ALLIANCES

Module transport de radio-éléments et composant Cast3M

Journées scientifiques du GdR Momas

7 octobre 2004, Univ. Paris 6

G. Bernard-Michel, C. Le Potier, CEA Saclay DEN/DM2S

PLAN DE L'EXPOSE

- **Fonctionnalités du module sous Alliances**
- **Détails concernant le composant Cast3m**
  - Discrétisation spatiale et temporelle
  - Solveurs de systèmes linéaires
  - Architecture du code
- **Point sur la qualification**

FONCTIONNALITES DU MODULE

Description de l'évolution spatiale et temporelle de radionucléides :

- ✓ **convection, diffusion, dispersion**
- ✓ **précipitation dissolution par espèce et par élément**
- ✓ **sorption modélisés par un coefficient de retard linéaire ou non**
- ✓ **décroissance radio-active et chaînes de filiation**

$$\frac{\partial(R_i\phi_e.C_i)}{\partial t} = div\left(\overline{\overline{D_i^*}}.\vec{\nabla}C_i - C_i.\vec{U}\right) - \lambda_i.\phi_e.R_i.C_i + \sum_{j\in I}\sigma_{ij}\lambda_j.\phi_e.R_j.C_j + \phi_e.S_i + Q_i$$

$$.\frac{\partial(1-\phi_e)\rho_s F_i}{\partial t} + (1-\phi_e).\lambda_i.\rho_s F_i - \sum_{j\in I}\sigma_{ij}\lambda_j.(1-\phi_e).\rho_s F_j = -\phi_e.S_i$$

+ Conditions initiales

+ Conditions aux limites (concentrations, flux diffusif, conditions mixtes mposés)

✓ ϕ porosité (constante)

✓ R retard linéaire, Freundlich, Langmuir

✓ D tenseur de diffusion-dispersion

✓Φ terme source, u vitesse de Darcy

✓ λ décroissance, S échange précipitation

Les modèles disponibles

- **Le tenseur de diffusion-dispersion :** $\overline{\overline{D_i^*}} = \overline{\overline{D_{ei}}} + \overline{\overline{D}}$

$$avec, \overline{\overline{D}} = \alpha_T . \left\| \vec{U} \right\| . \delta_{ij} + \frac{(\alpha_L - \alpha_T) . u_i . u_j}{\left\| \vec{U} \right\|}$$

- **Les conditions mixtes :**

$$A(t) \overline{\overline{D_i^*}} \, \overrightarrow{grad C_i} + B(t) . C_i = E(t)$$

- **La précipitation par élément :**

$$S_i = \omega_i . \left(C_i^{sat} - C_i \right) . \delta_i$$

$$\delta_i = 0 \quad \text{si } F_i = 0 \text{ et } C_i < C_i^{sat}$$

$$\delta_i = 1 \quad \text{sinon}$$

$$C_i^{sat} = C_{elem}^{sat} . \frac{\phi_e . R_i . C_i + (1 - \phi_e) . \rho_s F_i}{\sum_{j \in elem} \left(\phi_e . R_j . C_j + (1 - \phi_e) . \rho_s F_j \right)}$$

Les modèles disponibles - sorption

➢ Le Kd et coefficient de retard R:

$C_i^{sorbé} = C_i^{sorbé}(C_i)$ $C_i^{sorbé} = \mathrm{Kd}_i.C_i$	coefficient de retard constant Kd_i Coefficient de distribution
$C_i^{sorbé} = \dfrac{A_i^l.C_i}{B_i^l + C_i}$	isotherme de Langmuir A_i^l et B_i^l constantes
$C_i^{sorbé} = A_i^f.(C_i)^{1/n_i}$	isotherme de Freundlich A_i^f constante
$C_i^{sorbé} = f(C_i)$	Fonction quelconque de la concentration en solution Non Intégré

$$R_i = 1 + \left(\frac{1-\phi_e}{\phi_e}\right)\rho_s Kd_i$$

$$R_i = 1 + \left(\frac{1-\phi_e}{\phi_e}\right)\rho_s \frac{A_i^l}{C_i + B_i^l}$$

$$R_i = 1 + \left(\frac{1-\phi_e}{\phi_e}\right)\rho_s A_i^f.C_i^{\frac{1-n}{n}}$$

➢ Désormais D(t) et Csat(t) possibles

STRATEGIE DE DEVELOPPEMENT – CAST3M

- **Besoins**
  - ✓ Tenseurs de diffusion pleins (dispersivité)
  - ✓ Propriétés discontinues et fortement hétérogènes des matériaux
  - ✓ Fort rapport d'aspect de la géométrie discrétisée
  - ✓ Les concentrations doivent rester positives
  - ✓ Bonne précision sur les concentrations et les flux
  - ✓ Rapidité et robustesse du code
- **Solutions**
  - ✓ Plusieurs discrétisations offertes : EFMH et VF
  - ✓ Plusieurs solveurs et préconditionneurs : directs, itératifs, multithreadés
  - ✓ Procédures réécrites de manière optimisée avec syntaxe unifiée
  - ✓ Intégration à l'outil Alliances - capitalisation des développements
  - ✓ Actions de R&D sur la stabilité des éléments et la monotonie

Développements numériques

Éléments finis mixtes-hybrides

- ✓ Conservatifs sur chaque maille
- ✓ Même précision pour les concentrations et les flux de concentration (ordre 1)
- ✓ Tenseur de diffusion plein
- ✓ Stables sur maillages déformés
- ✓ <u>Non monotones pour la convection</u> => décentrement par ajout de diffusion numérique
- ✓ <u>Non monotones pour la diffusion</u> si Fourier de maille < 1/6 => Condensation de la matrice masse pour assurer la monotonie sur maillages rectangles
- ✓ Travail en log (C) en étude R&D

Développements numériques

Volumes finis ordre 2 – AAVATSMARK et al. (98)

- ✓ Monotones
- ✓ Conservatifs localement
- ✓ Tenseur de diffusion-dispersion plein
- ✓ Problème éventuel de stabilité sur maillages très déformés (pour l'opérateur de diffusion)
- ✓ Ordre 2 sur les concentrations et ordre 1 sur les flux

LES SOLVEURS UTILISES

- **Renumérotation : Sloane, Gibbs-King, Gibbs**
- **Solveur direct : Dissection emboitée multithreadée, Crout non parallèle**
- **Solveurs itératifs : Gradient conjugué, BCGSTAB et GMRES issus de Sparskit**
- **Préconditionneurs : diagonal, ILU-diagonal, ILU(0), ILUT2**

PROGRAMME DE QUALIFICATION

QUALIFICATION VIA ALLIANCES

- **Qualification**
  - ✓ tests physico-numériques mettant en œuvre des solutions analytiques – seul le retard non linéaire et filiation ramifiée non qualifiés.
  - ✓ tests d'applications : Couplex 1, SEA et SEN mêmes cas avec les fonctionnalités : VF 3D, solveur avec pivoting, convection VF ordre 2.

QUALIFICATION SUR CAST3M

- **Base de cas existante (9 tests physico-numériques)**
- **Cas d'application : Site de l'Est ; Couplex 2**