

# Développements de méthodes numériques pour le transport réactif

N. Bouillard<sup>†</sup>, P. Montarnal<sup>†</sup>, R. Herbin<sup>\*</sup>

30 septembre 2005

Dans le cadre de la gestion des déchets nucléaires, des outils de simulation sont développés conjointement par le CEA, l'ANDRA et EDF. Ils collaborent pour mettre en oeuvre la plateforme ALLIANCES qui couple différents codes [7]. Pour effectuer des calculs de sureté pour le stockage profond des colis de déchets, celle ci couple des codes de transport et de chimie. La description du transport réactif peut se trouver dans [1] [2] [3].

Pour résoudre le système non linéaire couplant des équations de conservation (transport), des EDO (cinétiques) et des équations algébriques (équilibre chimique), la plupart des industriels utilisent des méthodes séquentielles itératives de type point fixe, robustes mais parfois lentes à converger [1] [6].

Le but de ce travail est de présenter d'autres algorithmes de couplage et de les comparer à la méthode de point fixe. En particulier, on s'intéressera à une méthode de Newton et à une méthode de gradient conjugué non linéaire [5]. Cette dernière s'inspire de travaux [3] qui concernent l'optimisation sans contrainte.

**mots clés :** transport réactif, couplage de codes, point fixe, gradient conjugué non linéaire, newton.

## Références

- [1] G.T. Yeh, V.S. Tripathi, (1989), *A critical evolution of recent developments in hydrogeochemical transport models of reactive multichemical components*, Water Res. Res., 25(1), pp 93–108.
- [2] C.I. Steefel, A.C. Lasaga, (1994), *A coupled model for transport of multiple chemical species and kinetic precipitation/dissolution reactions with application to reactive flow in single phase hydrothermal systems*, Am. J. Sci. 294, pp 529–592.
- [3] A. Holstad, (2000), *A mathematical model for reactive fluid flow systems*, Computational Geosciences, 4, pp103–139.
- [4] Sun, J., Zhang J., *Global convergence of conjugate gradient methods without line search*, Annals of Operations Research, 103(2001), pp 161-173.
- [5] N. Bouillard, P. Montarnal, R. Herbin, (2005), *Development of numerical methods for the reactive transport of chemical species in a porous media : a nonlinear conjugate gradient method*, Coupled problems, ECCOMAS conference, Santorini Island, Greece.
- [6] C. Mügler, Ph. Montarnal, A. Dimier, L. Trotignon, (2004), *Reactive transport modelling in the Alliances software platform*, In proceeding of CMWR, Chapel Hill, USA.
- [7] A. Bengaouer, L. Loth, Ph. Montarnal, (2003), *ALLIANCES project : Integration, Analysis and Design Software Environment for Nuclear Waste Storage and Disposal*, SNA, Paris, France.