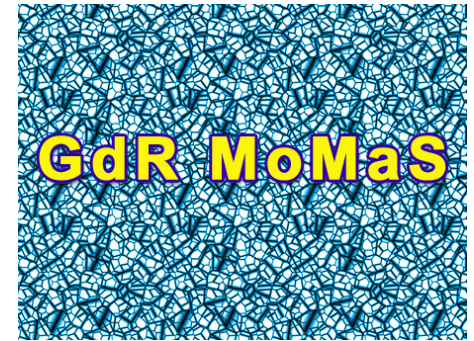




# Benchmark Reactive Transport



# Comité Scientifique

A. Bourgeat

Université Claude Bernard, Lyon

S. Bryant

University Austin, Texas

J. Carrayrou

Université Louis Pasteur, Strasbourg

H. Van Duijn

Technische Universiteit, Eindhoven

M. Kern

INRIA, Rocquencourt

P. Knabner

Institute for Applied Mathematics, Erlangen

# Objectifs

Comparaison et développement de méthodes numériques

Toucher la communauté la plus vaste possible

Garder un niveau de complexité réaliste pour un modèle hydro-géochimique

# Présentation générale

3 niveaux de difficulté chimique

easy

medium

hard

4 types d'écoulements

1D dispersion faible / dispersion élevée

2D dispersion faible / dispersion élevée

Hétérogénéités hydrodynamiques et chimiques

Milieu A : très perméable peu réactif

Milieu B : peu perméable très réactif

# Description de l'écoulement

Loi de Darcy

Equation de  
continuité

$$\begin{cases} \omega \mathbf{u} = -\mathbf{K} \nabla (h) \\ \nabla (\omega \mathbf{u}) = 0 \end{cases}$$

Conditions aux limites

$$\omega \mathbf{u} = \Phi_N \quad \text{sur } \partial\Omega_N$$

$$h = H_D \quad \text{sur } \partial\Omega_D$$

# Description du transport

Equation d'advection-dispersion-réaction

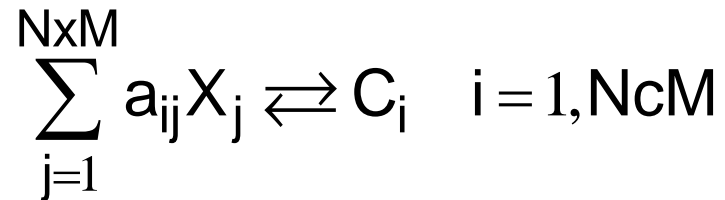
$$\frac{\partial (T_{M_j} + T_{F_j})}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{u} T_{M_j}) + \nabla \cdot (\bar{\bar{\mathbf{D}}} \cdot \nabla T_{M_j}) - \sum_k [\text{ac}_{k,j} \cdot f_k(C_i, C_{c_k})]$$

Tenseur de dispersion plein

$$\bar{\bar{\mathbf{D}}} = \begin{bmatrix} \alpha_T \cdot |\mathbf{u}| + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{u_x^2}{|\mathbf{u}|} & (\alpha_L - \alpha_T) \frac{u_x \cdot u_y}{|\mathbf{u}|} \\ (\alpha_L - \alpha_T) \frac{u_x \cdot u_y}{|\mathbf{u}|} & \alpha_T \cdot |\mathbf{u}| + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{u_y^2}{|\mathbf{u}|} \end{bmatrix} = \alpha_T \cdot |\mathbf{u}| \mathbf{I} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}}{|\mathbf{u}|}$$

# Description de la chimie

Réactions en phase aqueuse mobile



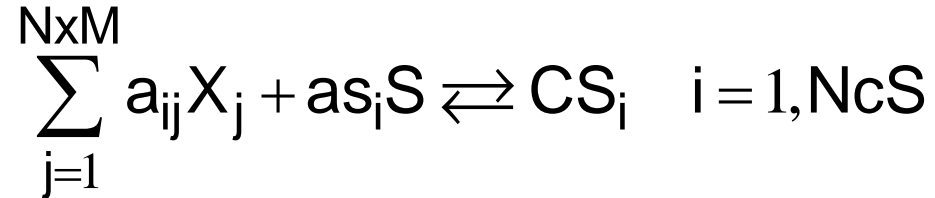
Loi d'action de Masse

$$C_i = K_i \cdot \prod_{j=1}^{N \times M} X_j^{a_{i,j}}$$

Équation de conservation

$$T_{M_j} = X_j + \sum_{i=1}^{N_{cM}} a_{i,j} C_i$$

# Réactions de sorption (immobile)



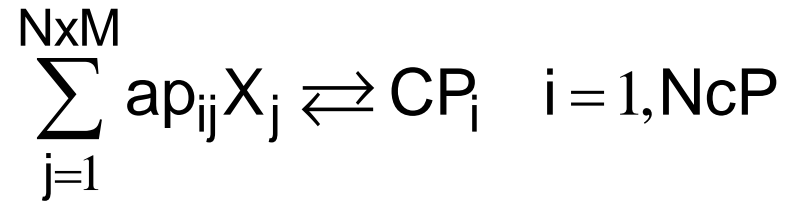
## Loi d'action de Masse

$$CS_i = K_{s_i} \cdot \prod_{j=1}^{N \times M} X_j^{a_{s_i, j}} \cdot S^{a_{s_i}}$$

## Équation de conservation

$$T_{F_S} = S + \sum_{i=1}^{N_{cS}} a_{s_i} \cdot CS_i$$

# Réactions de précipitation (immobile)



## Loi d'action de Masse

$$\text{if } 1 > K_{p_i} \cdot \prod_{j=1}^{N \times M} X_j^{a_{p_{i,j}}} \text{ then } CP_i = 0$$

$$\text{else } K_{p_i} \cdot \prod_{j=1}^{N \times M} X_j^{a_{p_{i,j}}} = 1$$

# Équations de conservation

Partie mobile

Partie fixe

Composant mobile

$$T_{M_j} = X_j + \sum_{i=1}^{NcM} a_{i,j} C_i$$

$$T_{F_j} = \sum_{i=1}^{NcS} a_{s_i} \cdot CS_i + \sum_{i=1}^{NcP} a_{p_{i,j}} \cdot CP_i$$

Composant de sorption (immobile)

$$T_{M_s} = 0$$

$$T_{F_s} = S + \sum_{i=1}^{NcS} a_{s_i} \cdot CS_i$$

# Modèle de chimie cinétique

Description par vitesse de réaction

$$\frac{dC_k}{dt} = f_k(C_i, C_k)$$

Rappel :



$$\frac{\partial (T_{M_j} + T_{F_j})}{\partial t} = -\nabla \cdot (u T_{M_j}) + \nabla \cdot (\bar{\bar{D}} \cdot \nabla T_{M_j}) - \sum_k [a_{k,j} \cdot f_k(C_i, C_k)]$$

# Les domaines

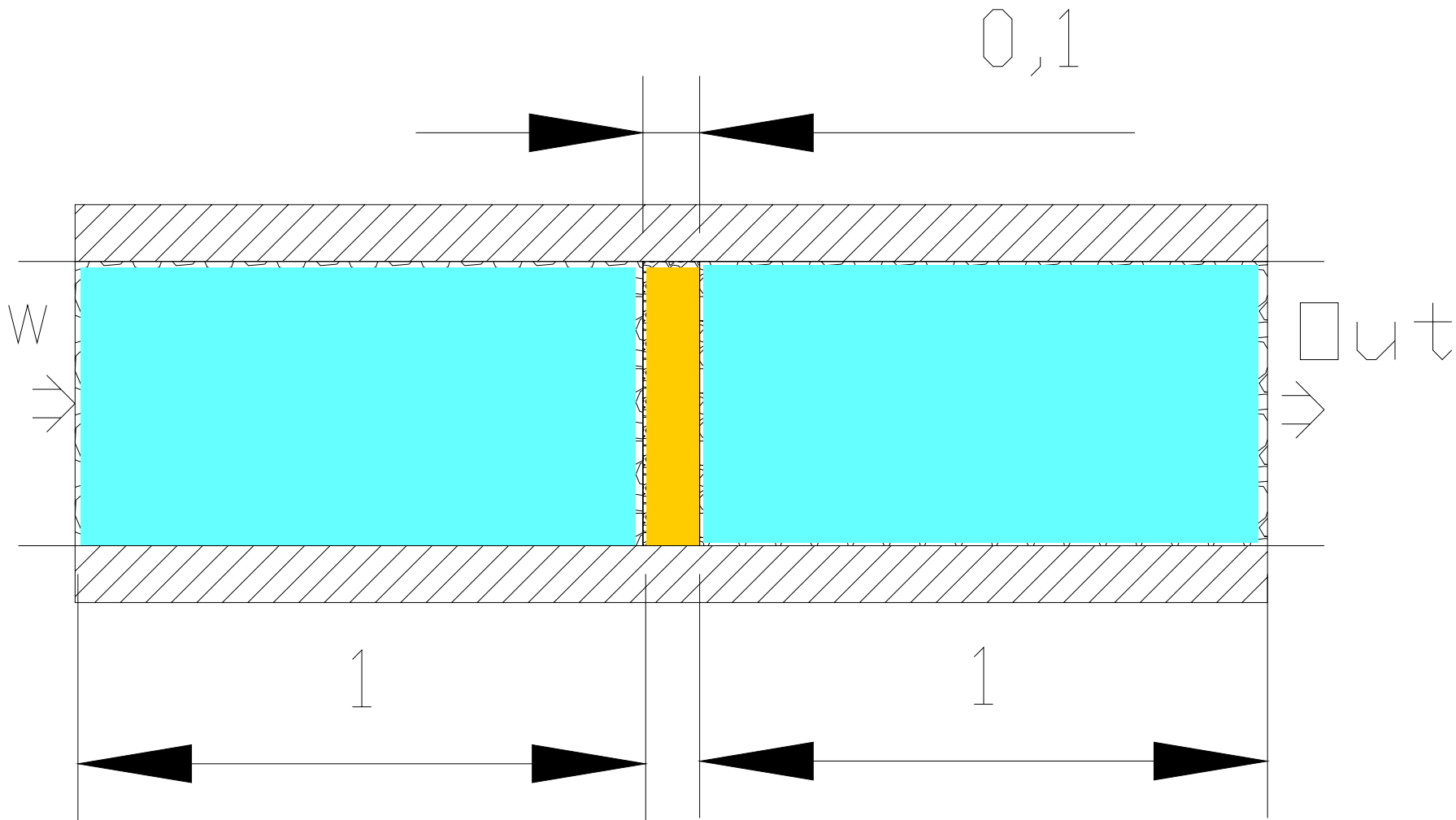
Domaine 1D

Domaine 2D

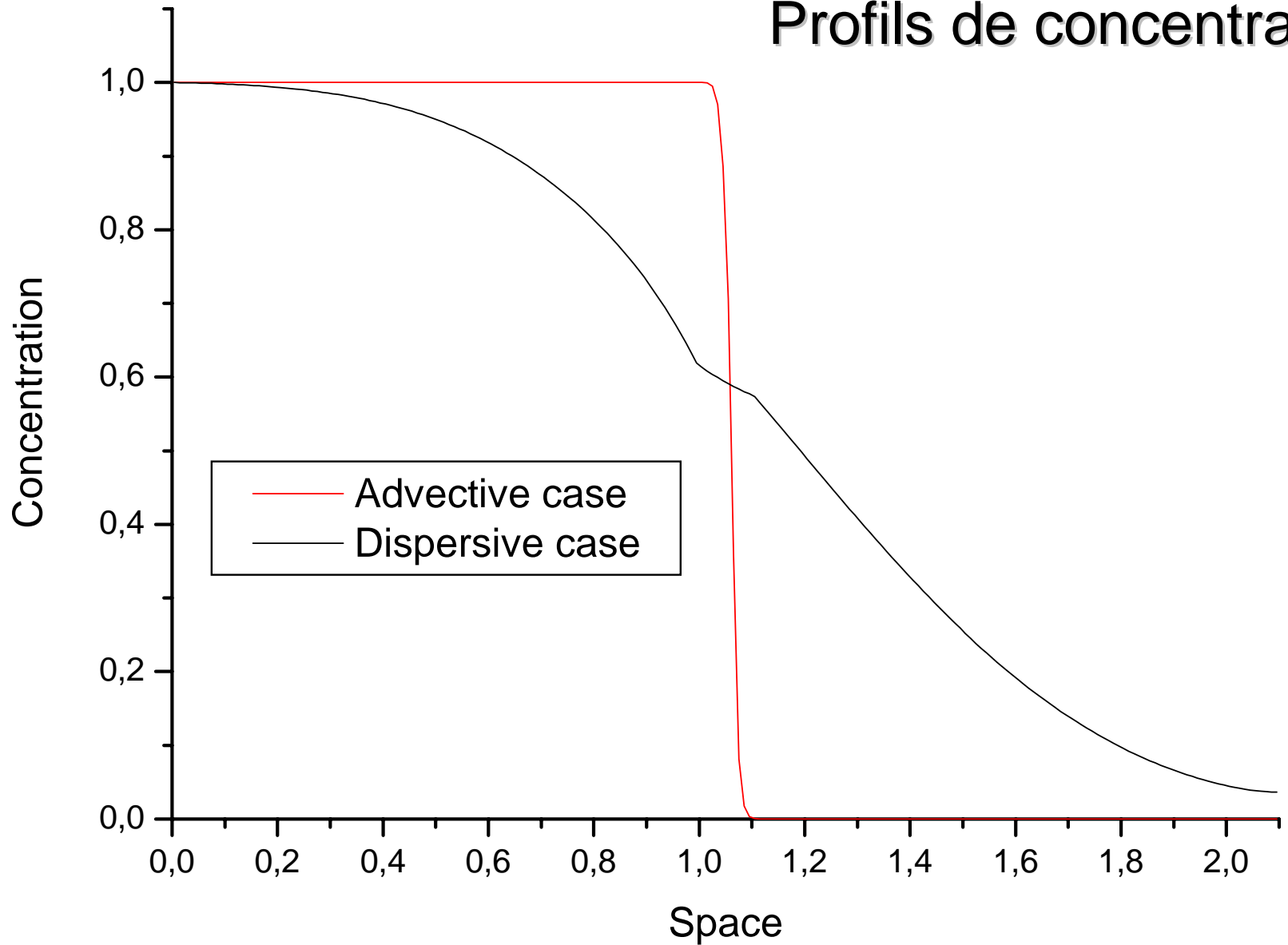
# Les 2 milieux

	Milieu A 	Milieu B 
Porosité $\omega$	0,25	0,5
Perméabilité K	$10^{-2}$	$10^{-5}$
Dispersivité $\alpha_L$	10 // $10^{-2}$	60 // $6 \cdot 10^{-2}$
Dispersivité $\alpha_T$	1 // $10^{-3}$	6 // $6 \cdot 10^{-3}$
Concentration TS	1	10

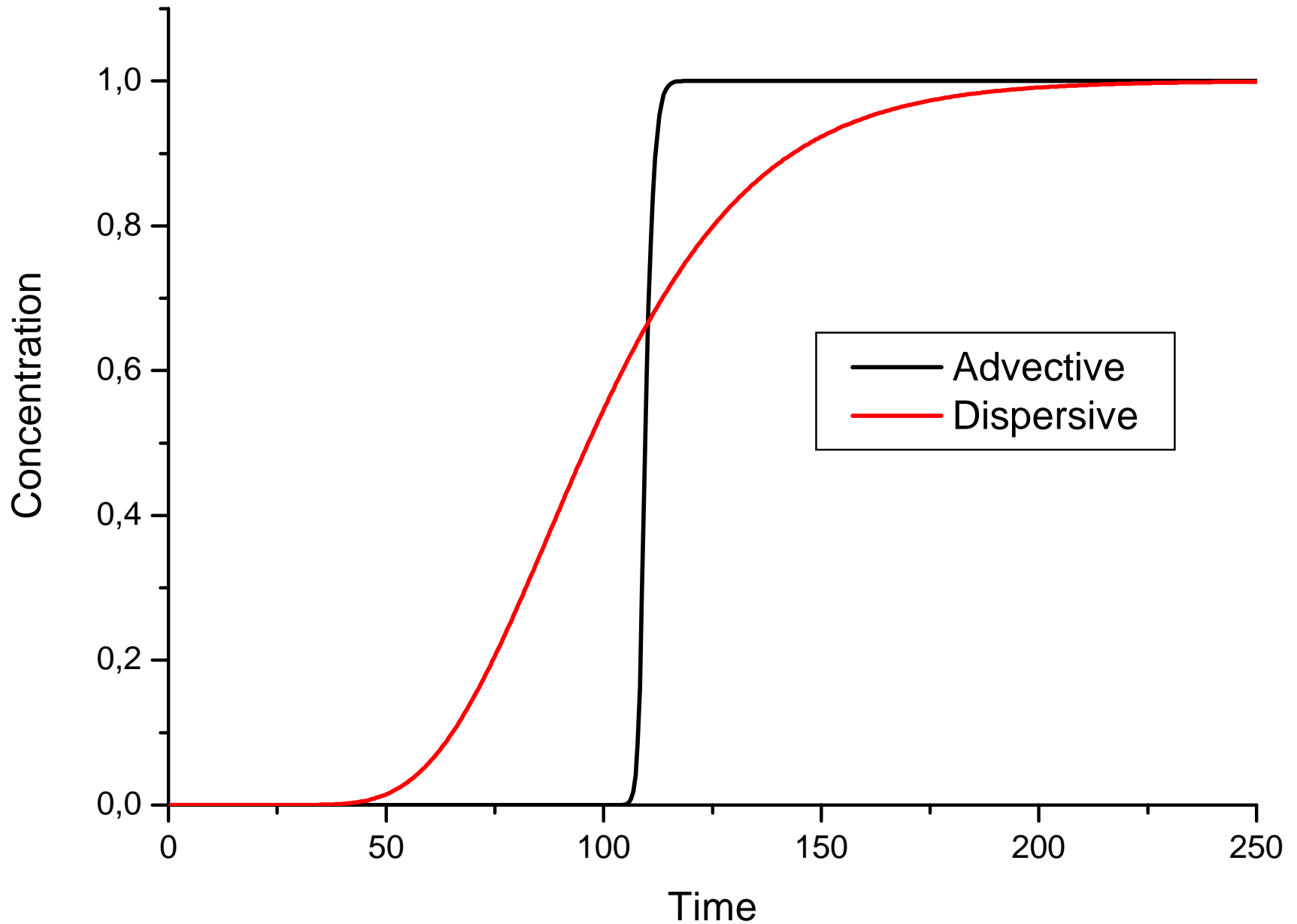
# Domaine 1D



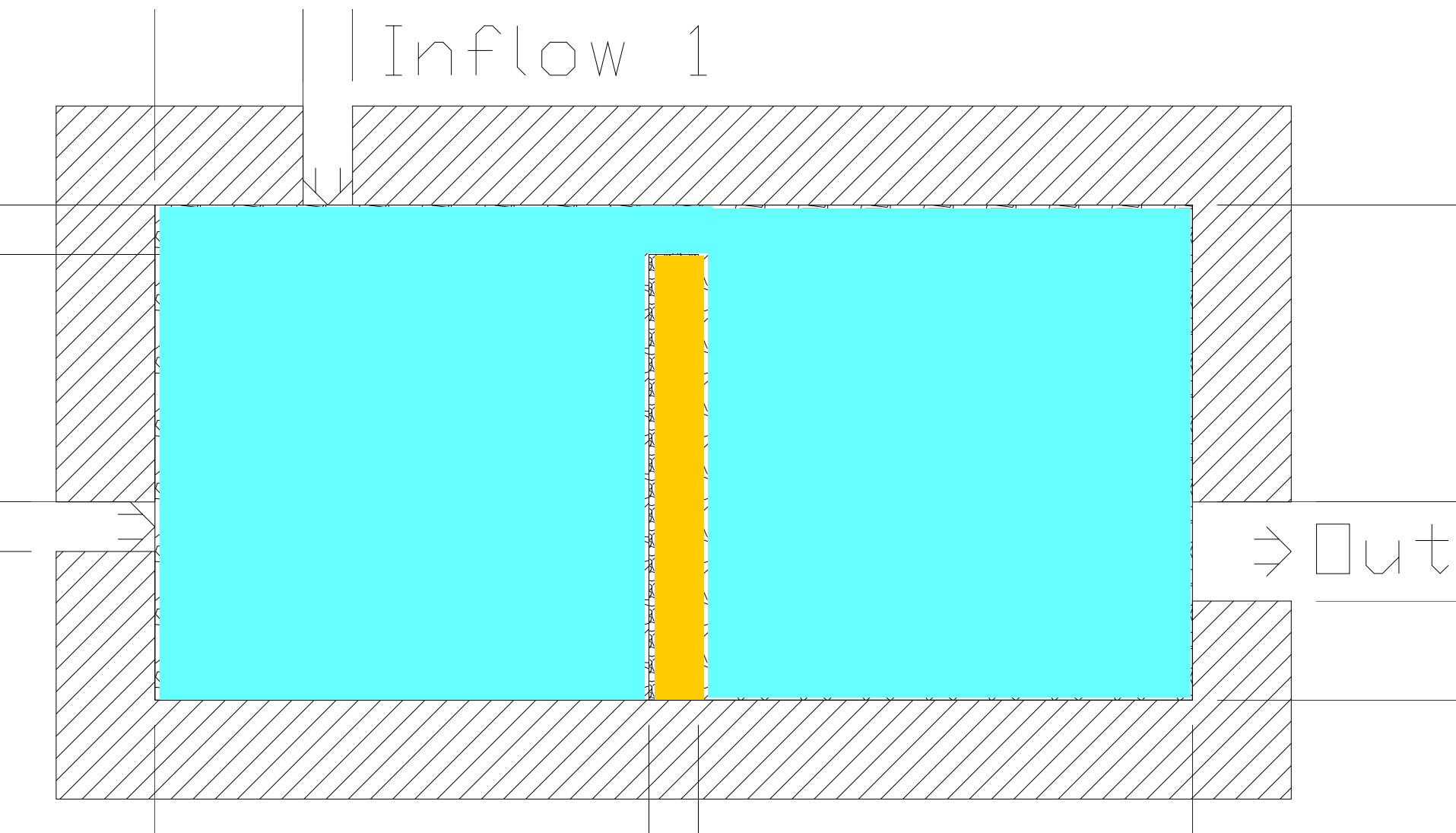
# Profils de concentration

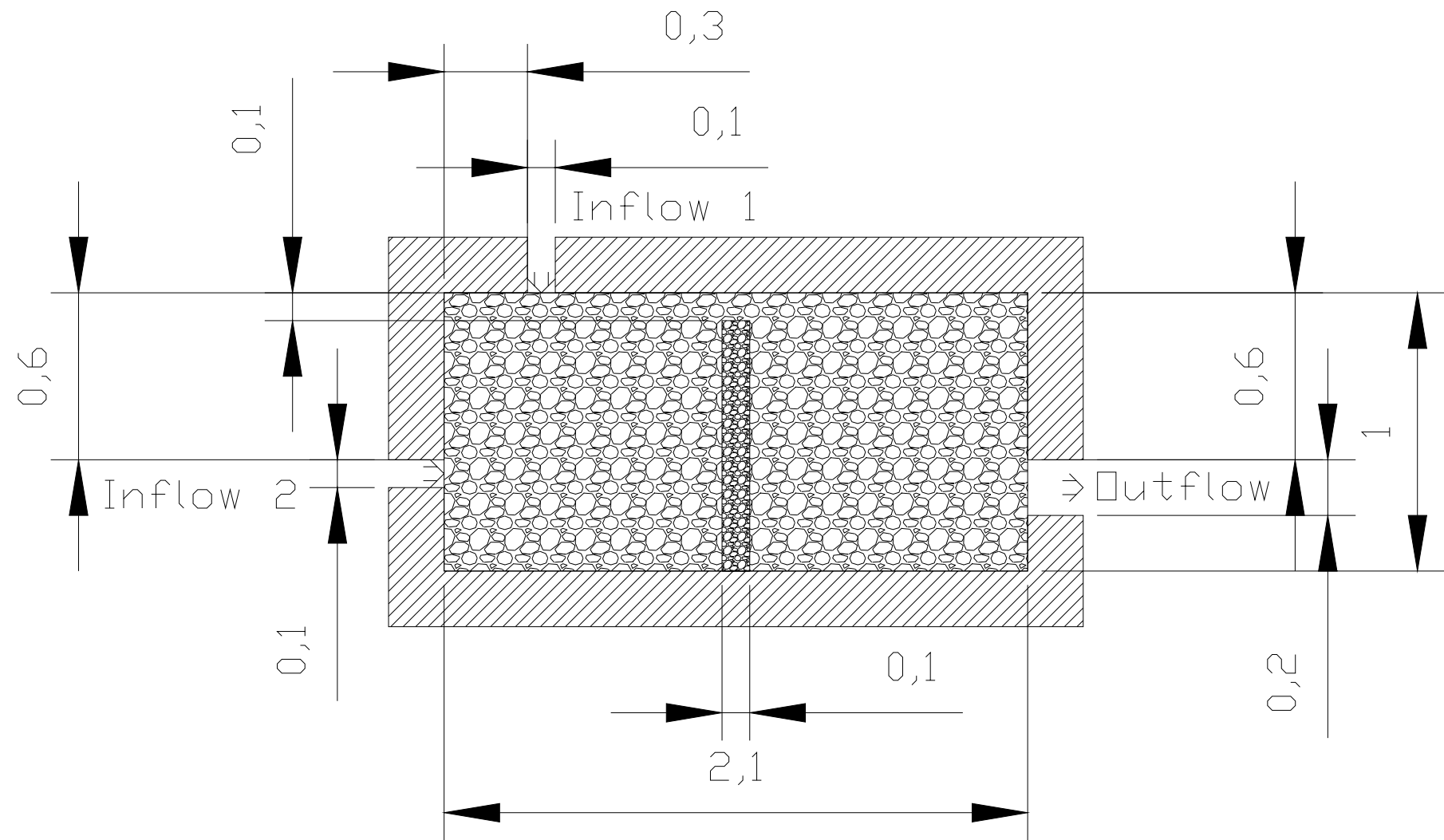


# Courbes d'éluion

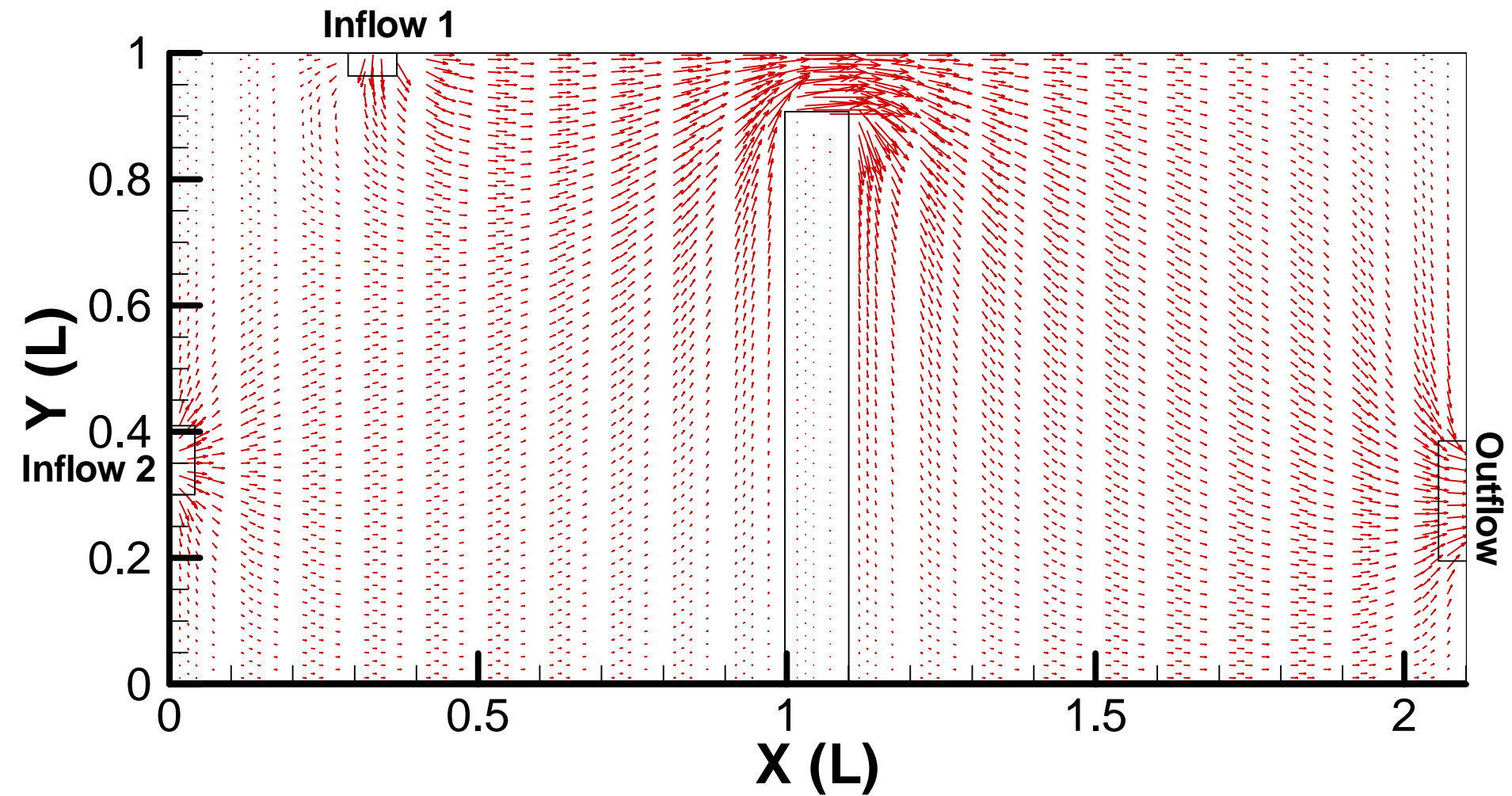


# Domaine 2D





# Champ de Vitesses



# Les niveaux de difficulté

Easy

Medium

Hard

# Résultats attendus

Courbes d'élutions

Profils de concentration à  
différents instants

Estimation du temps de calcul

# Easy

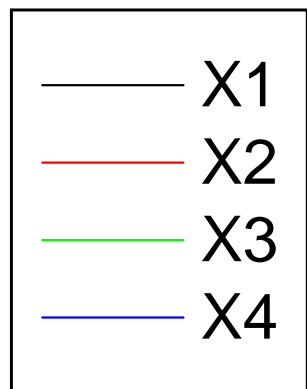
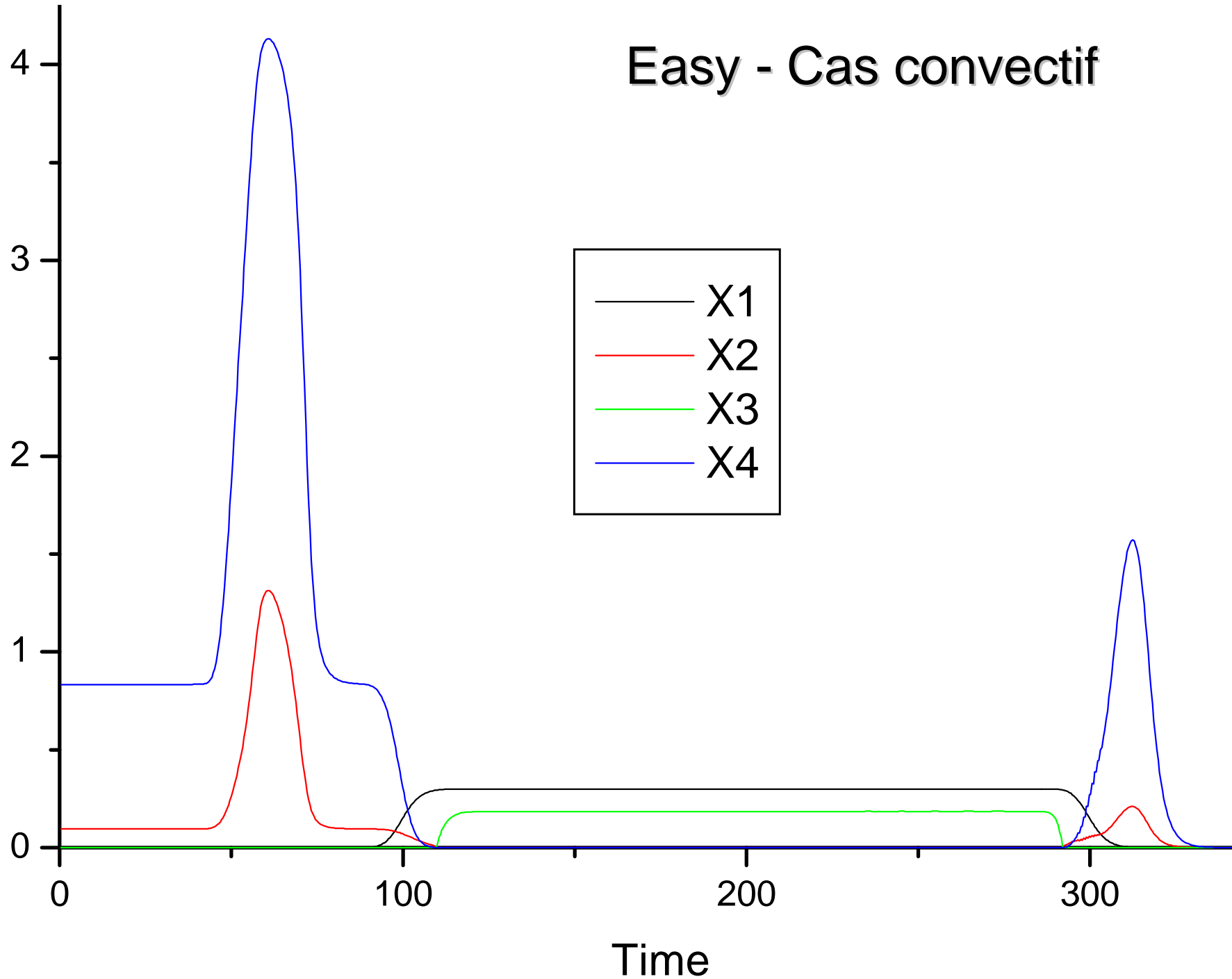
- Chimie à l'équilibre instantané
- Peu d'espèces chimique
- Pas de précipitation / dissolution
- Pas de cinétique
- Non linéarité modérée

**Table 4 : Equilibrium for easy test case**

	$X_1$	$X_2$	$X_3$	$X_4$	S	K
$C_1$	0	-1	0	0	0	1.00E-12
$C_2$	0	1	1	0	0	1
$C_3$	0	-1	0	1	0	1
$C_4$	0	-4	1	3	0	0.1
$C_5$	0	4	3	1	0	1.00E+35
$CS_1$	0	3	1	0	1	1.00E+6
$CS_2$	0	-3	0	1	2	1.00E-01
<b>Total</b> (m.L <sup>-3</sup> )	$T_1$	$T_2$	$T_3$	$T_4$	TS	
Initial for medium A	0	-2	0	2	1	
Initial for medium B	0	-2	0	2	10	

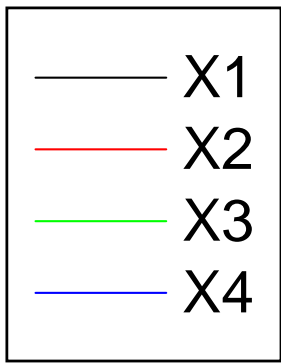
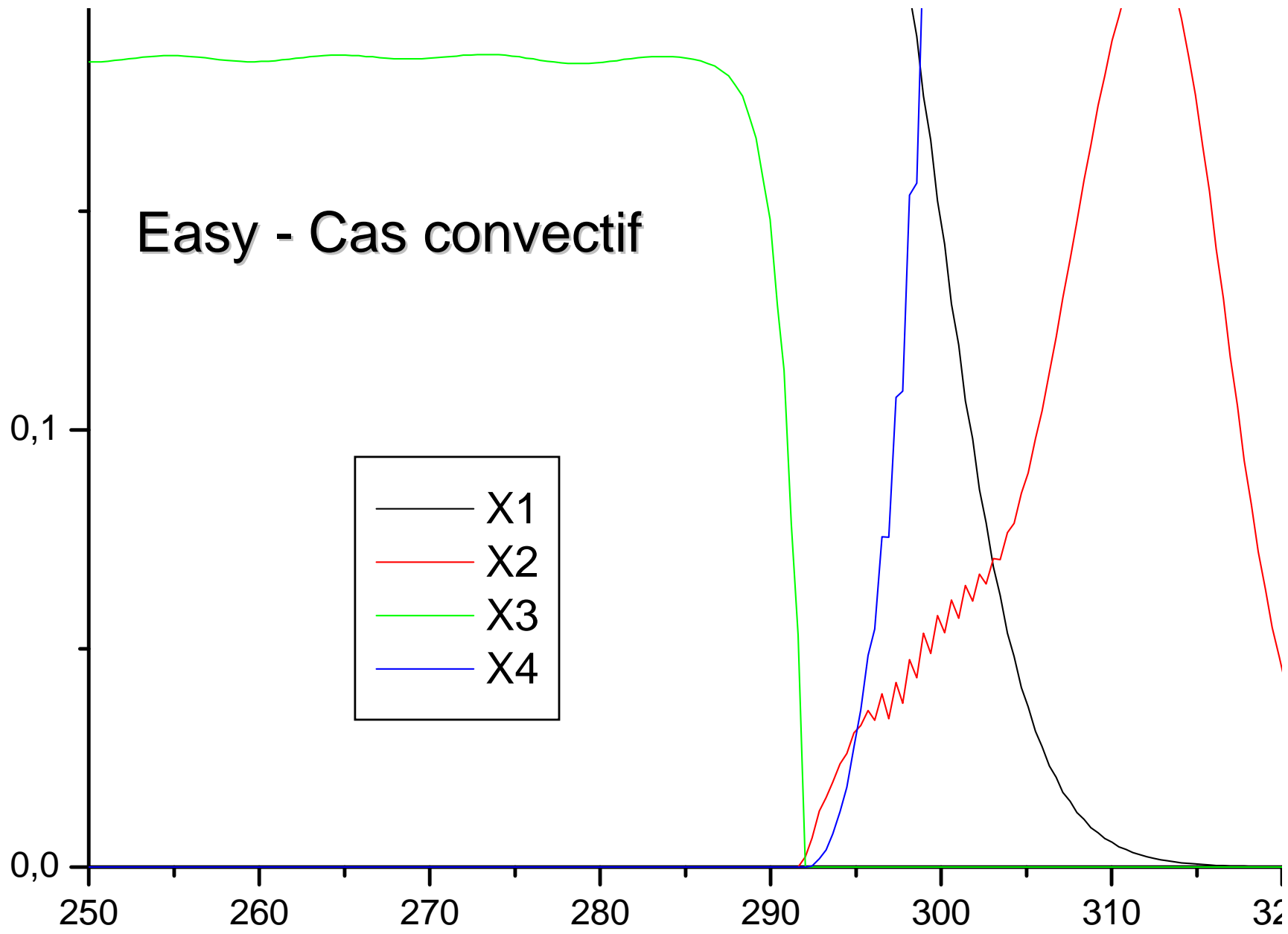
# Easy - Cas convectif

Concentration



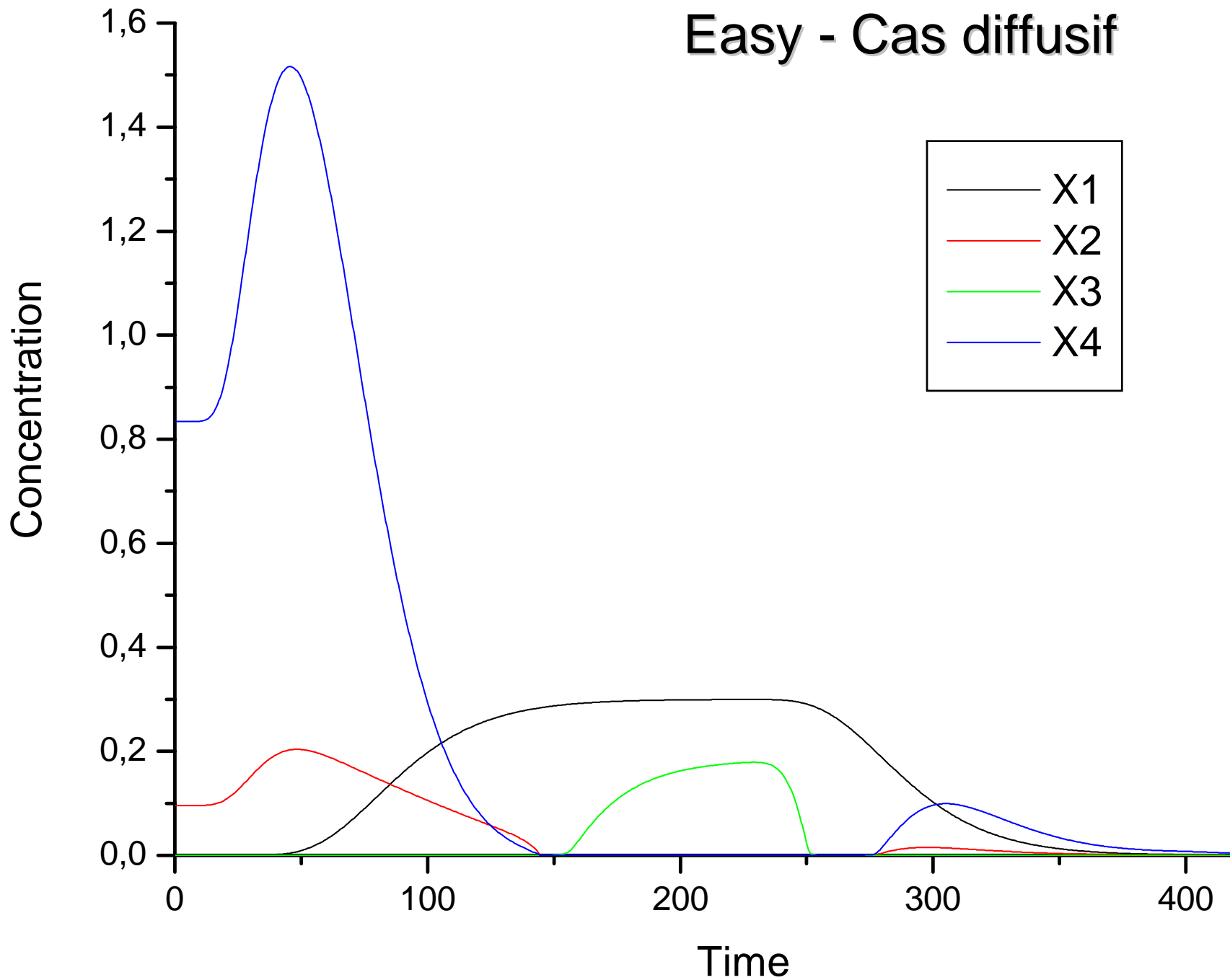
# Easy - Cas convectif

Concentration



Time

# Easy - Cas diffusif



# Medium

- Chimie à l'équilibre instantané
- Pas de précipitation / dissolution
- Cinétique
- Forte non linéarité

**Table 5 : Equilibrium for medium test case**

	$X_1$	$X_2$	$X_3$	$X_4$	S	K
$C_1$	0	-1	0	0	0	1.00E-12
$C_2$	0	1	1	0	0	1
$C_3$	0	-1	0	1	0	1
$C_4$	0	-4	1	3	0	0.1
$C_5$	0	4	3	1	0	1.00E+35
$C_6$	0	10	3	0	0	1,00E+32
$C_7$	0	-8	0	2	0	1,00E-04
$CS_1$	0	3	1	0	1	1.00E+6
$CS_2$	0	-3	0	1	2	1.00E-01
Total (m.L <sup>-3</sup> )	$T_1$	$T_2$	$T_3$	$T_4$	TS	
Initial for media A	0	-3	0	1	1	
Initial for media B	0	-9	0	3	10	

# Cinétique

Formation d'une espèce immobile :  $3C_3 \rightleftharpoons Cc + 2X_4$

$$\frac{dCc}{dt} = \left( 0.2 \frac{C_3^3}{X_4^2} - 1 \right) k \quad \text{with } Cc \geq 0$$

$$\text{if } 0.2 \frac{C_3^3}{X_4^2} \geq 1 \text{ then } k = 10^{-2} \text{ else } k = 10$$

Termes puit-source

$$Cc = 3C_3 - 2X_4 = -3X_2 + X_4$$

$$\sum_k \left[ ac_{k,2} \cdot f_k (C_i, Cc_k) \right] = -3 \frac{dCc}{dt}$$

$$\sum_k \left[ ac_{k,4} \cdot f_k (C_i, Cc_k) \right] = \frac{dCc}{dt}$$

# Hard

- Chimie à l'équilibre instantané
- Forte non linéarité
- Précipitation-dissolution
- Cinétique

**Table 6 : Equilibrium for hard test case**

	$X_1$	$X_2$	$X_3$	$X_4$	$X_5$	S	K
$C_1$	0	-1	0	0	0	0	1.00E-12
$C_2$	0	1	1	0	0	0	1
$C_3$	0	-1	0	1	0	0	1
$C_4$	0	-4	1	3	0	0	0.1
$C_5$	0	4	3	1	0	0	1.00E+35
$C_6$	0	10	3	0	0	0	1,00E+32
$C_7$	0	-8	0	2	0	0	1,00E-04
$CS_1$	0	3	1	0	0	1	1.00E+6
$CS_2$	0	-3	0	1	0	2	1.00E-01
$CP_1$	0	3	1	0	0	0	1,00E+10
$CP_2$	0	1	0	0	1	0	20
Total (m.L <sup>-3</sup> )	$T_1$	$T_2$	$T_3$	$T_4$	$T_5$	TS	
Initial for media A	0	-30	0	10	0	1	
Initial for media B	0	-90	0	30	0	10	

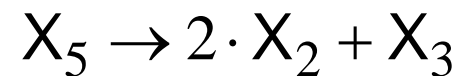
# Cinétique

Formation d'une espèce immobile :  $3C_3 \rightleftharpoons Cc + 2X_4$

$$\frac{dCc}{dt} = \left( 0.2 \frac{C_3^3}{X_4^2} - 1 \right) k \quad \text{with } Cc \geq 0$$

$$\text{if } 0.2 \frac{C_3^3}{X_4^2} \geq 1 \text{ then } k = 10^{-2} \text{ else } k = 10$$

Composant  $X_5$  non stable :



$$v_{X_5} = 0.005 \cdot X_5 + 5 \cdot CP_2$$

## Termes puit-source

$$\sum_k \left[ ac_{k,2} \cdot f_k (C_i, Cc_k) \right] = -3 \frac{dCc}{dt} - 2(0,05 \cdot X_5 + 5 \cdot CP_2)$$

$$\sum_k \left[ ac_{k,3} \cdot f_k (C_i, Cc_k) \right] = -(0,05 \cdot X_5 + 5 \cdot CP_2)$$

$$\sum_k \left[ ac_{k,4} \cdot f_k (C_i, Cc_k) \right] = \frac{dCc}{dt}$$

$$\sum_k \left[ ac_{k,5} \cdot f_k (C_i, Cc_k) \right] = (0,05 \cdot X_5 + 5 \cdot CP_2)$$

# Conclusion

- Des difficultés réelles pour le transport
- Une chimie suffisamment simple pour être comprise par le plus grand nombre
- Une chimie suffisamment complexe pour proposer des problèmes numériques
- Ce benchmark
  - Présente les mêmes difficultés numériques qu'un cas réel
  - Est plus simple et accessible qu'un cas réel

# Résultats attendus

## **-Approche globale / séparation d'opérateur**

- Quelle approche globale : DAE // DSA
- Quelle séparation : SNIA // SIA

## **-Modélisation de la précipitation – dissolution**

- Ajout d'équation
- Changement de variable
- Points intérieurs

## **-Solveur des systèmes non linéaire**

- Newton
- Fraction Continues Positives
- Armijo