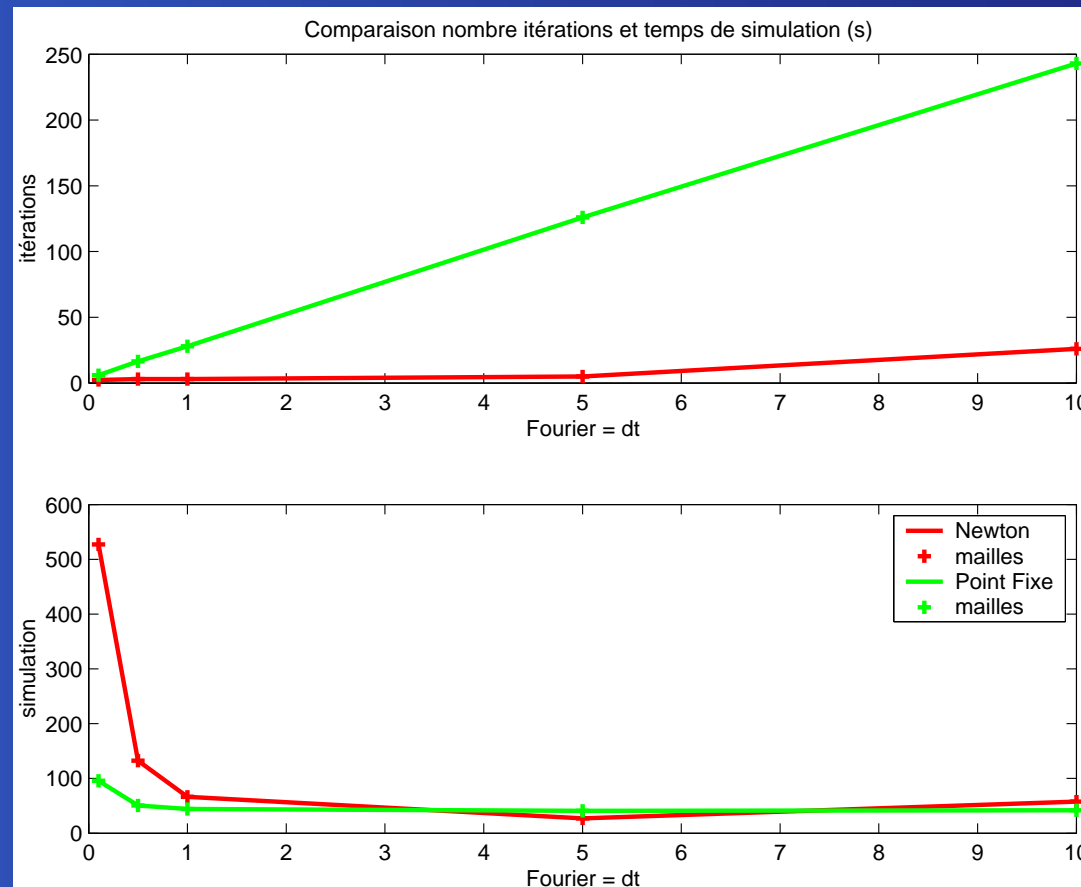


Figure 1: Comparaison Newton point fixe

Comparaison GC Point fixe

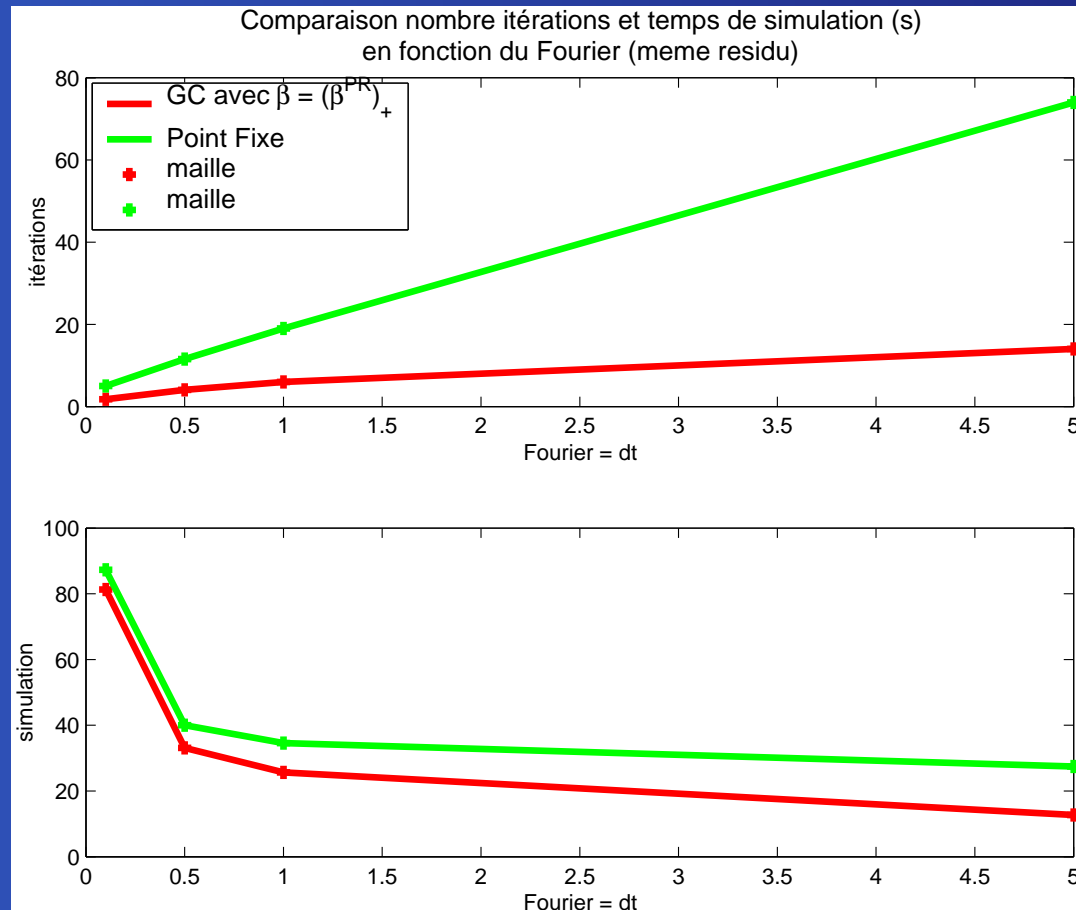
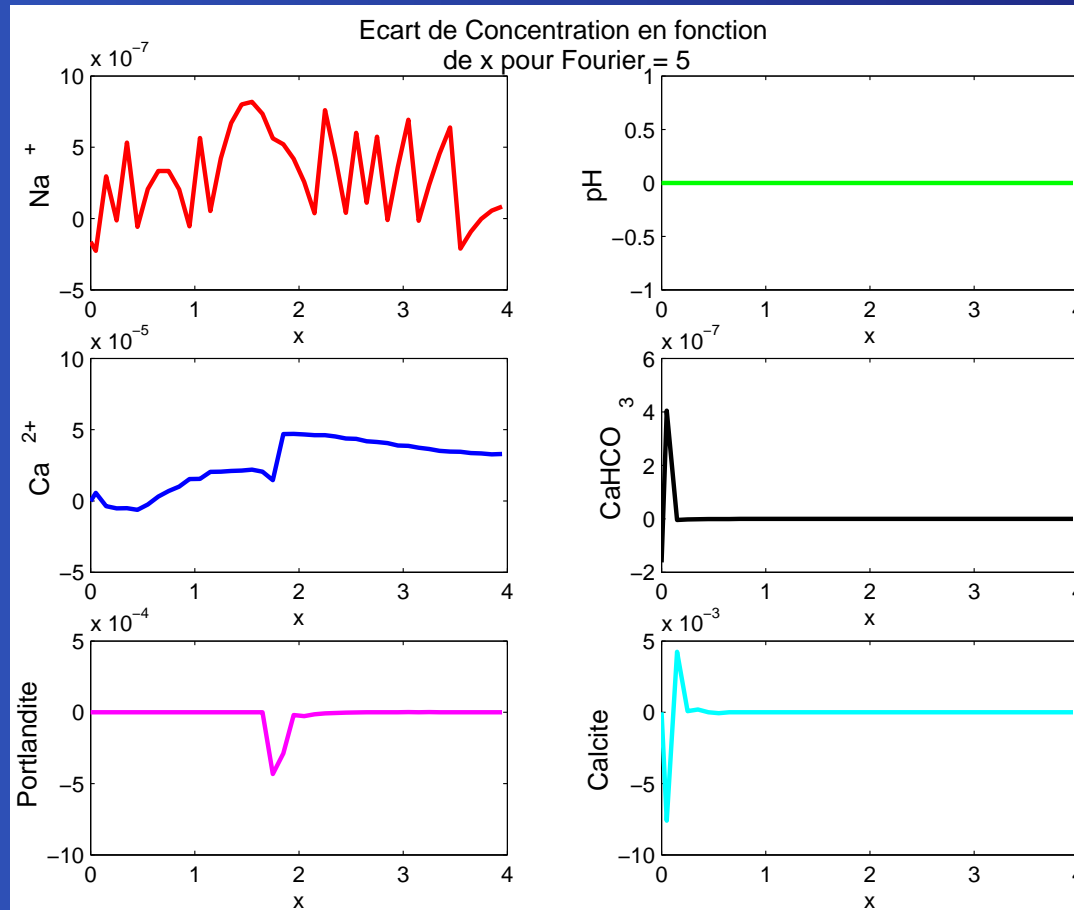
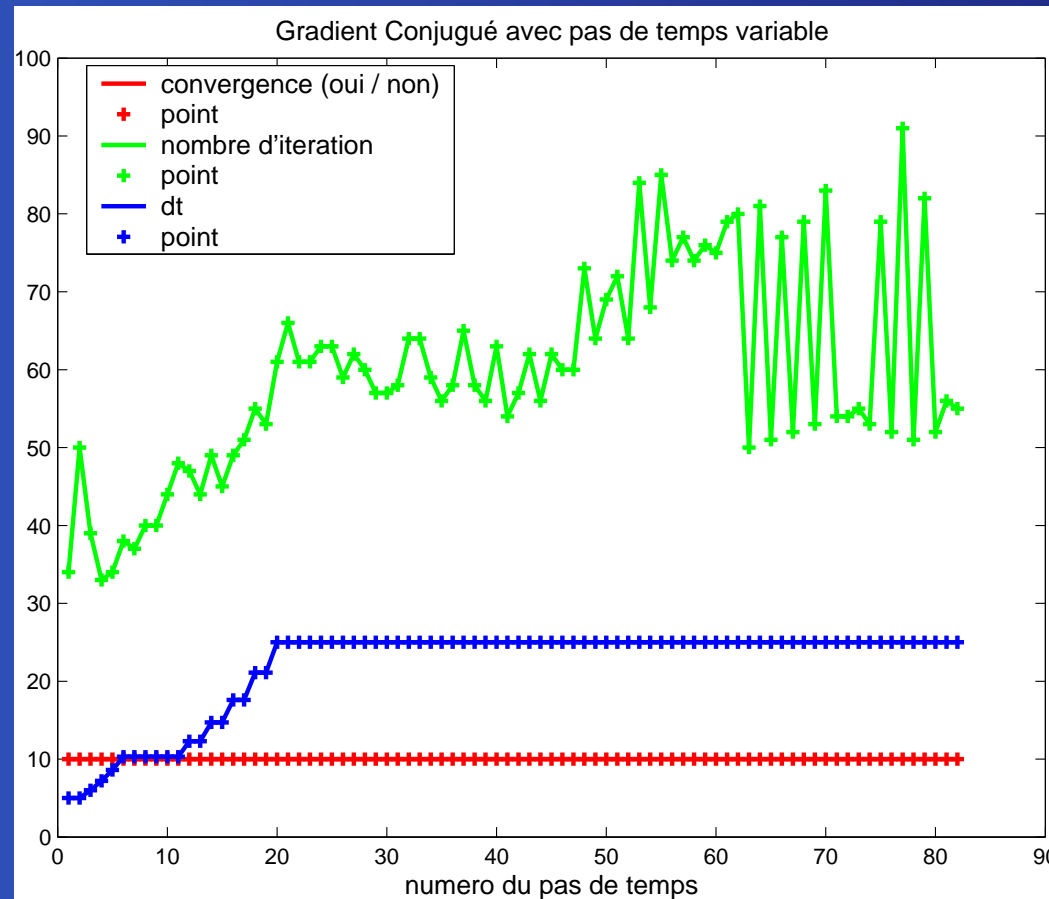


Figure 2: Comparaison des algorithmes dans le cas du

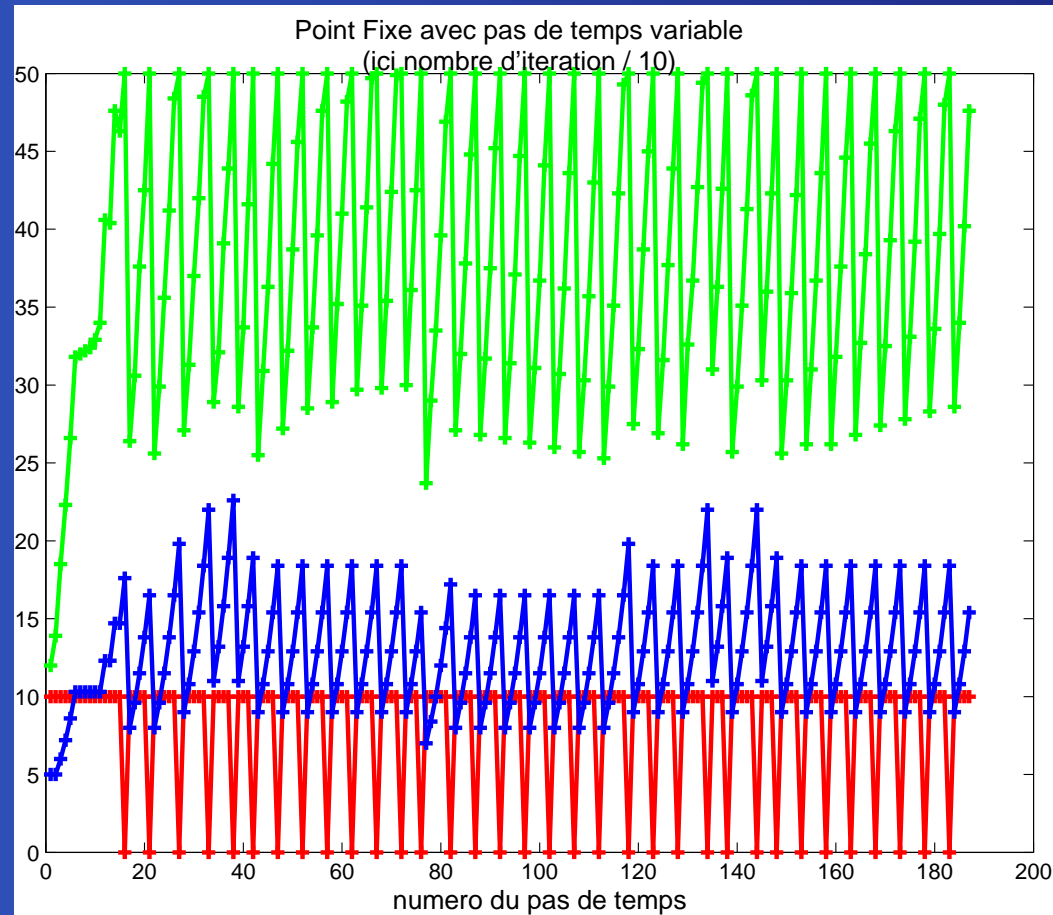
Comparaison GC Point fixe



GC pas variable



Point fixe pas variable



Modèle dissolution-précipitation

$$\begin{cases} \partial_t u - a\Delta u = \partial_t w, \\ \partial_t v - b\Delta v = -\partial_t w, \\ \partial_t w = F(u, v)1_{\{w \geq 0\}} \end{cases}$$

$$\text{avec } \begin{cases} F(u, v) = C(u^\alpha v^\beta - K), \\ F \nearrow \text{ en } u, v, \\ F(u, 0) < 0, F(0, v) < 0. \end{cases}$$

Schéma VF



$$\left\{ \begin{array}{l} m(K) \frac{u_K^{n+1} - u_K^n}{\delta t} - a \sum_{\sigma \in N(K)} F_{K,\sigma}^{(u,n+1)} = m(K) \frac{w_K^{n+1} - w_K^n}{\delta t}, \\ m(K) v_K^{n+1} - v_K^n \delta t - b \sum_{\sigma \in N(K)} F_{K,\sigma}^{(v,n+1)} = -m(K) \frac{w_K^{n+1} - w_K^n}{\delta t} \\ w_K^{n+1} = (w_K^n + \delta t F(u_K^{n+1}, v_K^{n+1}))^+ \end{array} \right.$$

Schéma VF



$$\left\{ \begin{array}{l} m(K) \frac{u_K^{n+1} - u_K^n}{\delta t} - a \sum_{\sigma \in N(K)} F_{K,\sigma}^{(u,n+1)} = m(K) \frac{w_K^{n+1} - w_K^n}{\delta t}, \\ m(K) v_K^{n+1} - v_K^n \delta t - b \sum_{\sigma \in N(K)} F_{K,\sigma}^{(v,n+1)} = -m(K) \frac{w_K^{n+1} - w_K^n}{\delta t} \\ w_K^{n+1} = (w_K^n + \delta t F(u_K^{n+1}, v_K^{n+1}))^+ \end{array} \right.$$



Existence, positivité, stabilité, convergence ?