Etude de la convergence d'un schéma volumes finis pour un modèle de corrosion.

Pierre-Louis COLIN, Université Lille 1

Le modèle DPCM (Diffusion Poisson Coupled Model), introduit par Bataillon *et al.* dans [1], est un modèle de corrosion d'acier dans des conditions de stockage en grande profondeur. Il décrit l'évolution d'une couche d'oxyde de fer formée à la surface de "capsule"d'acier contenant des déchets radioactifs lors de leur stockage dans des couches d'argile saturées en eau. Il s'agit d'un modèle de type dérive-diffusion. Les conditions aux limites résultent de la cinétique chimique des réactions qui ont lieu aux interfaces. D'un point de vue mathématique, ce sont des conditions aux limites de Robin. De plus, le modèle complet est un problème à frontière libre car il décrit l'évolution temporelle de la couche d'oxyde.

Dans cette communication, nous nous concentrerons sur un modèle simplifié à deux espèces: les électrons, de densité N, et les cations Fe^{3+}, de densité P, sur un domaine fixe. Le potentiel électrique est noté Ψ. Le système d'équations adimensionné est le suivant:

$$\left\{\begin{array}{l} \partial_t P + \partial_x J_P = 0, \qquad J_P = -\partial_x P - 3P\partial_x\Psi, \quad \text{sur } (0,1), \\ \varepsilon\partial_t N + \partial_x J_N = 0, \qquad J_P = -\partial_x N + N\partial_x\Psi, \quad \text{sur } (0,1), \\ -\lambda^2\partial^2_{xx}\Psi = 3P - N + \rho_{hl}, \quad \text{sur } (0,1). \end{array}\right.$$

Les conditions aux limites sur Ψ sont de la forme:

$$\Psi - \alpha_0\partial_x\Psi = \Delta\Psi_0^{pzc}, \text{ en } x=0 \text{ et } \Psi + \alpha_1\partial_x\Psi = V - \Delta\Psi_1^{pzc}, \text{ en } x=1.$$

Les conditions aux limites sur N sont:

$$\begin{array}{l} -J_N = \beta_N^0(\Psi)N - \gamma_N^0(\Psi), \quad \text{en } x=0, \\ J_N = \beta_N^1(V-\Psi)N - \gamma_N^1(V-\Psi), \quad \text{en } x=1, \end{array}$$

et celles sur P ont une forme similaire (les fonctions $\beta_N^{0,1}$ et $\gamma_N^{0,1}$ sont des fonctions non-linéaires données). Nous considérons un schéma numérique introduit dans [2]. C'est un schéma de type Euler implicite en temps et volumes finis en espace avec des flux numériques de Scharfetter-Gummel. La démonstration de la convergence suit des étapes classiques [3, 4]: obtention d'estimations a priori, démonstration de la compacité des suites de solutions approchées, passage à la limite dans le schéma. La difficulté majeure dans le cas du modèle de corrosion vient du traitement des conditions aux limites couplées.

Références

[1] C. Bataillon, F. Bouchon, C. Chainais-Hillairet, C. Desgranges, E. Hoarau, F. Martin, S. Perrin, M. Turpin and J. Talandier, *Corrosion modelling of iron based alloy in nuclear waste repository*, Electrochim. Acta, 55(15):4451–4467, 2010.

[2] C. Bataillon, F. Bouchon, C. Chainais-Hillairet, F. Furhmann, E. Hoarau and R. Touzani, *Numerical methods for the simulation of a corrosion model with moving oxide layer*, J. Comput. Phys., 231(18):6213–6231, 2012.

[3] T. Gallouet and J.-C. Latché, *Compactness of discrete approximate solutions to parabolic PDEs - application to a turbulence model*, Commun. Pure Appl. Anal., 11(6):2371–2391, 2012.

[4] R. Eymard, T. Gallouet and R. Herbin, *Finite volume methods*, in Handbook of Numerical Analysis, Vol. VII:713–1020, P.G. Ciarlet and J.L. Lions, North-Holland, Amsterdam, 2000.

Pierre-Louis COLIN, Université Lille 1, Laboratoire Paul Painlevé UMR CNRS 8524 - Cité scientifique, 59655 Villeneuve d'Ascq cedex, France
pierre-louis.colin@math.univ-lille1.fr