
Modélisations en milieux poreux en support au projet Alliances

Journées scientifiques MOMAS, CIRM

29 novembre 2005

Alain Bengaouer CEA-DEN

DM2S/SFME/MTMS

Plan de la présentation



- **Quelques exemple de modélisations au CEA/DM2S :**
 - ❖ **Modélisation du transport insaturé**
 - ❖ **Modélisation inverse d'expériences in-situ**
 - ❖ **Couplage chimie-transport**
 - ❖ **Migration de radionucléides en champ lointain**

- **La plateforme ALLIANCES :**
 - ❖ **Bilan**
 - ❖ **Perspectives**

- **Les attentes du CEA envers MoMaS**

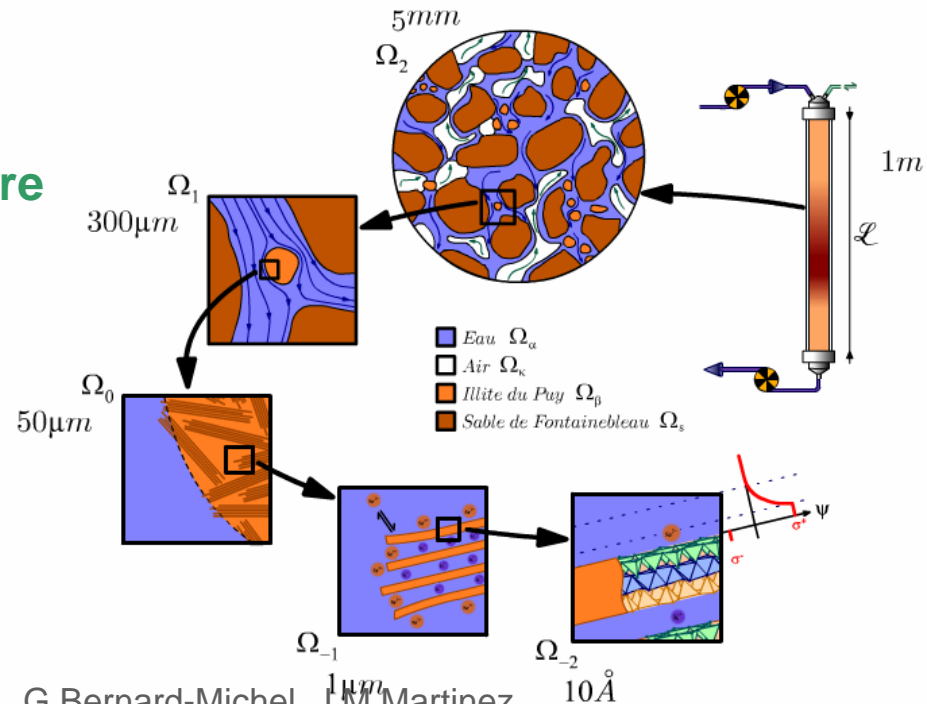
Transport réactif en insaturé



○ Modélisation hydraulique et transport réactif (sorption de Cs sur de l'argile) en milieu non saturé.

○ Démarche expérimentale et modélisation :

- ❖ Hydrodynamique Darcy
- ❖ Transport Darcy
- ❖ Dispersion échelle du pore
- ❖ Équations macro



Équipe CEA : S.Cadalen (Thèse), A. Cartalade, G.Bernard-Michel, J.M.Martinez
Collaborations : DEN/DPC, M.Quintard (I.M.F.T.)

Échelle de Darcy



○ Hydrodynamique :

- ❖ Équation de Richards
- ❖ Loi de pression capillaire
- ❖ Modèle de van Genuchten
- ❖ Perméabilité relative Mualem

$$C(h) \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla [K(\theta) \nabla h] = 0$$

$$[P(z_i), \theta(z_i)]$$

$$S(h) = \frac{1}{(1 + (\alpha h)^n)^m}$$

○ Transport passif puis réactif :

- ❖ CDE
- ❖ Loi de dispersivité

$$\frac{\partial \theta c}{\partial t} - \nabla \cdot (\overline{D} \nabla c - \overline{U} c) = 0$$

$$D = D_0 \tau(\theta) + \lambda_L(\theta) Pe^m \left\| \overline{U} \right\| \quad \lambda_L = a \theta^b ?$$

○ Résolution du problème direct par EFMH et VF

○ Modélisation inverse par état adjoint pour identifier la dispersion

- ❖ Extension à la convection d'outils existants
- ❖ Données Nutzmann, Cemagref, CEA

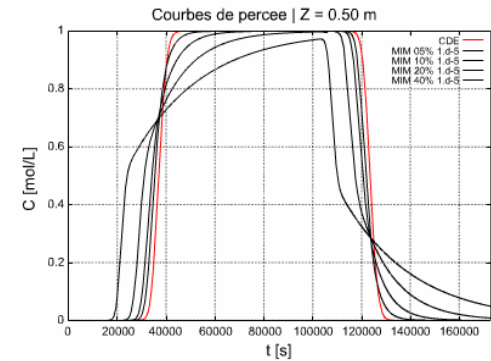
$$J(\lambda_i) = \sum_i \beta_i \frac{(C_i - C_i^*)^2}{C_{i,0}^2}$$

Échelle micro



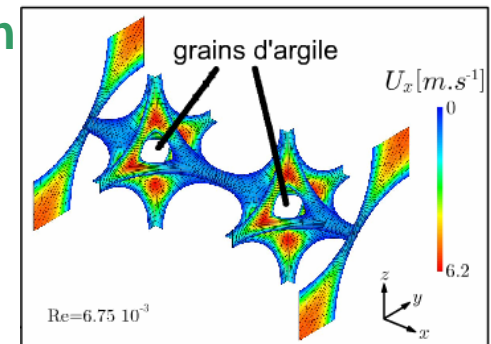
○ Les limites de la CDE : dispersion anormale

- ❖ MIM (Modèle mobile immobile); quelle quantité immobile ?
- ❖ MRMT (Multiple Rate Mass Transfer Model); termes de couplage
- ❖ Lattice Boltzmann
- ❖ CTRW
- ❖ Simulation directe



○ Simulation directe

- ❖ Une géométrie simplifiée autour des grains d'argile
- ❖ Écoulement de Stokes en EF avec Cast3m
- ❖ Transport liquide et diffusion dans le grain
- ❖ Prise de moyenne volumique
- ❖ Calcul de D et τ pour les équations macro
 - Dépendance en Pe confirmée



Transport réactif en insaturé

○ Directions futures :

❖ Travail de thèse

- Confrontation simulation directe et Darcy
- Prise en compte de la phase air
- Acquisition de résultats expérimentaux et confrontation

❖ Mais aussi

- Modèle diphasique, en cours
- Lattice Boltzmann, travail prévu en 2006

○ Apport pour ALLIANCES :

❖ Modèles physiques

- Dispersivité fonction du Peclet et de la teneur en eau
- Qualification des modèles en écoulement de surface

❖ Implémentation numérique

- Équation de richards en VF, EFMH
- Équation de CDE, MIM insaturée
- Contribution à la matrice de qualification Cast3m puis Alliances

Modélisations inverses expériences in situ

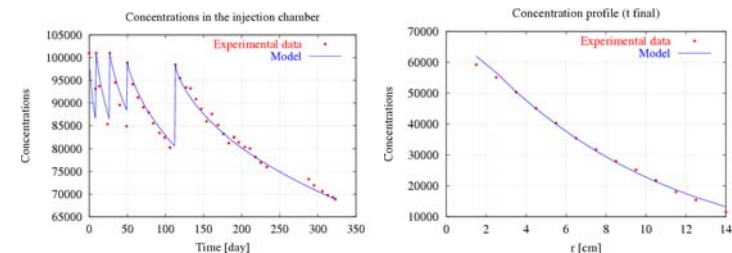
○ Identification de paramètres : actions pour l'Andra

$$\psi(x) \frac{\partial F(x,t)}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{q}(x,t) + S(x,t)$$

$$\vec{q}(x,t) = -\bar{\chi}(x) \vec{\nabla} F(x,t)$$

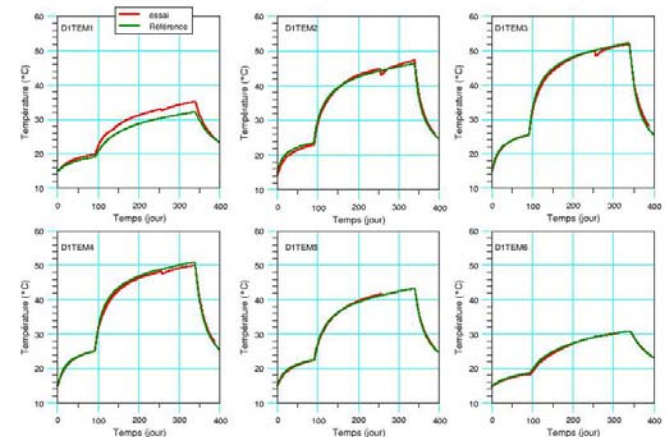
❖ Diffusion de traceurs dans l'Argile à opalinus du Mont terri expérience DI, identification en 3D des paramètres ω et D_e

- Méthode essai erreur
- Méthode globale,
 - LHS+RN+BFGS
 - Analyses de sensibilité
- Méthode locale, par état adjoint en 1D
 - Analyses de sensibilité (J.Blum)



❖ Diffusion de la chaleur à Mont terri, expérience HE-D identification en 3D des paramètres λ_L , λ_T et C_p

- Méthode globale



Equipe CEA : A. Cartalade, M. Filippi, P Montarnal, JM.. Martinez, Ch. Le Potier
Collaborations : Andra, DEN/DPC, GDR Momas (J.Blum, G.Chavent, F.Clement)

Modélisations inverses



○ Dimensionnement des expériences de l'Andra dans l'argilite de Bure :

❖ Diffusion de traceurs : expérience DIR

- D_e et ω issus d'essais en laboratoire
- Déterminer les cocktail de traceurs et temps d'injection
- Géométrie de l'expérience

❖ Diffusion de la chaleur : expérience TER

- C_p et λ issus d'essais en laboratoire
- Déterminer les temps de chauffage et position des capteurs

○ Assistance au suivi des injections DIR

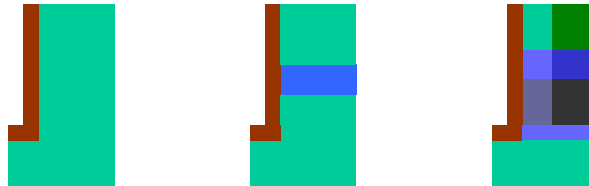
- ❖ En temps réel, confrontation des concentrations mesurées et calculées dans la chambre d'injection

Modélisations inverses

○ Directions futures :

❖ En cours pour l'expérience DIR

- Développement en cours du module d'identification par état adjoint en 2D cylindrique par E.F. (pas de pendage significatif), prise en compte des hétérogénéités spatiales



❖ Paramétrisation automatique en 2D ?

- ❖ A partir d'une incertitude sur les mesures de concentration, quelle est l'incertitude sur w et De identifiés ?
- ❖ Comparaison méthodes globales/locales, combinaison des deux
- ❖ Doter ALLIANCES d'un outil d'identification de paramètres, diffusion, thermique,...

Migration de radionucléides

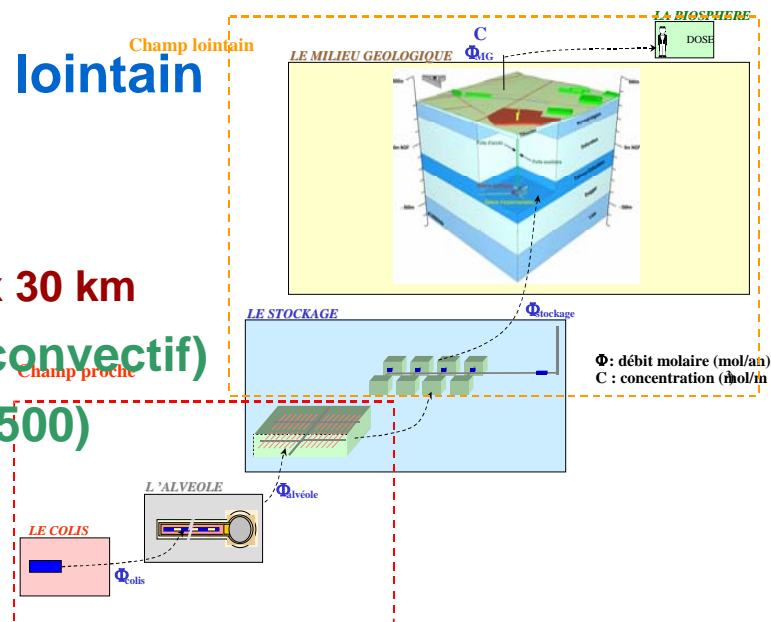


○ Processus de modélisation

- ❖ Modèle conceptuel de sûreté Andra (cf. G.Pepin)
- ❖ Découplage des domaines (alvéoles, modules, milieu géologique)
- ❖ Homogénéisation des paramètres

○ Modèle mathématique en champ lointain

- ❖ CDE + précipitation + sorption
- ❖ Décroissance/filiation
- ❖ Échelles spatiales **100m x 20 km x 30 km**
- ❖ Faciès géologiques (diffusif au convectif)
- ❖ Fortement anisotrope ($\alpha_L / \alpha_T = 1500$)



Equipe CEA : C. Le Potier, G. Bernard-Michel

Migration de radionucléides

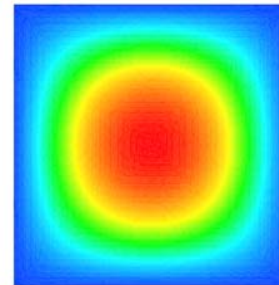
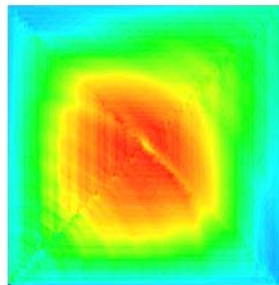
$$\bar{U} = -\bar{K}\nabla h \quad \text{et} \quad \nabla(\bar{U}) = 0$$
$$\frac{\partial \omega c_i}{\partial t} - \nabla \cdot (\bar{D}_i \nabla c_i - \bar{U} c_i) = -\lambda_i \omega c_i + \sum_j v_{ij} \lambda_{ji} c_j + \omega R_i(c_{1\dots n}) + S_j$$

○ Propriétés recherchées :

- ❖ Précision sur les concentrations et les flux
- ❖ Monotonie (positivité des concentrations)
- ❖ Performances en temps de calcul (>1 Mmailles, 10000 Dt)

○ Plusieurs schémas numériques complémentaires

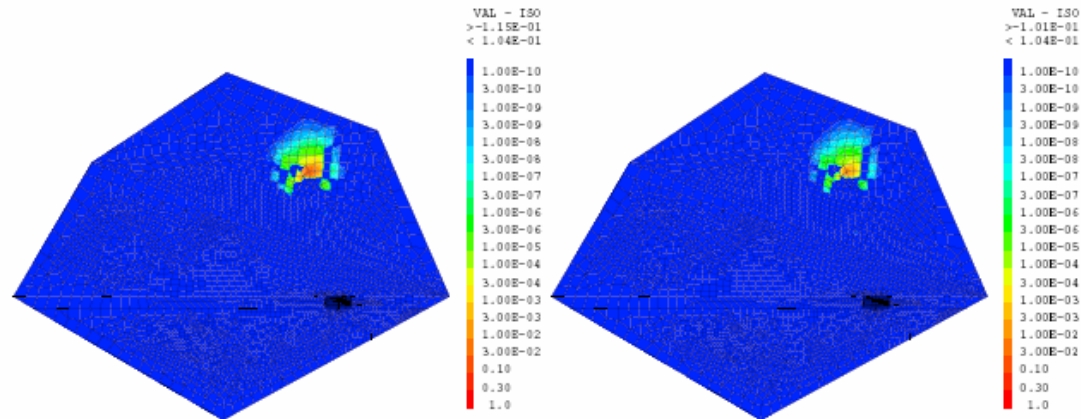
- ❖ Éléments finis mixtes hybrides (Raviart, Thomas 83)
- ❖ VF MPFA (Aavatsmark et al. 98) + généralisation au 3D
- ❖ VF-SYM pour tenseurs fortement anisotropes (Le Potier CRAS 2005)



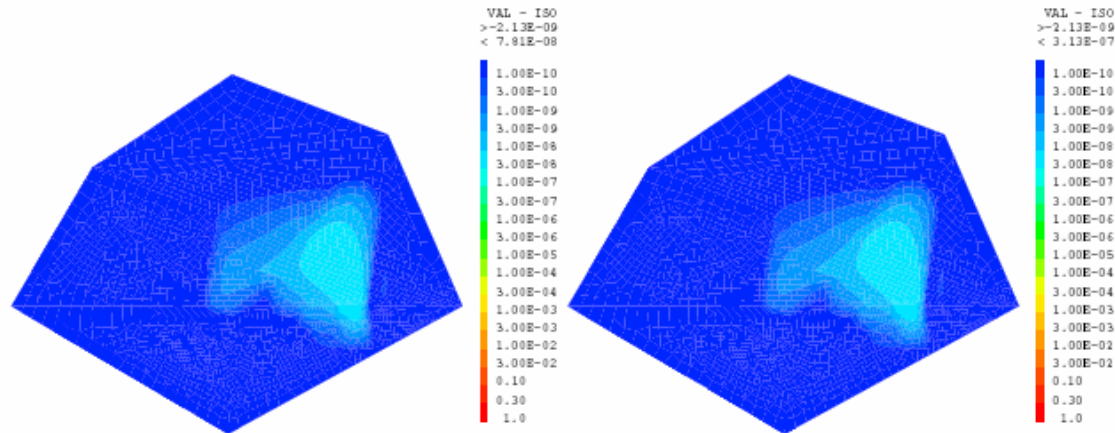
Problème 2D stationnaire, solution analytique en produits de sinus avec facteur d'anisotropie de 10^4
EFMH (gauche), VF-SYM (droite), Non convergence avec VF MPFA

Migration de radionucléides

- Application au scénario normal d'évolution SEN
 - ❖ Cartes de concentration en iode 129 en mol/l



VF-MPFA, à $t=21000$ ans, $z = -30$ et $z = -50$ m



VF-SYM, à $t=1\ 000\ 000$ ans, $z = -30$ et $z = -50$ m



○ Des acquis

- ❖ Schéma VF stable en forte anisotropie
- ❖ Schéma VF monotone (non linéaire) en forte anisotropie (cf. poster Ch. Le Potier) application aux couplages multiphysique

○ Perspectives

- ❖ Méthodes de décomposition de domaine
- ❖ Parallélisme interne des solveurs
- ❖ Estimation à posteriori et adaptation

Couplage chimie-transport



○ Compréhension des interactions Géo chimie et transport pour la dégradation des matériaux (perturbation alcaline, lixiviation, ...) en champ proche du stockage

❖ Une chimie complexe :

- pH,
- redox,
- précipitation/dissolution,
- sorption

❖ Une approche par couplage de codes

- Chimie = Chess, Phreeqc
- Transport = Cast3m, Traces
- Algorithme de couplage indépendant des codes

○ Dans Alliances : temps de restitution long limitant l'utilisation à des maillages < 1000 mailles

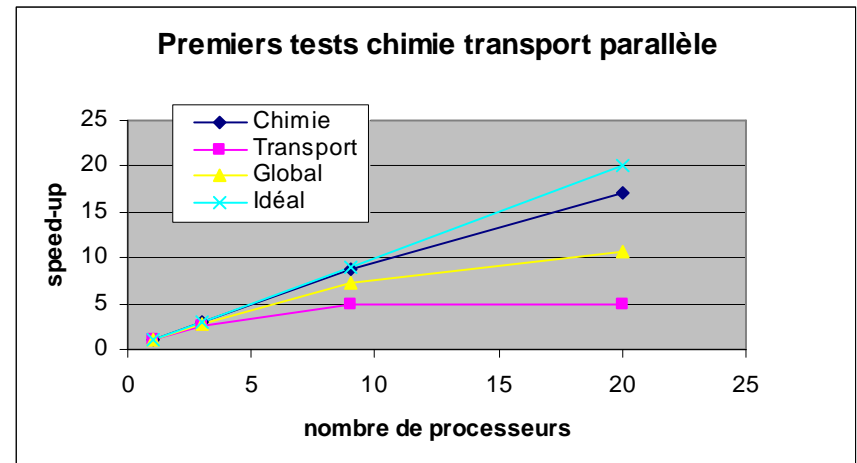
Couplage chimie-transport

○ Numérique

- ❖ Méthodes implicites conservant une approche par couplage de codes : Newton et Gradient conjugués non linéaire avec calcul numérique (ou analytique) des dérivés.
 - Exposé N.Bouillard, collaboration Ph.Montarnal, R.Herbin, R.Eymard

○ Parallélisation du couplage

- ❖ Parallélisation sur la chimie et les espèces composantes
- ❖ Travaux en cours*



* Travaux complémentaires à l'Andra, synthèse prévue dans Alliances

La plateforme Alliances : bilan

- **Projet en co-développement CEA-Andra-EDF,**
- **Version 1.3 utilisée pour les calculs de sûreté Andra**
 - ❖ **Hydraulique et transport saturé**
 - ❖ **Chimie-transport**
 - ❖ **Modèles de colis**
- **Version 2.0 livrée en août 2005 avec :**
 - ❖ **Amélioration du couplage chimie-transport (ω , Traces)**
 - ❖ **Thermo-hydraulique (Code Aster)**
 - ❖ **Thermo-Aérolitique (Trio-U)**
 - ❖ **Module de sensibilité, échantillonnage et analyse statistique**
- **Formation MOMAS en mars (~10 personnes)**
- **Disponibilité pour MOMAS**
 - ❖ **Licence en cours (recherche d'une solution « rapide »)**

Equipe CEA : Ph.Montarnal, E.Deville, A.Genty, M.Lamoureux

Collaborations : Andra, EDF

La plateforme Alliances : perspectives

○ Ouverture à plus d'utilisateurs

- ❖ MoMaS
- ❖ Échanges avec d'autres communautés : pétrole, CO₂, environnement
- ❖ Ouverture Européenne, 6^{ème} (NF-PRO,PAMINA) et 7^{ème} PCRD

○ A court terme : V2.1 en 2006

- ❖ Transport insaturé
- ❖ THM (Code Aster)
- ❖ Chimie-transport : effet thermiques, parallélisation
- ❖ Couplage du module mécanique avec chimie-transport
- ❖ Couplage colis-environnement

○ A moyen terme : vue du CEA

- ❖ Intégration de plus de modélisation en champ proche : THMCR
 - Chimie-transport insaturé
 - Couplages Mécanique-Chimie-transport dégradation des colis
- ❖ Représentation plus globale du stockage en 3D
 - Diphasique, resaturation et migration des gaz
 - Exploitation du calcul intensif : parallélisation, DDD

Les attentes du CEA : quels thèmes

❖ Multiphasique

- Écoulements diphasiques : resaturation-transport H_2
- Dans différents matériaux : argilite/béton/argile

❖ Transport-chimie

- Applicabilité à l'échelle d'une alvéole, 2D 3D
- Transport réactif insaturé,
- Modélisation avec coefficients de diffusion différents par espèce

❖ Couplages

- Méthodes de décomposition de domaines
- Couplages alvéole/module et modules/calovo-oxfordien

❖ Multi-échelles

- Homogénéisation en diphasique
- État de l'art : asymptotique, prise de moyenne, ...

❖ Incertitudes et sensibilité

- État de l'art : locales, globales, ...

Les attentes du CEA : comment



- **Poursuivre et amplifier les collaborations CEA-GDR**
 - ❖ **Deux thèses sont déjà reliées à MOMAS,**
 - **Nina Khvoenkova avec A.Bourgeat et A.Mikelic**
 - **Nicolas Bouillard avec R.Herbin et R.Eymard**
 - ❖ **D'autres pourraient l'être.**
 - **Modélisation en insaturé réactif**
 - **Modélisation mathématique et numérique en diphasique**
- **Des méthodologies et des techniques applicables**
 - ❖ **Orientées et évaluées (benchmark) sur des cas industriels**
 - ❖ **Industrialisables**
 - **Caractère généralisable d'une méthode**
 - **Géométrie, discrétisation, non linéarités, parallélisation**
- **Une coordination avec ALLIANCES**
 - ❖ **MoMaS : des projets de recherche souples et autonomes**
 - ❖ **ALLIANCES : un projet opérationnel qui « intègre » la R&D**
- **Une capitalisation des avancées dans ALLIANCES**



merci