

Un modèle de corrosion à deux espèces

F. Raimondi, C. CANCÈS, C. CHAINAIS-HILLAIRET, B. MERLET

CNRS - Université de Lille - Inria, Inria, Université de Lille - Inria, Université de Lille - Inria

Email : federica.raimondi@inria.fr

Mots Clés : Modélisation Mathématique, Analyse des EDP

Biographie – J’ai effectué une thèse de doctorat en Mathématiques en cotutelle entre l’Université de Rouen Normandie et l’Università degli Studi della Campania Luigi Vanvitelli (Italie). Elle porte sur l’existence de solutions faibles de problèmes elliptiques non linéaires singuliers ainsi que sur des résultats d’homogénéisation et correcteurs. Je suis actuellement post-doctorante CNRS, affectée à l’Université de Lille et au centre Inria. Je travaille sur la modélisation variationnelle de la corrosion d’acier dans le contexte du stockage des déchets nucléaires.

Resumé :

Dans cette exposé je présente un travail en collaboration avec Clément Cancès, Claire Chainais-Hillairet et Benoit Merlet. Il s’agit de la modélisation mathématique de l’évolution d’une couche d’oxyde à l’interface d’un échantillon métallique et d’un milieu aqueux. Le projet s’inscrit dans la modélisation et simulation du dispositif de stockage des déchets radioactifs, dans le cadre du projet EURAD H2020.

Dans [1] Christian Bataillon et al. ont proposé un modèle DPCM (Diffusion Poisson Coupled Model) pour décrire le processus de corrosion qui se produit à la surface des conteneurs en acier au carbone qui sont en contact avec une formation argileuse. Le modèle en question se concentre sur le développement d’une couche d’oxyde dense dans la région de contact entre le métal et l’argile. Le système formé par la couche, le métal et la solution implique l’échange et le transport de plusieurs espèces : les électrons, les cations ferriques et les lacunes d’oxygène. Ce modèle conduit à un système d’équations de dérive-diffusion pour le transport de porteurs de charge et une équation de Poisson pour le potentiel électrostatique, posé dans un domaine à frontières mobiles. Jusqu’à présent, certaines méthodes numériques ont été proposées pour le modèle, néanmoins aucun résultat d’existence n’a été établi. Nous nous proposons d’obtenir une nouvelle formulation du modèle DPCM complet en appliquant des techniques de modélisation variationnelle. Dans ce but nous avons commencé par l’étude du modèle dans le cas simplifié de deux espèces. On ne prend en compte que les échanges des électrons et des cations ferriques avec le métal et la solution aqueuse environnante ; par conséquent le système se révèle être posé dans un domaine fixe. Notre premier objectif a été d’établir un modèle thermodynamiquement cohérent. Pour ce faire, on a d’abord introduit le potentiel chimique et le potentiel électrochimique pour chaque espèce. En raison de la relation d’Onsager, le courant de densité de chaque espèce est proportionnel au gradient de son potentiel électrochimique, avec un facteur de proportionnalité dépendant de la densité de l’espèce. Puis, quelques modifications sur les conditions aux limites ont été nécessaires pour garder la compatibilité avec celles du modèle original. Ensuite, on s’est dédié à la démonstration d’un résultat d’existence d’au moins une solution faible de ce problème simplifié en adaptant à nos besoins certaines techniques de [2]. En coupant convenablement toutes les non-linéarités du problème de départ à un certain niveau, on a obtenu un problème régularisé. Sa solvabilité est prouvée par l’investigation des systèmes qui résultent du problème régularisé par une discrétisation en temps. Enfin, on a établi des estimations indépendantes de ce niveau en utilisant la technique des itérations de Moser, voir [3]. En conséquence, une solution du problème régularisé sera une solution du problème de départ si le niveau de coupure est choisi suffisamment grand.

Références

- [1] C. Bataillon, F. Bouchon, C. Chainais-Hillairet, C. Desgranges, E. Hoarau, F. Martin, S. Perin, M. Tupin, and J. Talandier. Corrosion Modelling of Iron Based Alloy in Nuclear Waste Repository. *Electrochimica Acta*, 55(15):4451–4467, 2010.
- [2] H. Gajewski and K. Gröger. Reaction—Diffusion Processes of Electrically Charged Species. *Mathematische Nachrichten*, 177(1):109–130, 1996.
- [3] J. Moser. A New Proof of De Giorgi’s Theorem Concerning the Regularity Problem for Elliptic Differential Equations. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 13(3):457–468, 1960.