

Sujet de stage : Approches variationnelles pour la simulation numérique des phénomènes de réaction-diffusion

Laboratoire d'accueil : GeM (encadrement joint avec l'IRSN, mais stage hébergé au GeM)

Encadrants : Stainier Laurent, Heuzé Thomas / Jelea Andreï, Perales Frédéric, Martin Jimmy (IRSN)

Profil recherché : mathématiques appliquées, modélisation et simulation

Résumé du sujet proposé :

De nombreux phénomènes physiques, en lien avec les enjeux de sûreté des installations nucléaires, impliquent des phénomènes de transport complexes et couplés. Parmi ceux étudiés au GeM et à l'IRSN, on peut citer les pathologies pouvant se développer dans des structures massives en béton telles que les enceintes de confinement de réacteurs nucléaires. Parmi ces pathologies, les Réactions Sulfatiques Internes (ou « RSI ») sont engendrées par le transport en milieu aqueux d'espèces chimiques réactives ( $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{OH}^-$ ,  $\text{Al}(\text{OH})_4^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ , ...), au sein du béton qui est un matériau poreux discontinu. La précipitation de certains minéraux tels que l'ettringite engendre des gonflements importants, conduisant à de forts gradients de contraintes locaux [1]. A leurs tours, ces gradients de contraintes induisent le transport des espèces, à l'instar du gradient de concentration. Le traitement des multiples couplages entre les différents moteurs du transport d'espèces (gradients de concentration et de contrainte) reste à l'heure actuelle un problème ouvert et les outils simulant rigoureusement ces derniers sont toujours à l'étude [2].

Des formulations variationnelles de la diffusion et des couplages mécanique-diffusion ont été développées au GeM ces dernières années [3]. Ces formulations sont basées sur le champ de potentiel chimique et son gradient, la concentration étant traitée comme une variable interne. Cette réécriture permet d'obtenir des modèles numériques plus robustes, tout en traitant naturellement les différents couplages (via le potentiel chimique).

L'objectif de ce stage de master est d'appliquer ce formalisme variationnel à des problèmes de réaction-diffusion de référence, issus de la littérature et des cas-tests de référence de l'IRSN [4]-[6]. On s'intéressera dans un premier temps à des cas de diffusion à une seule espèce, puis dans un second temps à des cas multi-espèces, avec des réactions entre ces espèces. Les couplages avec la mécanique ne seront a priori pas traités dans ce stage, mais les travaux ont vocation à être poursuivis dans le cadre d'une thèse de doctorat co-encadrée par le GeM et l'IRSN, à partir de l'automne 2024.

On notera finalement que le sujet de la modélisation numérique des couplages diffusion-réaction-mécanique dépasse largement le cadre des bétons dans les réacteurs nucléaires, avec de nombreuses applications dans les dispositifs de stockage d'énergie (batteries), la géomécanique (stockage de  $\text{CO}_2$  p.e.), ou encore dans les matériaux biologiques.

Bibliographie

1. A. Socié, Modélisation chimio-mécanique de la fissuration de matériaux cimentaires : vieillissement et tenue des enceintes de confinement des centrales nucléaires, Thèse de doctorat, Université de Montpellier, 2020.
2. Association Française de Mécanique (2015) « Livre blanc de la recherche en mécanique – enjeux industriels et sociétaux, recherche, innovation, formation », ISBN 978-2-7598-1683-5, EDP Sciences

3. Anda Salazar, J., Heuzé, T. & Stainier, L. Multifield variational formulations of diffusion initial boundary value problems. *Continuum Mech. Thermodyn.* 33, 563–589 (2021)
4. Cussler, E. L. (2009) « Diffusion – Mass Transfer in Fluid Systems, Third Edition » Cambridge University Press
5. Byron Bird, R., Stewart, W. E., Lightfoot, E. N. (2007) « Transport Phenomena, Revised Second Edition », John Wiley & Sons, Inc.
6. Köhler, W. & Morozov, K., The Soret Effect in Liquid Mixtures, A Review. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics* 41. 151-197 (2016)

## Contacts

### GeM

- Prof. Laurent Stainier : [laurent.stainier@ec-nantes.fr](mailto:laurent.stainier@ec-nantes.fr)
- Thomas Heuzé : [thomas.heuze@ec-nantes.fr](mailto:thomas.heuze@ec-nantes.fr)

### IRSN

- Frédéric Perales : [frederic.perales@irsn.fr](mailto:frederic.perales@irsn.fr)
- Andrei Jelea : [andrei.jelea@irsn.fr](mailto:andrei.jelea@irsn.fr)
- Jimmy Martin : [jimmy.martin@irsn.fr](mailto:jimmy.martin@irsn.fr)