

Modélisation et simulations numériques d'un stockage de déchets en milieu souterrain par la technique d'homogénéisation de termes source

A. Bourgeat¹, I. Boursier^{1,2}, O. Gipouloux¹

¹Laboratoire Camille Jordan UMR 5208, Université Lyon1,

²Collaboration ANDRA, Parc de la Croix Blanche, 92 Chatenay Malabry

29 novembre 2005 / CIRM, Gdr MoMaS Marseille

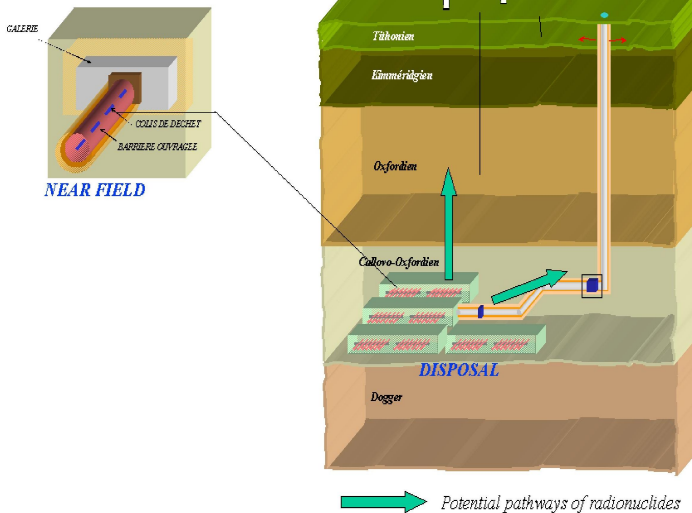
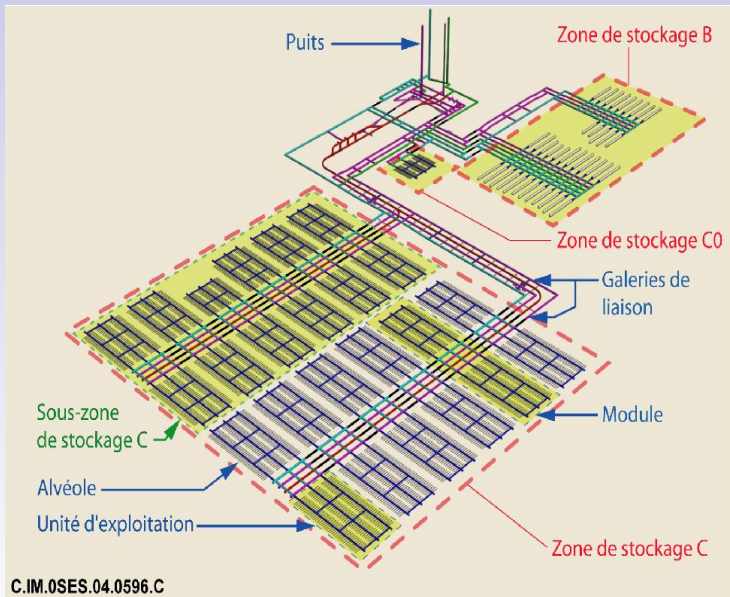


Figure: Position d'un stockage des déchets nucléaires en milieu géologique profond



C.IM.0SES.04.0596.C

Figure: Structure d'un stockage des déchets nucléaires

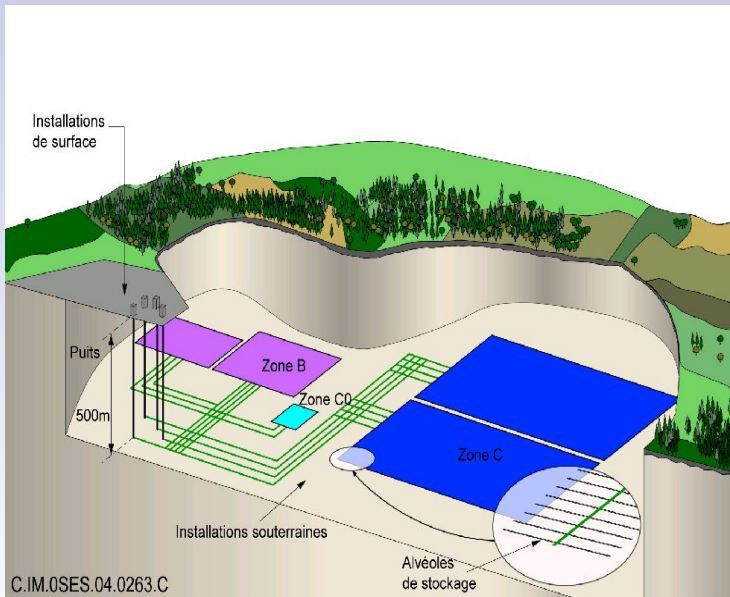


Figure: Structure d'un stockage des déchets nucléaires en milieu géologique profond

Quelques difficultés d'ordre numérique liées à l'étude d'un stockage en milieu souterrain

- Diversité des échelles à traiter,
- Discrétisations spatiales et temporelles très importantes,
- Temps de calcul des simulations très importants,
- Hétérogénéités importantes dans domaine de calcul,

Quelques difficultés d'ordre numérique liées à l'étude d'un stockage en milieu souterrain

- Diversité des échelles à traiter,
- Discrétisations spatiales et temporelles très importantes,
- Temps de calcul des simulations très importants,
⇒ **Modèles par homogénéisation des termes sources**,
- Hétérogénéités importantes dans domaine de calcul,

Quelques difficultés d'ordre numérique liées à l'étude d'un stockage en milieu souterrain

- Diversité des échelles à traiter,
- Discrétisations spatiales et temporelles très importantes,
- Temps de calcul des simulations très importants,
⇒ **Modèles par homogénéisation des termes sources**,
- Hétérogénéités importantes dans domaine de calcul,
⇒ **Adaptation** modèles au stockage en milieu souterrain hétérogène.

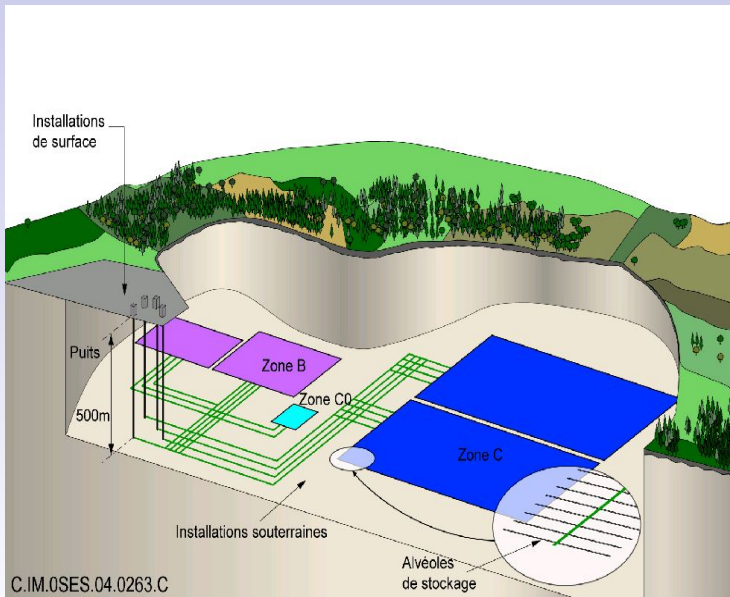


Figure: Structure d'un stockage des déchets nucléaires en milieu géologique profond

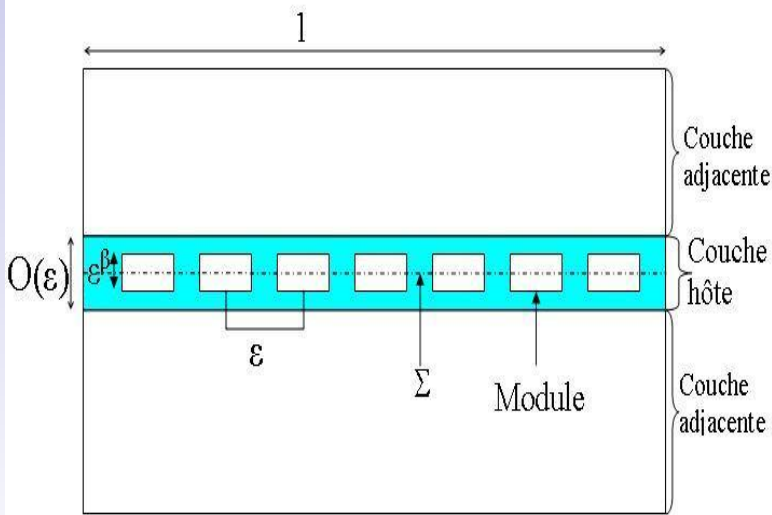


Figure: Les trois couches du sol contenant les modules

$$R\omega \frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{A}\nabla c) + (\mathbf{V} \cdot \nabla)c + \lambda R\omega c = 0 \quad (1)$$

- R le facteur de retard,
- ω la porosité,
- \mathbf{A} le tenseur de diffusion-dispersion,
- \mathbf{v} la vitesse de Darcy,
- $\lambda = \frac{\log 2}{\mathcal{T}}$; \mathcal{T} la demi-durée de vie d'un élément radioactif,
- en raison de l'épaisseur et de la longueur des modules, on considère une section $2D$ verticale du stockage,
- demi-durée de vie de l'iode ^{129}I $\mathcal{T} = 1.57 \cdot 10^7$ ans; durée de relachement $t'_m = 8 \cdot 10^3$ ans avec une intensité Φ' .

$$\omega^\varepsilon \frac{\partial \mathbf{c}_\varepsilon}{\partial t} - \operatorname{div}(\mathbf{A}^\varepsilon \nabla \mathbf{c}_\varepsilon) + (\mathbf{v}^\varepsilon \cdot \nabla) \mathbf{c}_\varepsilon + \lambda \omega^\varepsilon \mathbf{c}_\varepsilon = 0 \quad \text{in } \Omega_\varepsilon^T \quad (2)$$

$$\mathbf{c}_\varepsilon(0, x) = \varphi_0(x) \quad x \in \Omega_\varepsilon \quad (3)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{n} \cdot (\mathbf{A}^\varepsilon \nabla \mathbf{c}_\varepsilon - \mathbf{v}^\varepsilon \mathbf{c}_\varepsilon) = \Phi(t) \quad \text{sur } \Gamma_\varepsilon^T \quad (4)$$

$$\mathbf{c}_\varepsilon = 0 \quad \text{sur } S_1, \quad (5)$$

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{A}^\varepsilon \nabla \mathbf{c}_\varepsilon - \mathbf{v}^\varepsilon \mathbf{c}_\varepsilon) = 0 \quad \text{sur } S_2 \quad (6)$$

avec $\varepsilon = \frac{1}{N}$ où N est le nombre de modules.

$$\mathbf{A}^\varepsilon(x_2) = \mathbf{A}\left(\frac{x_2}{\varepsilon}\right); \quad \mathbf{v}^\varepsilon(x, t) = \mathbf{v}\left(x, \frac{x_2}{\varepsilon}, t\right); \quad \omega^\varepsilon(x_2) = \omega\left(\frac{x_2}{\varepsilon}\right). \quad (7)$$

et $\phi \in L^2(0, T; H^1(\Omega)) \cap L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$;

$$\omega^{nh} \frac{\partial \mathbf{c}^0}{\partial t} - \operatorname{div}(\mathbf{A}^{nh} \nabla \mathbf{c}^0) + (\mathbf{v}^{nh} \cdot \nabla) \mathbf{c}^0 + \lambda \omega^{nh} \mathbf{c}^0 = 0 \text{ in } \tilde{\Omega}^T \quad (8)$$

$$\mathbf{c}^0(x, 0) = \mathbf{c}_0(x) \quad x \in \tilde{\Omega} = \Omega \setminus \Sigma \quad (9)$$

$$\mathbf{c}^0 = 0 \quad \text{sur } S_1 \quad (10)$$

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{A}^{nh} \nabla \mathbf{c}^0 - \mathbf{v}^{nh} \mathbf{c}^0) = 0 \quad \text{sur } S_2 \quad (11)$$

$$[\mathbf{c}^0] = 0 \quad , \quad \left[\mathbf{e}_2 \cdot (\mathbf{A}^{nh} \nabla \mathbf{c}^0 - \mathbf{v}^{nh} \mathbf{c}^0) \right] = -|\tilde{M}| \Phi \quad \text{sur } \Sigma \quad (12)$$

où, \mathbf{A}^{nh} , \mathbf{v}^{nh} , ω^{nh} sont les coefficients relatifs aux couches adjacentes, $[\cdot]$ notation saut sur Σ , et $|\tilde{M}|$: périmètre de \mathbf{M} à l'échelle rapide.

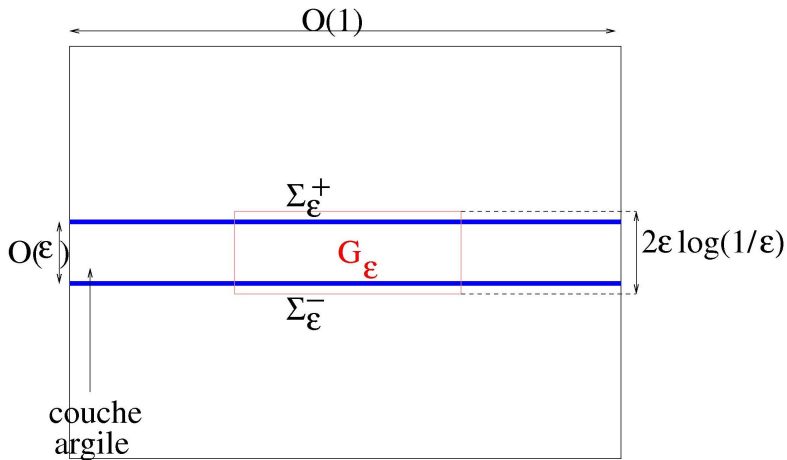


Figure: G_ϵ le domaine intérieur; $\Omega \setminus \overline{G_\epsilon}$ le domaine extérieur

$$c^1 = \begin{cases} c_\varepsilon^0 & \text{dans } \Omega \setminus G_\varepsilon \\ c_\varepsilon^0 + \varepsilon \left(\chi_\varepsilon^k \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \frac{\partial c_\varepsilon^0}{\partial x_k} + w_\varepsilon \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \Phi - c_\varepsilon^0 \rho_\varepsilon^k \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) v_k^h \right) & \text{dans } G_\varepsilon. \end{cases} \quad (13)$$

- variable rapide $y = \frac{x}{\varepsilon}$
- c_ε^0 mime le comportement de c^0 mais deux sauts sur $\Sigma_\varepsilon^+ = \{\varepsilon \log(1/\varepsilon)\} \times] -\delta/2, \delta/2 [$ et sur $\Sigma_\varepsilon^- = \{-\varepsilon \log(1/\varepsilon)\} \times] -\delta/2, \delta/2 [$, au lieu de Σ .
- Les correcteurs $\chi_\varepsilon^k, \rho_\varepsilon^k$ et w_ε sont solutions 1-périodiques en y_1 de trois **problèmes auxiliaires de type diffusion stationnaire** posés sur une bande infinie:

$$G_\varepsilon = (] -1/2, 1/2[\times \mathbf{R}) \setminus \mathcal{M}_\varepsilon .$$

Problèmes auxiliaires

Exemple de **problème auxiliaire**:

$$I \quad \begin{cases} -\nabla \cdot (A^\varepsilon \nabla (\chi_\varepsilon^k + y_k)) = 0 & \text{dans } G_\varepsilon \\ n \cdot (A^\varepsilon \nabla (\chi_\varepsilon^k + y_k)) = 0 & \text{sur } \partial M_\varepsilon \\ \chi_\varepsilon^k \text{ est 1-périodique en } y_1 \\ \lim_{y_2 \rightarrow \infty} \nabla \chi_\varepsilon^k = 0 \end{cases} \quad (14)$$

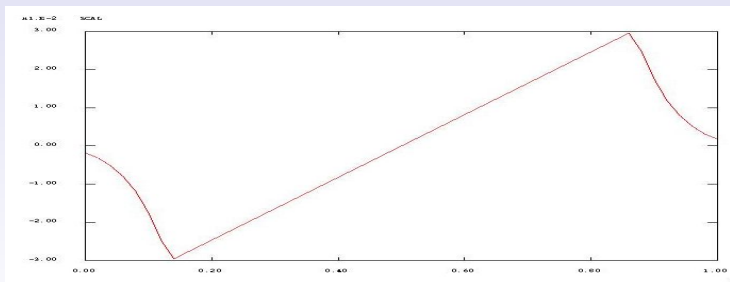


Figure: Coupe horizontale d'un correcteur de forme, solution de (14), $k=1$

Théorème

Pour tout $0 < \tau < 1$ il existe une constante $C_\tau > 0$ indépendante de ε , telle que:

$$|c_\varepsilon - c^1|_{L^2(0, T; H^1(\mathcal{B}_\varepsilon))} \leq C_\tau \varepsilon^\tau, \quad (15)$$

où $\mathcal{B}_\varepsilon = \Omega \setminus \partial G_\varepsilon$.

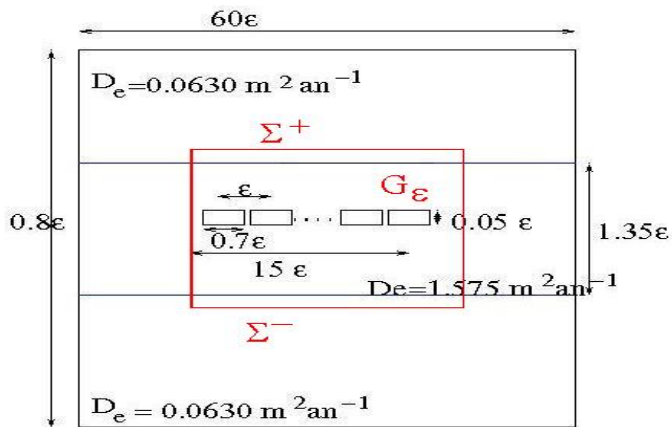
Même estimation en norme $L^\infty(0, T; L^2(\Omega_\varepsilon))$.

Remarques sur le comportement de c^1

En temps court le terme d'ordre 1 $\varepsilon w_\varepsilon(\frac{x}{\varepsilon})\Phi$ est du même ordre que c_ε^0 ;

après ce temps court la diffusion va devenir dominante, i.e. c_ε^0 est maintenant le terme le plus important du développement .

Validation numérique du modèle homogénéisé et du modèle d'ordre 1



15 modules

Figure: Cas test défini par l'ANDRA, nombre de modules $\Rightarrow 15$, $D_e \Rightarrow A/\omega$

Description générale

- (a) Méthode d'éléments finis mixtes pour toutes les simulations sur CASTEM (CEA)
- (b)

Description générale

- (a)
- (b) Comparaisons entre
 - Simulation de c_ε , **détailée**
 - Simulation de c^0 , **homogénéisée**
 - Simulation de c^1 , **d'ordre 1**

Description générale

(a)

(b) Comparaisons entre

Simulation de c_ε , **détailée**: maillage fin de Ω_ε^T ,
41584 quadrangles

Simulation de c^0 , **homogénéisée**: maillage grossier
de T , 6160 quadrangles

Simulation de c^1 , **d'ordre 1**

- Simulation c_ε^0 : maillage grossier T , 11403 quadrangles
- Problèmes auxiliaires: maillage fin de H_ε : 11750 quadrangles
- Post-traitement pour représenter c^1 :
interpolation de c_ε^0 , $\frac{\partial c_\varepsilon^0}{\partial x_i}$, problèmes auxiliaires
sur maillage fin de simulation détaillée.

Simulation dans un cas homogène: une déception pour le développement asymptotique d'ordre 1!

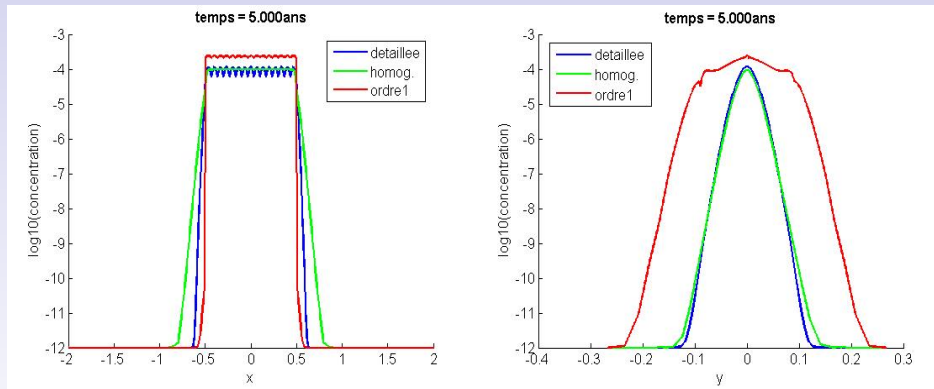


Figure: Comparaison des coupes horizontale (à gauche) et verticale (à droite) des valeurs en base log10 des 3 simulations pour 15 modules, diffusion homogène, source iode, au temps $t = 5000$ ans

Test influence de divers paramètres

- (a) valeur ϵ
- (b) emplacement du recollement flux
- (c) prise en compte coefficients hétérogène ordre 0

Validation numérique des trois modèles pour une diffusion homogène, l'influence de ϵ

Table: Précision relative en $\|\cdot\|_{L^\infty}$ de la simulation des modèles d'ordre 0 et 1 par rapport à la simulation du modèle détaillé vs valeur ϵ

erreur	temps(an) \ ϵ	1/15	1/30	1/60
$\ c_\epsilon - c^1\ _{L^\infty}$	5e3	1.1044	0.2047	0.0573
$\ c_\epsilon - c^1\ _{L^\infty}$	2e5	0.3725	0.2352	0.0586
$\ c_\epsilon - c^1\ _{L^\infty}$	1e6	0.3725	0.0287	0.0134
$\ c_\epsilon - c^0\ _{L^\infty}$	5e3	0.1259	0.0187	0.0149
$\ c_\epsilon - c^0\ _{L^\infty}$	2e5	1.89e-4	7.04e-4	9.2e-4
$\ c_\epsilon - c^0\ _{L^\infty}$	1e6	0.0175	0.0090	0.0054

Validation numérique des trois modèles pour une diffusion hétérogène, influence de l'emplacement du recollement de flux

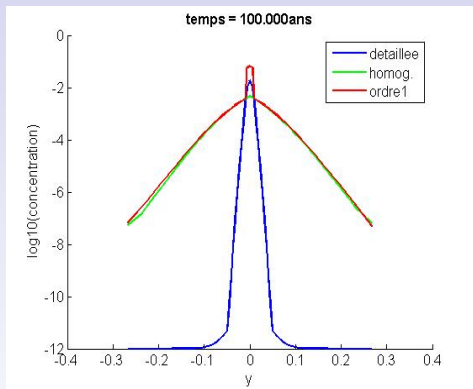


Figure: Comparaison des coupes verticales des valeurs en base log10 des 3 simulations, $h_\varepsilon = \varepsilon \log(1/\varepsilon)$ (gauche), $h_\varepsilon = \varepsilon$ (droite), 60 modules, diffusion hétérogène, source créneau, $t = 10^5$ ans

Validation numérique des trois modèles pour une diffusion hétérogène, temps court

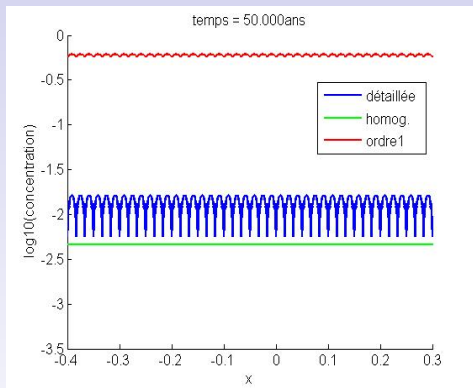


Figure: Comparaison des coupes horizontales des valeurs en base \log_{10} des 3 simulations, 60 modules, diffusion hétérogène, créneau source, $t = 5.10^4$ ans

Validation numérique des trois modèles pour une diffusion hétérogène, prise en compte couche argile pour modèles "ordre 0", temps long

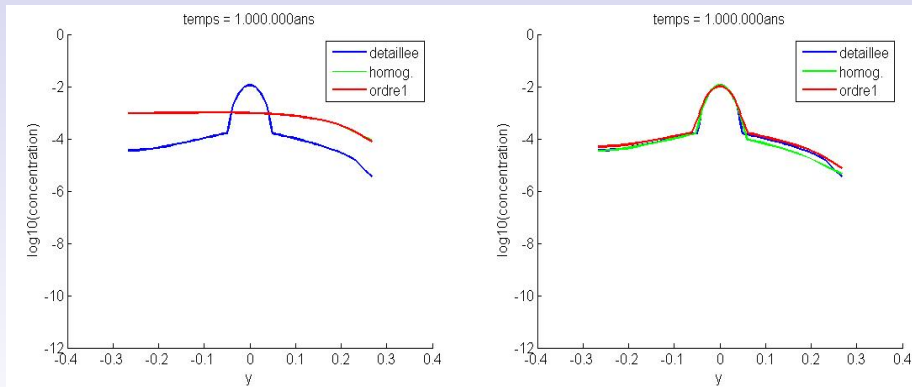


Figure: Comparaison des coupes verticales des valeurs en base log₁₀ des 3 simulations, 60 modules, c_{ϵ}^0 modifié, diffusion hétérogène, créneau source, $t = 1.10^6$ ans

En temps court

- Modèle homogénéisé: représente correctement concentration moyenne,
- Modèle d'ordre 1: représente oscillations, mais pas leur ordre de grandeur.

En temps longs

Ni le modèle homogénéisé ni le modèle d'ordre 1 ne peuvent représenter la rétention des radionucléides dans la couche hôte décrite par le modèle détaillé

Modifications des modèles

- le comportement moyen ie. le modèle homogénéisé c^0 et c_ϵ^0 devraient tenir compte de la couche hôte,
- Modèle d'ordre 1: le recollement de flux devrait être dans la couche hôte pour tenir compte de rétention des radionucléides dans couche hôte.

Adimensionalisation

- direction horizontale: adimensionalisation par longueur stockage L ,
- direction verticale: adimensionalisation par hauteur couche argile l ,
- $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2)$, $\varepsilon_1 = \frac{l_{inter}}{L}$, $\varepsilon_2 = \frac{h_M}{l}$, où l_{inter} est la distance entre les isobarycentres de modules successifs et h_M est la hauteur d'un module.

Adimensionalisation

- direction horizontale: adimensionalisation par longueur stockage L ,
- direction verticale: adimensionalisation par hauteur couche argile l ,
- $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2)$, $\varepsilon_1 = \frac{l_{inter}}{L}$, $\varepsilon_2 = \frac{h_M}{l}$, où l_{inter} est la distance entre les isobarycentres de modules successifs et h_M est la hauteur d'un module.

Hypothèse

$$\varepsilon_2 = \lambda \varepsilon_1, \quad \lambda \in \mathbf{R}, \quad \lambda = O(1).$$

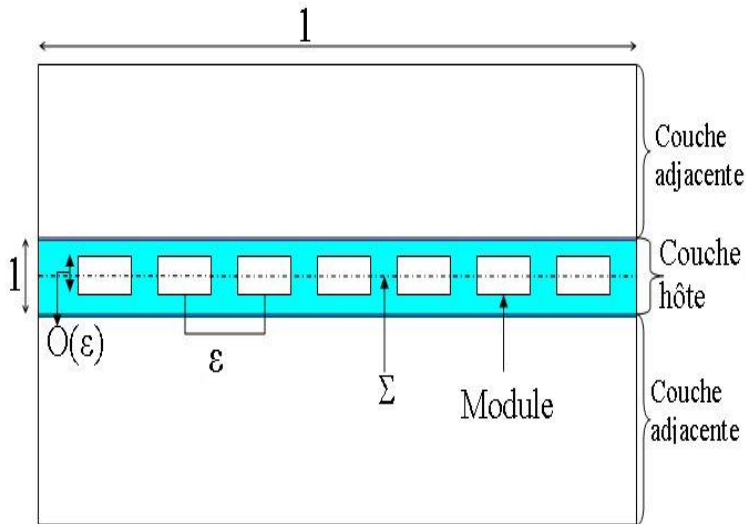


Figure: Les trois couches du sol contenant les modules: nouvelle adimensionalisation

$$\omega \frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div}(\mathbf{A} \nabla c) + (\mathbf{v} \cdot \nabla) c + \lambda \omega c = 0 \text{ in } \tilde{\Omega}^T \quad (16)$$

$$c(x, 0) = c_0(x) \quad x \in \tilde{\Omega} = \Omega \setminus \Sigma \quad (17)$$

$$c = 0 \quad \text{sur } S_1 \quad (18)$$

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{A} \nabla c - \mathbf{v} c) = 0 \quad \text{sur } S_2 \quad (19)$$

$$[c] = 0 \quad , \quad [\mathbf{e}_2 \cdot (\mathbf{A} \nabla c - \mathbf{v} c)] = -|\tilde{M}| \phi \quad \text{sur } \Sigma \quad , \quad (20)$$

où $\mathbf{A}, \mathbf{v}, \omega$ fonctions de $(x, \frac{x_1}{\varepsilon_1}, \frac{x_2}{\varepsilon_2})$, $[\cdot]$ notation pour le saut sur Σ , et $|\tilde{M}|$: périmètre de M à l'échelle rapide.

Nouveau développement asymptotique

Dans G_ε : domaine intérieur, un développement asymptotique de c_ε est recherché sous la forme:

$$c_\varepsilon \simeq c_\varepsilon^0 + 0.5\varepsilon_j \left(\chi_\varepsilon^{j,k} \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \frac{\partial c_\varepsilon^0}{\partial x_k} + w_\varepsilon^j \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \Phi - c_\varepsilon^0 \rho_\varepsilon^{j,k} \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) v_k^h \right) \equiv c_\varepsilon^1, \quad (21)$$

- variable rapide $y = (y_1, y_2) = \left(\frac{x_1}{\varepsilon_1}, \frac{x_2}{\varepsilon_2} \right)$
- c_ε^0 mime le comportement de c^0 mais deux sauts sur $\Sigma_\varepsilon^+ = \{ \varepsilon_2 \log(1/\varepsilon_2) \} \times] -\delta/2, \delta/2 [$ et sur $\Sigma_\varepsilon^- = \{ -\varepsilon_2 \log(1/\varepsilon_2) \} \times] -\delta/2, \delta/2 [$, au lieu de Σ .
- Les correcteurs $\chi_\varepsilon^{j,k}$, $\rho_\varepsilon^{j,k}$ et w_ε^j sont solutions 1-périodiques en y_1 de trois **problèmes auxiliaires diffusion stationnaire** posés sur une bande infinie:

$$G_\varepsilon = (] -1/2, 1/2[\times \mathbf{R}) \setminus \mathcal{M}_\varepsilon.$$

Nouveaux problèmes auxiliaires

Exemple de **problème auxiliaire**:

$$\| \left\{ \begin{array}{l} -\nabla \cdot (\bar{A} \nabla w_\epsilon^1) = 0 \quad \text{dans } G_\epsilon \\ n \cdot (\bar{A} \nabla w_\epsilon^1) = 1 \quad \text{sur } \partial M_\epsilon \\ w_\epsilon^1 \text{ est 1-périodique en } y_1 \\ \lim_{y_2 \rightarrow \infty} \bar{A} \nabla w_\epsilon^1 = \pm 1/2 |\partial M_\epsilon| \end{array} \right. ; \quad \bar{A} = \begin{pmatrix} A_{11}^h & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda} A_{22}^h \end{pmatrix} \quad (22)$$

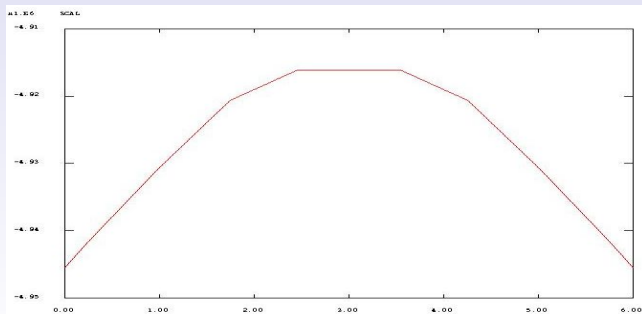


Figure: Coupe verticale de la solution de (22)

Validation numérique des trois modèles pour une diffusion hétérogène, nouveaux modèles, temps court

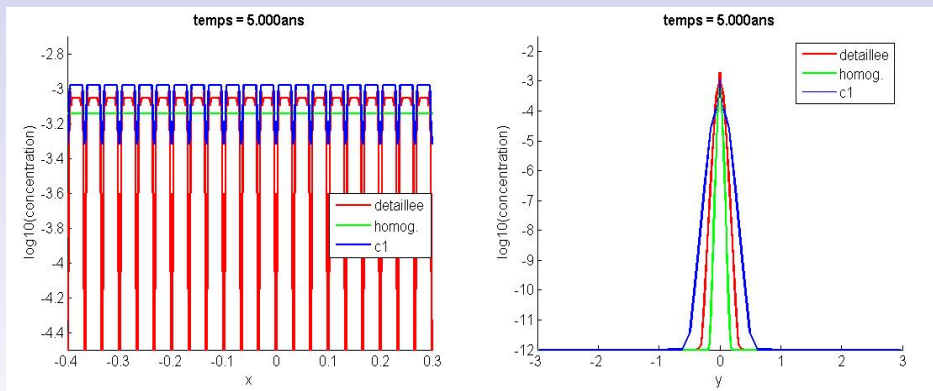


Figure: Comparaison des coupes horizontale (gauche) et verticale (droite) des valeurs en base \log_{10} des 3 simulations, 30 modules, nouveau modèle, diffusion hétérogène, source iode, $t = 5.10^3$ ans

Validation numérique des trois modèles pour une diffusion hétérogène, nouveaux modèles, temps long

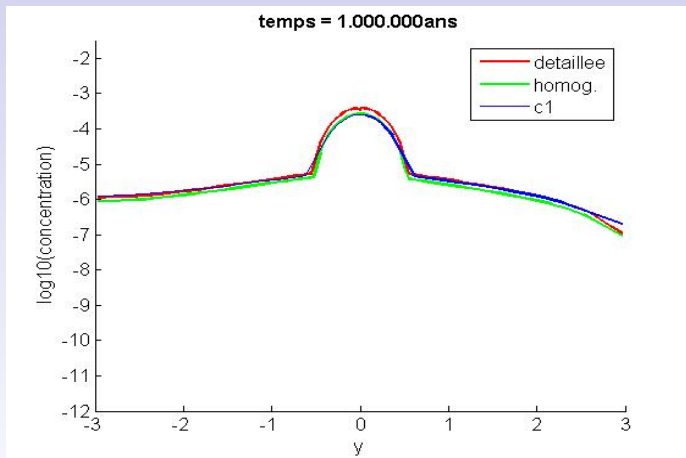


Figure: Comparaison des coupes horizontale (gauche) et verticale (droite) des valeurs en base \log_{10} des 3 simulations, 30 modules, nouveau modèle, diffusion hétérogène, source iode $t = 1 \cdot 10^6$ ans

Validation numérique des trois modèles pour une diffusion hétérogène, nouveaux modèles, temps court, Plutonium

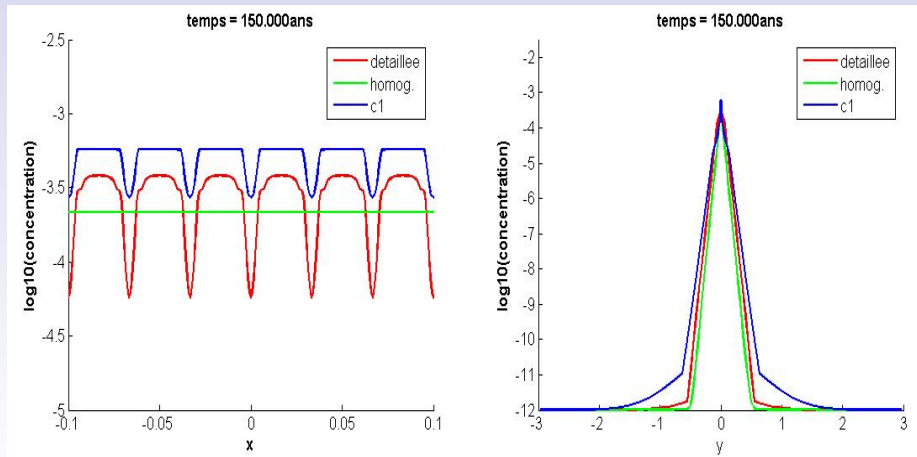


Figure: Comparaison des coupes horizontale (gauche) et verticale

Conclusion générale

En temps court

- Modèle homogénéisé: représente correctement concentration moyenne,
- Modèle d'ordre 1: représente oscillations et leur ordre de grandeur de manière satisfaisante après adaptation.

En temps longs

Après adaptation, les modèles homogénéisé et d'ordre 1 peuvent représenter la rétention des radionucléides dans la couche hôte décrite par le modèle détaillé

Perspectives Modélisation

- Développer un modèle stochastique d'homogénéisation des termes source.