

Simulation d'un stockage profond de déchets radioactifs Etude des cas Couplex

J. Erhel - INRIA-RENNES

Thèse de H. Hoteit

Chaire UNESCO - Calcul numérique intensif
TUNIS - Mars 2004

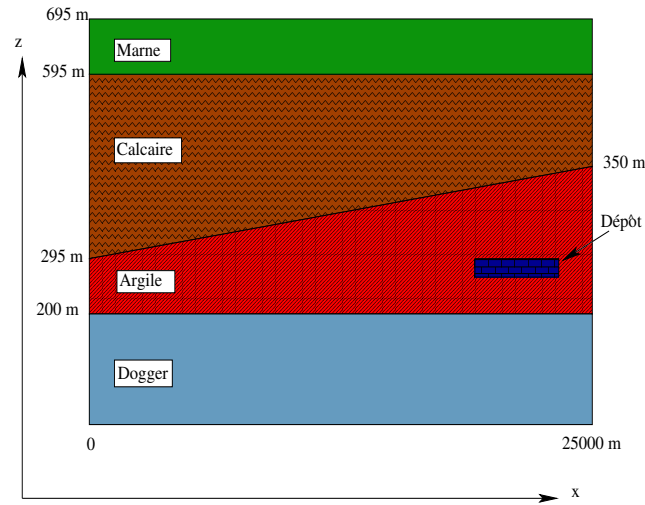
Description du problème

Couplex est un ensemble de 3 exercices, proposé par l'**ANDRA**, pour simuler les transferts de radionucléides depuis un stockage en formation géologique, jusqu'à la surface.



Description du problème

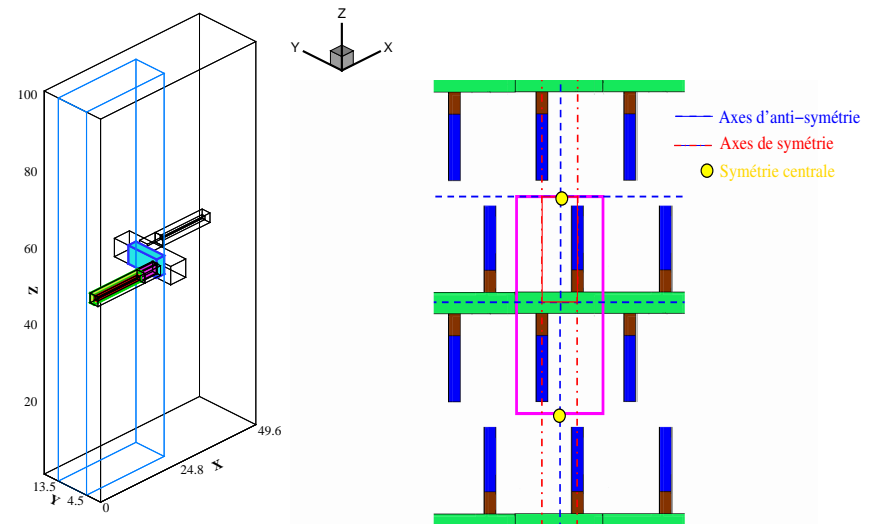
Couplex est un ensemble de 3 exercices, proposé par l'**ANDRA**, pour simuler les transferts de radionucléides depuis un stockage en formation géologique, jusqu'à la surface.



Couplex 1: Simulation simplifiée en 2D.

Description du problème

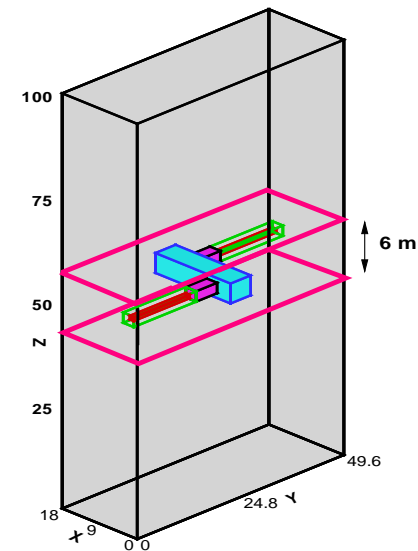
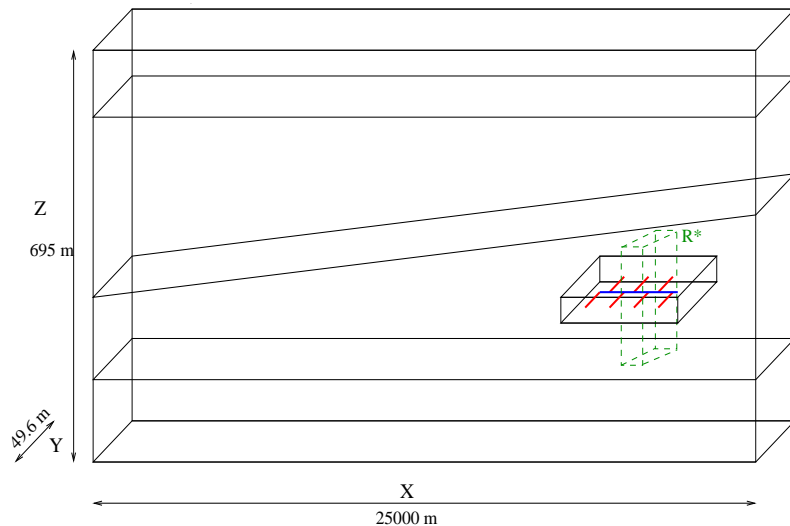
Couplex est un ensemble de 3 exercices, proposé par l'**ANDRA**, pour simuler les transferts de radionucléides depuis un stockage en formation géologique, jusqu'à la surface.



Couplex 2: se concentre sur le champ près du stockage en 3D.

Description du problème

Couplex est un ensemble de 3 exercices, proposé par l'**ANDRA**, pour simuler les transferts de radionucléides depuis un stockage en formation géologique, jusqu'à la surface.



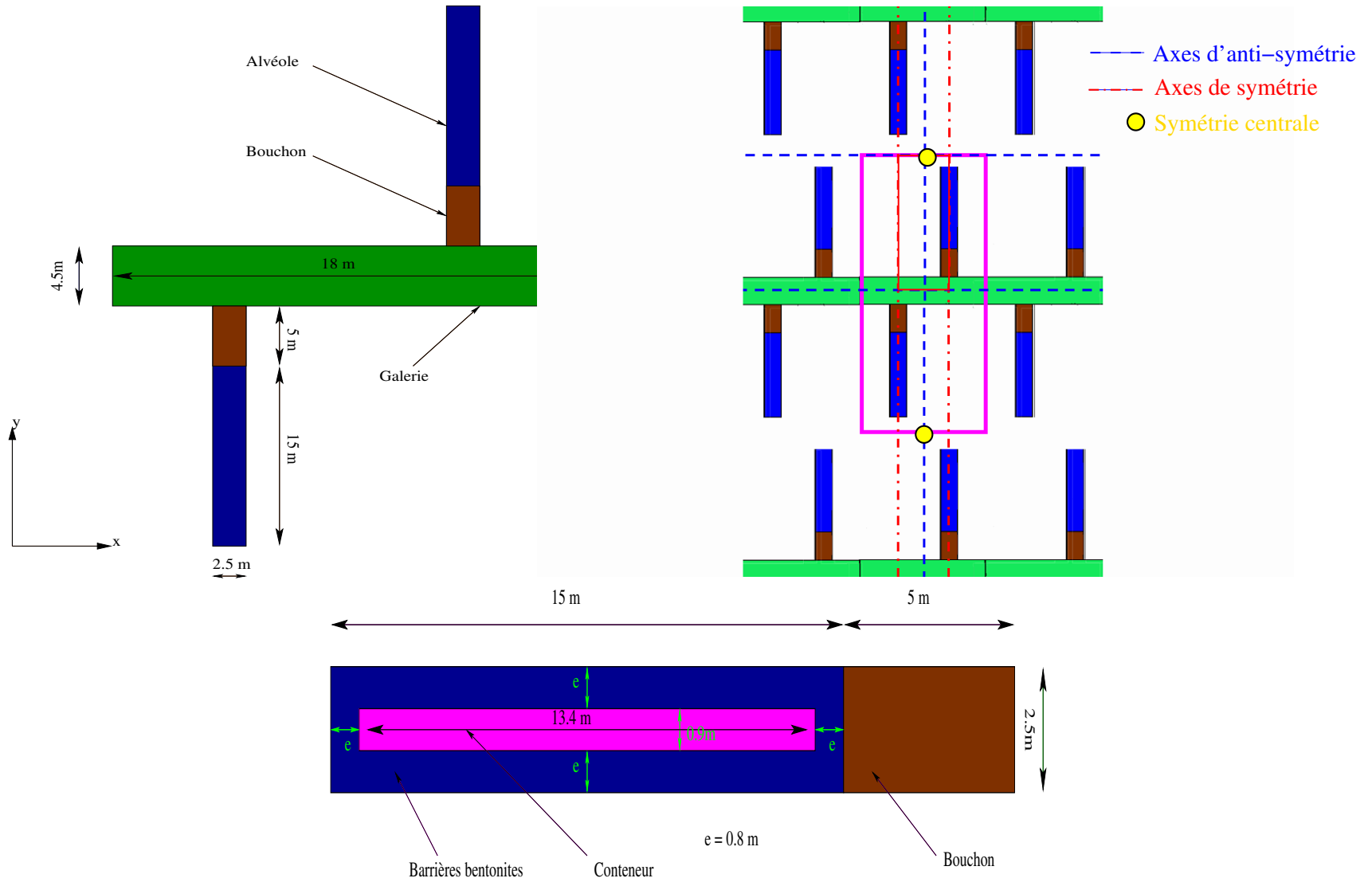
Couplex 3: consiste à coupler en 2D Couplex 2 et Couplex 1.

Principales difficultés

- ▷ Domaine hétérogène avec des forts contrastes de paramètres (10^6).
- ▷ Géométrie très contrastée ($L_x = 25000, L_z = 695$).
- ▷ Adsorption et précipitation/dissolution non linéaires.
- ▷ Conditions aux limites de type Fourier.
- ▷ Filiation radioactive (10 systèmes sont couplés).
- ▷ Les temps de simulation sont longs (10^7 années) avec une très grande précision de calcul ($< 10^{-8}$).
- ▷ Changement d'échelle 3D–2D.

Couplex 2

Cellule élémentaire



Résolution de l'hydrodynamique

Modèle classique pour l'écoulement.

$$u = -K\nabla H \quad \nabla \cdot u = 0$$

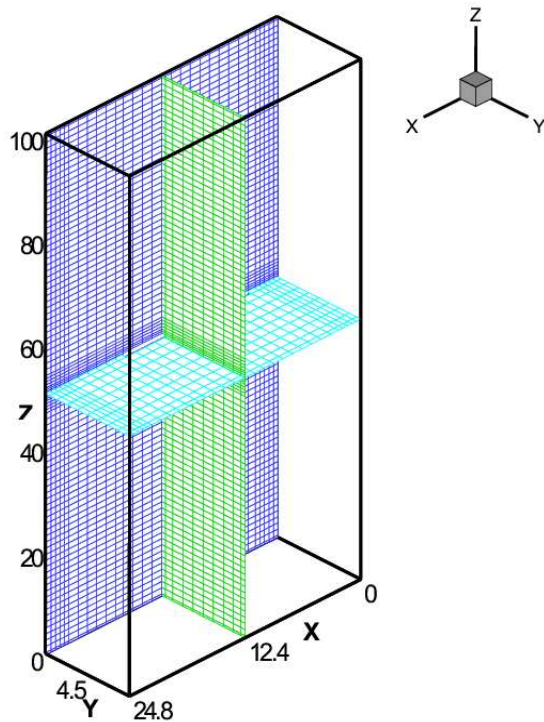
avec,

- Conditions aux limites de type Dirichlet sur les deux plans horizontaux.
- Conditions aux limites périodiques sur les quatre plans verticaux.
- Les conteneurs en verre sont considérés comme des zones imperméables.

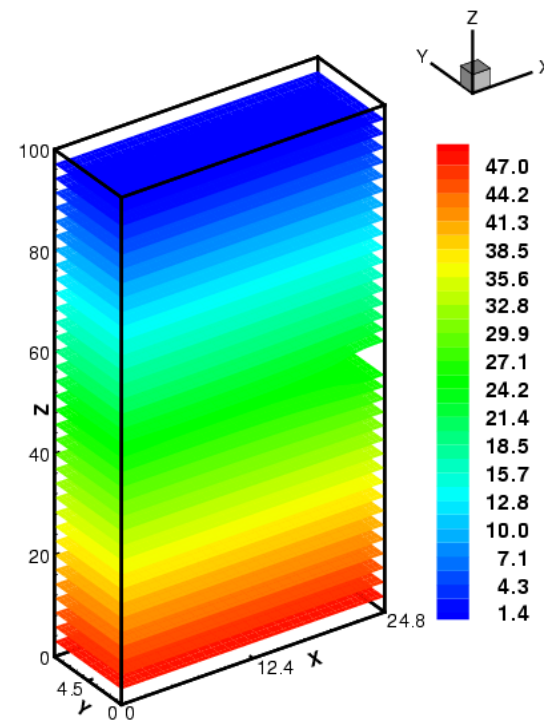
Résolution de l'hydrodynamique

Modèle classique pour l'écoulement.

$$u = -K \nabla H \quad \nabla \cdot u = 0$$



Discretisation régulière

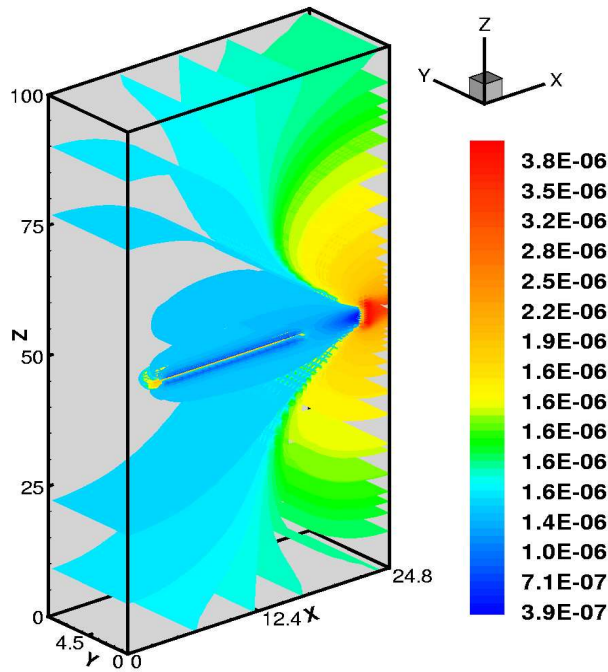


Distribution des charges

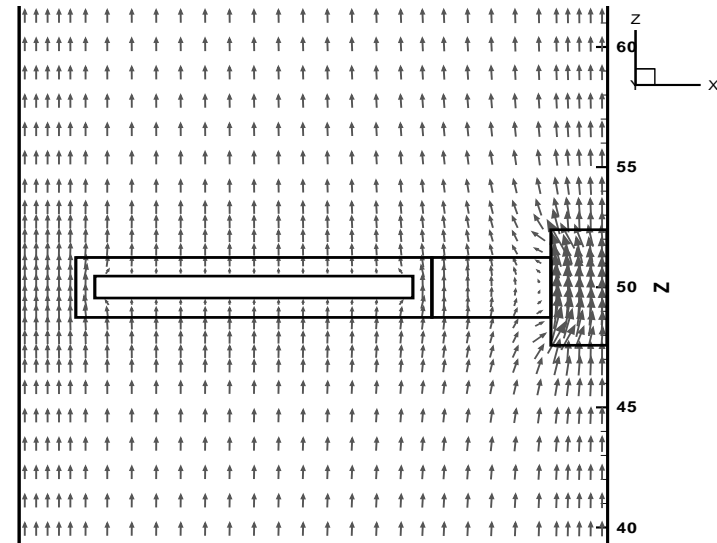
Résolution de l'hydrodynamique

Modèle classique pour l'écoulement.

$$u = -K \nabla H \quad \nabla \cdot u = 0$$



Norme de la vitesse



Vitesse autour du dépôt

Transport de la Silice

Le transport de la Silice est décrit par

$$\phi R_s \frac{\partial C_s}{\partial t} + L(C_s) = \rho_p \frac{\nu_p}{\lambda_p} \left(1 - \frac{C_s}{S_p} \right)$$

avec $R_s = 1 + \rho_{sol} \frac{(1-\phi)}{\phi} K_{ds}$.

Deux modèles sont proposés pour la dissolution des verres (les contenueurs).

Transport de la Silice

Le transport de la Silice est décrit par

$$\phi R_s \frac{\partial C_s}{\partial t} + L(C_s) = \rho_p \frac{\nu_p}{\lambda_p} \left(1 - \frac{C_s}{S_p} \right)$$

avec $R_s = 1 + \rho_{sol} \frac{(1-\phi)}{\phi} K_{ds}$.

Deux modèles sont proposés pour la dissolution des verres (les conteneurs).

M1. modèle complet avec des C.A.L de type Fourier à l'interface verre-bentonite:

$$-(D_s \nabla C_s) \cdot n = \rho_m \nu_m \left(1 - \frac{C_s}{S_m} \right)$$

Transport de la Silice

Le transport de la Silice est décrit par

$$\phi R_s \frac{\partial C_s}{\partial t} + L(C_s) = \rho_p \frac{\nu_p}{\lambda_p} \left(1 - \frac{C_s}{S_p} \right)$$

avec $R_s = 1 + \rho_{sol} \frac{(1-\phi)}{\phi} K_{ds}$.

Deux modèles sont proposés pour la dissolution des verres (les conteneurs).

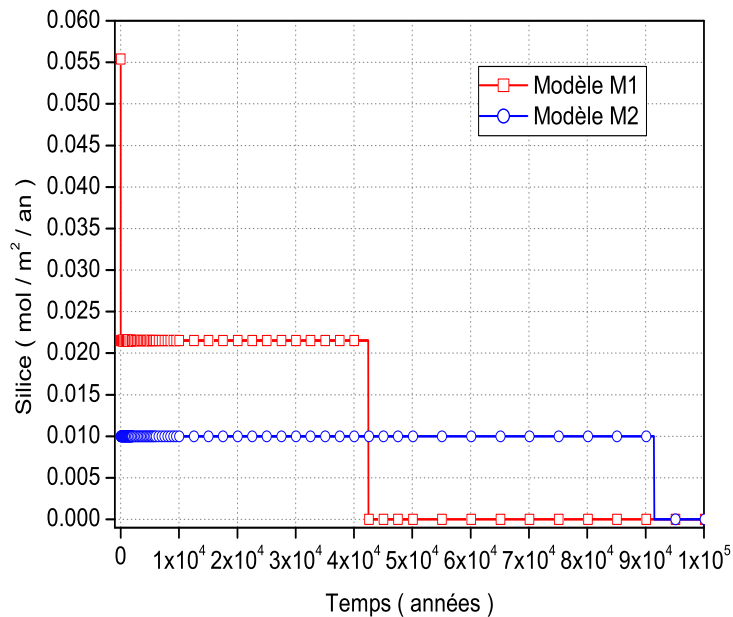
M1. modèle complet avec des C.A.L de type Fourier à l'interface verre-bentonite:

$$-(D_s \nabla C_s) \cdot n = \rho_m \nu_m \left(1 - \frac{C_s}{S_m} \right)$$

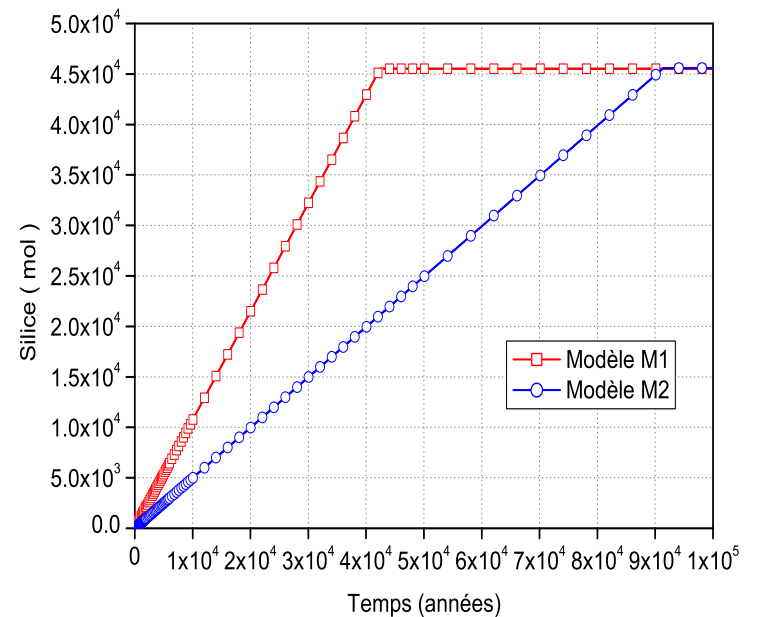
M2. modèle simplifié suppose un flux constant.

$$-(D_s \nabla C_s) \cdot n = \tau$$

Dissolution des verres



Dissolution des verres



Masse cumulée de Silice dissoute

Transport du Césium

L'équation de transport est donnée par

$$\phi \frac{\partial(R_0 C_0)}{\partial t} + L_0(C_0) + \phi R_0 \lambda_0 C_0 = 0$$

avec $R_0 = 1 + \rho_{sol} \frac{(1 - \phi)}{\phi} K_{d0}$, $K_{d0} = \frac{\kappa CEC}{1 + \kappa C_0}$.

et les C.A.L de type Fourier $(D_s \nabla C_k) \cdot n = \frac{N_k(t)}{N_s^0} [(D_s \nabla C_s) \cdot n]$

Transport du Césium

L'équation de transport est donnée par

$$\phi \frac{\partial(R_0 C_0)}{\partial t} + L_0(C_0) + \phi R_0 \lambda_0 C_0 = 0$$

Linéarisation par la méthode de Picard

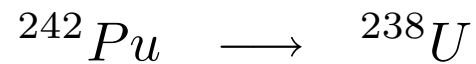
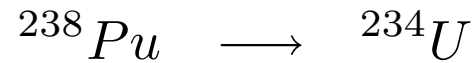
$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \left(\frac{R_{0,adv}^{n+1,k} C_{0,adv}^{n+1,k+1} - R_{0,adv}^{n,k} C_{0,adv}^{n,k}}{\Delta t} \right) = A(t_n, C_0^{n,k}) \\ C_{0,dis}^{n,k} = C_{0,adv}^{n+1,k+1} \\ \phi \left(\frac{R_0^{n+1,k} C_0^{n+1,k+1} - R_{0,dis}^{n,k} C_{0,dis}^{n,k}}{\Delta t} \right) = B(t_n, C_0^{n+1,k+1}) \end{array} \right.$$

avec $A(t, C_0) = -\nabla \cdot (u C_0)$ et

$B(t, C_0) = \nabla \cdot (D_0 \nabla C_0) - \phi R_0 \lambda_0 C_0$, $R_0^n = R(C_0^n)$.

Transport du Plutonium et de l'Uranium

Deux chaînes de filiation sont considérées :



Transport du Plutonium et de l'Uranium

Pour $k = 1$ et $k = 2$ (Plutonium):

$$\begin{aligned}\phi R_k \frac{\partial C_k}{\partial t} + L_k(C_k) + \lambda_k R_k C_k &= \phi S_k, \\ \rho_{sol}(1 - \phi) \frac{\partial F_k}{\partial t} + \rho_{sol} \lambda_k (1 - \phi) F_k &= -\phi S_k.\end{aligned}$$

Pour $k = -1$ et $k = -2$ (Uranium):

$$\begin{aligned}\phi R_k \frac{\partial C_k}{\partial t} + L_k(C_k) + \lambda_k R_k C_k - \lambda_{-k} R_{-k} C_{-k} &= \phi S_k, \\ \rho_{sol}(1 - \phi) \frac{\partial F_k}{\partial t} + \rho_{sol} \lambda_k (1 - \phi) F_k - \rho_{sol} \lambda_{-k} (1 - \phi) F_{-k} &= -\phi S_k.\end{aligned}$$

Transport du Plutonium et de l'Uranium

Pour $k = 1$ et $k = 2$ (Plutonium):

$$\begin{aligned}\phi R_k \frac{\partial C_k}{\partial t} + L_k(C_k) + \lambda_k R_k C_k &= \phi S_k, \\ \rho_{sol}(1 - \phi) \frac{\partial F_k}{\partial t} + \rho_{sol} \lambda_k (1 - \phi) F_k &= -\phi S_k.\end{aligned}$$

Pour $k = -1$ et $k = -2$ (Uranium):

$$\begin{aligned}\phi R_k \frac{\partial C_k}{\partial t} + L_k(C_k) + \lambda_k R_k C_k - \lambda_{-k} R_{-k} C_{-k} &= \phi S_k, \\ \rho_{sol}(1 - \phi) \frac{\partial F_k}{\partial t} + \rho_{sol} \lambda_k (1 - \phi) F_k - \rho_{sol} \lambda_{-k} (1 - \phi) F_{-k} &= -\phi S_k.\end{aligned}$$

$$S_k = \begin{cases} 0 & \text{si } C_k \leq C_k^{sat} \text{ et } F_k = 0, \\ \sigma(C_k^{sat} - C_k) & \text{si } C_k > C_k^{sat}. \end{cases}$$

Transport du Plutonium et de l'Uranium

Pour $k = 1$ et $k = 2$ (Plutonium):

$$\begin{aligned} \phi R_k \frac{\partial C_k}{\partial t} + L_k(C_k) + \lambda_k R_k C_k &= \phi S_k, \\ \rho_{sol}(1 - \phi) \frac{\partial F_k}{\partial t} + \rho_{sol} \lambda_k (1 - \phi) F_k &= -\phi S_k. \end{aligned}$$

Pour $k = -1$ et $k = -2$ (Uranium):

$$\begin{aligned} \phi R_k \frac{\partial C_k}{\partial t} + L_k(C_k) + \lambda_k R_k C_k - \lambda_{-k} R_{-k} C_{-k} &= \phi S_k, \\ \rho_{sol}(1 - \phi) \frac{\partial F_k}{\partial t} + \rho_{sol} \lambda_k (1 - \phi) F_k - \rho_{sol} \lambda_{-k} (1 - \phi) F_{-k} &= -\phi S_k. \end{aligned}$$

$$S_k = \begin{cases} 0 & \text{si } C_k \leq C_k^{sat} \text{ et } F_k = 0, \\ \sigma(C_k^{sat} - C_k) & \text{si } C_k > C_k^{sat}. \end{cases}$$

$$C_k^{sat} = C_{e(k)}^{sat} \frac{\phi R_k C_k + \rho_{sol}(1 - \phi) F_k}{\sum_{|k'|=1,2} \left(\phi R_{k'} C_{k'} + \rho_{sol}(1 - \phi) F_{k'} \right)}$$

Technique de la résolution

Couplage entre les méthodes de **Picard** et de **Newton-Raphson**

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta F_k^m = - \left(\frac{\rho_{sol} \phi R_k}{\Delta t} + \frac{\partial A_k^{n+1,m}}{\partial F_k^{n+1,m}} + \frac{\partial S_k^{n+1,m}}{\partial F_k^{n+1,m}} \right)^{-1} \mathcal{R}(F_k^{n+1,m}) \\ F_k^{n+1,m+1} = F_k^{n+1,m} + \Delta F_k^m \\ \phi R_k \left(\frac{C_k^{n+1,m+1} - C_k^n}{\partial t} \right) + B_k(C_k^{n+1,m}, C_{-k}^{n+1}) \\ \qquad \qquad \qquad = \phi S_k(C_k^{n+1,m}, C_{-k}^{n+1}, F_k^{n+1,m+1}, F_{-k}^{n+1}) \end{array} \right.$$

Détail 

Technique de la résolution

Couplage entre les méthodes de **Picard** et de **Newton-Raphson**

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta F_k^m = - \left(\frac{\rho_{sol} \phi R_k}{\Delta t} + \frac{\partial A_k^{n+1,m}}{\partial F_k^{n+1,m}} + \frac{\partial S_k^{n+1,m}}{\partial F_k^{n+1,m}} \right)^{-1} \mathcal{R}(F_k^{n+1,m}) \\ F_k^{n+1,m+1} = F_k^{n+1,m} + \Delta F_k^m \\ \phi R_k \left(\frac{C_k^{n+1,m+1} - C_k^n}{\partial t} \right) + B_k(C_k^{n+1,m}, C_{-k}^{n+1}) \\ \qquad \qquad \qquad = \phi S_k(C_k^{n+1,m}, C_{-k}^{n+1}, F_k^{n+1,m+1}, F_{-k}^{n+1}) \end{array} \right.$$

Détail 

Critère de convergence :

$$\left\{ \begin{array}{l} \|C_k^{n+1,m+1} - C_k^{n+1,m}\|_2 < \epsilon_a + \epsilon_b \|C_k^{n+1,m+1}\|_2 \\ \|F_k^{n+1,m+1} - F_k^{n+1,m}\|_2 < \epsilon'_a + \epsilon'_b \|F_k^{n+1,m+1}\|_2 \end{array} \right.$$

Technique de la résolution

Couplage entre les méthodes de **Picard** et de **Newton-Raphson**

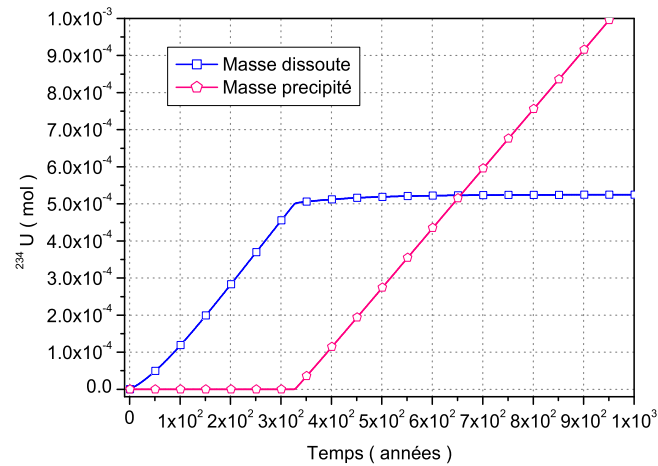
$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta F_k^m = - \left(\frac{\rho_{sol} \phi R_k}{\Delta t} + \frac{\partial A_k^{n+1,m}}{\partial F_k^{n+1,m}} + \frac{\partial S_k^{n+1,m}}{\partial F_k^{n+1,m}} \right)^{-1} \mathcal{R}(F_k^{n+1,m}) \\ F_k^{n+1,m+1} = F_k^{n+1,m} + \Delta F_k^m \\ \phi R_k \left(\frac{C_k^{n+1,m+1} - C_k^n}{\partial t} \right) + B_k(C_k^{n+1,m}, C_{-k}^{n+1}) \\ \qquad \qquad \qquad = \phi S_k(C_k^{n+1,m}, C_{-k}^{n+1}, F_k^{n+1,m+1}, F_{-k}^{n+1}) \end{array} \right.$$

Détail 

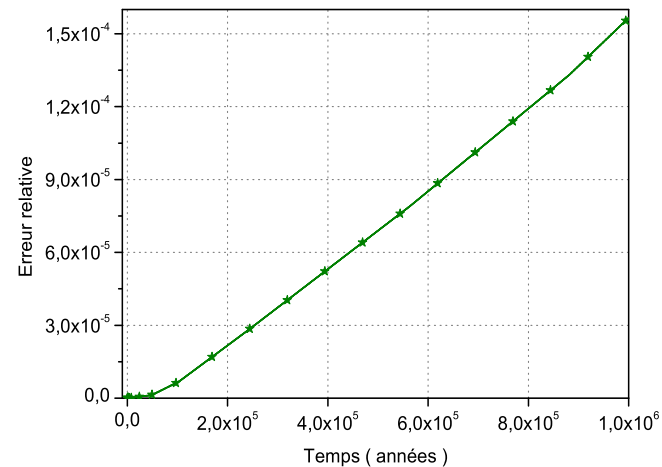
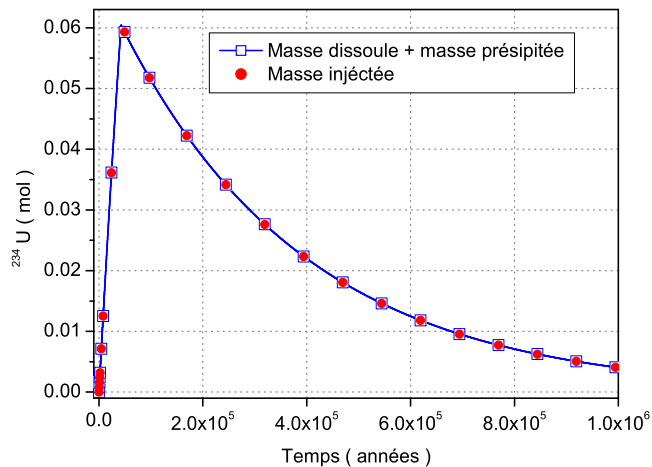
Pas de temps :

$$\Delta t^{n+1} = \begin{cases} (1 + \varepsilon) \Delta t^n & \text{pour } m < n_1 \\ \Delta t^n & \text{pour } n_1 \leq m \leq n_2 \\ (1 - \varepsilon) \Delta t^n & \text{pour } m > n_2 \end{cases}$$

Résultats numériques



Masse dissoute et masse précipitée après 10^3 années.

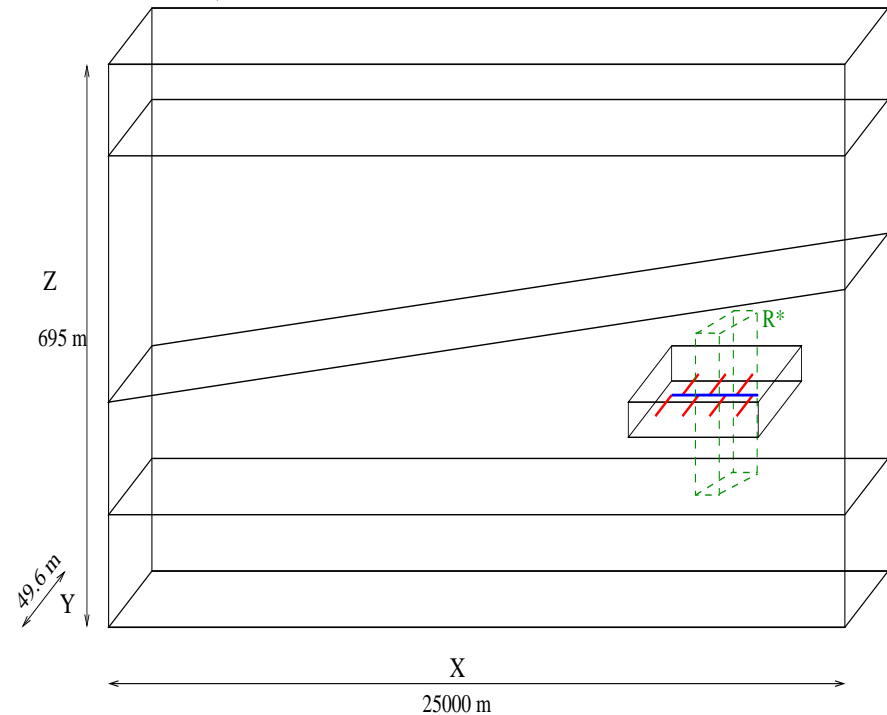
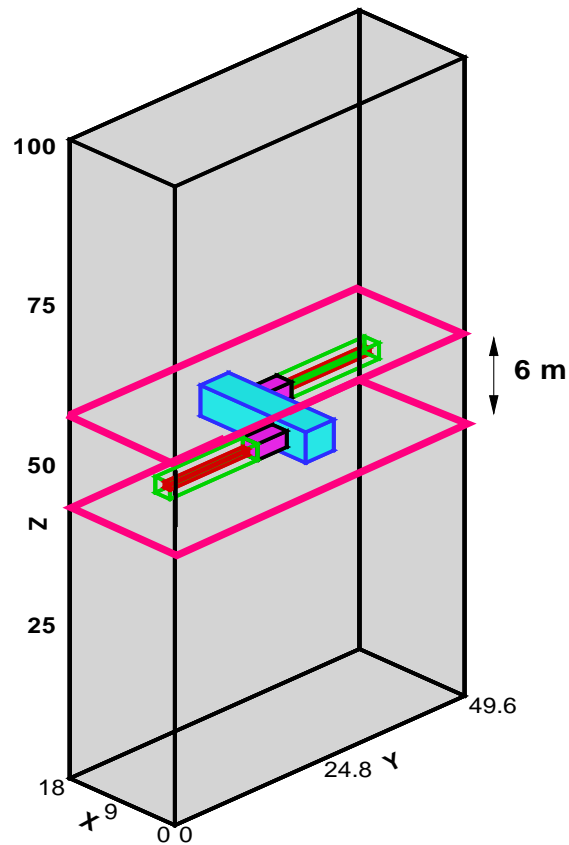


Bilan de masse global dans le domaine, la masse injectée, la masse transportée et la masse précipitée.

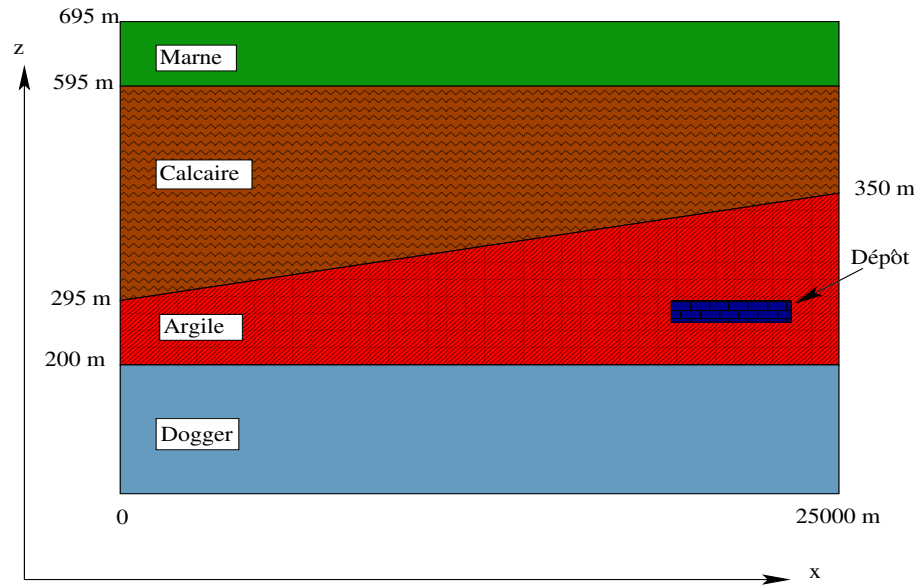
Couplex 3

Résolution de Couplex 3

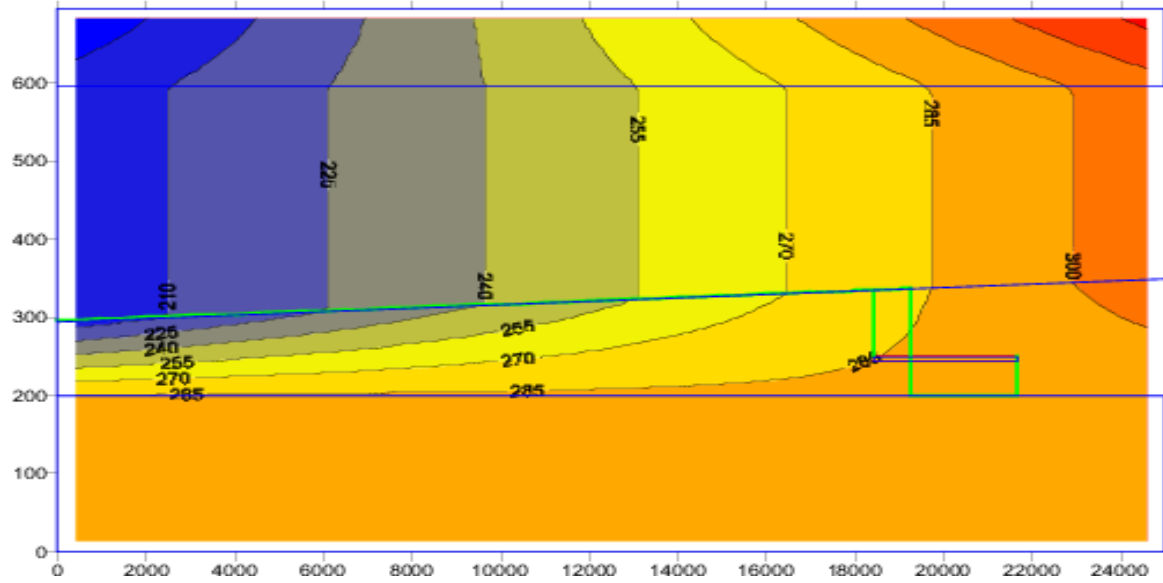
Le but est d'utiliser les résultats obtenus par Couplex 2 pour décrire le comportement des polluants à l'échelle globale (Couplex 1).



Ecoulement et transport



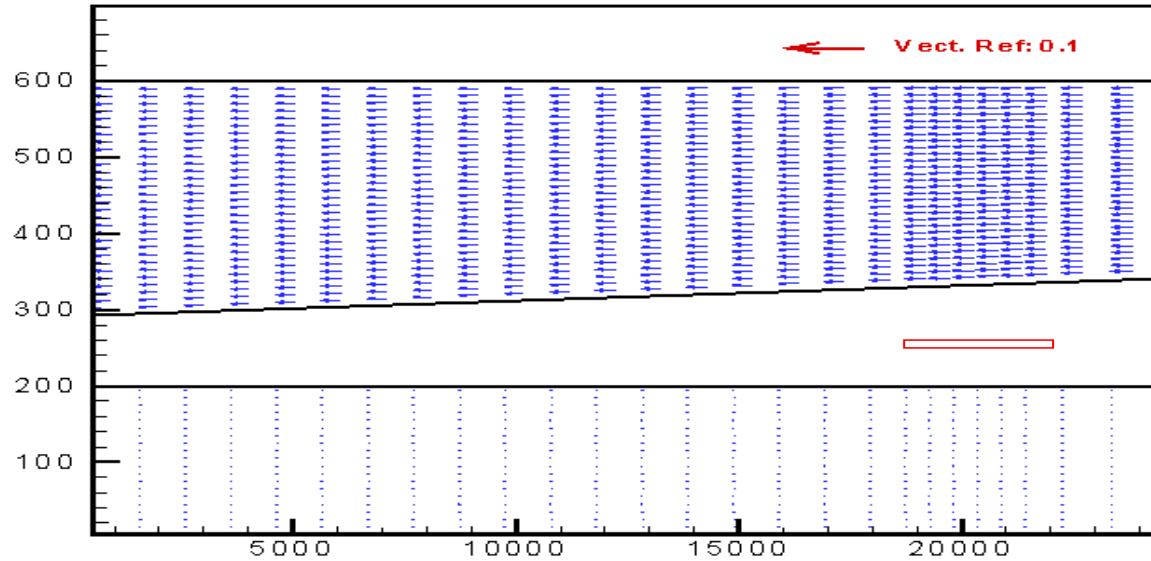
Domaine



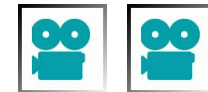
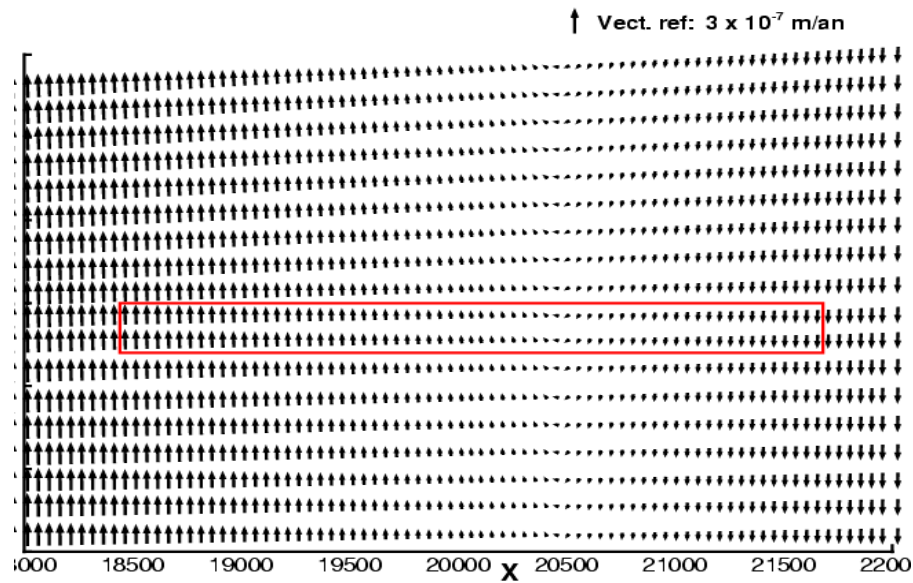
Charges

Ecoulement et transport

Vitesse



Vitesse



Conclusion générale et perspectives

- Résolution de l'équation de diffusion par les EFM et EFMH.
 - ? Positivité des méthodes mixtes dans le cas des maillages non structurés avec la présence de tenseur de conductivité hydraulique non diagonal.
 - ? Résolution des systèmes symétriques indéfinis obtenus par les EFM.

Conclusion générale et perspectives

- Résolution de l'équation de diffusion par les EFM et EFMH.
 - ? Positivité des méthodes mixtes dans le cas des maillages non structurés avec la présence de tenseur de conductivité hydraulique non diagonal.
 - ? Résolution des systèmes symétriques indéfinis obtenus par les EFM.
- Résolution de l'équation de convection par les EFD.
 - ? Extension du limiteur de pentes pour des maillages tridimensionnels non structurés.

Conclusion générale et perspectives

- Résolution de l'équation de diffusion par les EFM et EFMH.
 - ? Positivité des méthodes mixtes dans le cas des maillages non structurés avec la présence de tenseur de conductivité hydraulique non diagonal.
 - ? Résolution des systèmes symétriques indéfinis obtenus par les EFM.
- Résolution de l'équation de convection par les EFD.
 - ? Extension du limiteur de pentes pour des maillages tridimensionnels non structurés.
- Couplex cas tests.
 - ? Modèle de couplage Couplex 2 et Couplex 3.
 - ? Sensibilité des paramètres utilisés, stabilité des codes de

MERCI

Picard et Newton-Raphson

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(F_k^{n+1,m}) &= \rho_{sol}(1 - \phi)R_k \left(\frac{F_k^{n+1,m} - F_k^n}{\partial t} \right) + A_k(F_k^{n+1,m}, F_{-k}^{n+1}) \\ &+ \phi S_k \left(C_k^{n+1,m}, C_{-k}^{n+1}, F_k^{n+1,m}, F_{-k}^{n+1} \right) \end{aligned}$$

Soit,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{R}(F_k^{n+1,m})}{\partial F_k^{n+1,m}} \Delta F_k^m &= -\mathcal{R}(F_k^{n+1,m}) \\ \left(\frac{\rho_{sol}\phi R_k}{\Delta t} + \frac{\partial A_k^{n+1,m}}{\partial F_k^{n+1,m}} + \frac{\partial S_k^{n+1,m}}{\partial F_k^{n+1,m}} \right) \Delta F_k^m &= -\mathcal{R}(F_k^{n+1,m}) \end{aligned}$$

où

$$\frac{\partial A_k^{n+1,m}}{\partial F_k^{n+1,m}} = \frac{\partial A_k \left(F_k^{n+1,m}, F_{-k}^{n+1} \right)}{\partial F_k^{n+1,m}} = \rho_{sol}(1 - \phi)\lambda_k$$

$$\frac{\partial S_k^{n+1,m}}{\partial F_k^{n+1,m}} = \sigma C_{e(k)}^{sat} \frac{\rho_{sol}(1 - \phi)}{\left(\sum_{|k'|=1,2} \phi R_{k'} C_{k'}^{n+1,m} + \rho_{sol}(1 - \phi) F_{k'}^{n+1,m} \right)^2}$$

 Retour

Méthode de Picard

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \rho_{sol}(1 - \phi)R_k \left(\frac{F_k^{n+1,m+1} - F_k^n}{\partial t} \right) + A_k(F_k^{n+1,m}, F_{-k}^{n+1}) \\
 = -\phi S_k(C_k^{n+1,m+1}, C_{-k}^{n+1}, F_k^{n+1,m}, F_{-k}^{n+1}) \\
 \\
 \phi R_k \left(\frac{C_k^{n+1,m+1} - C_k^n}{\partial t} \right) + B_k(C_k^{n+1,m}, C_{-k}^{n+1}) \\
 = \phi S_k(C_k^{n+1,m}, C_{-k}^{n+1}, F_k^{n+1,m+1}, F_{-k}^{n+1})
 \end{array} \right.$$

Résidus de C_k et F_k  Retour