

## Analyse mathématique et résolution numérique de systèmes différentiels raides en modélisation biogéochimique

**Abbas EL HAJJ**, IFPEN - Rueil-Malmaison      **Guillaume DUJARDIN**, Inria - Lille  
**Christophe PREUX**, IFPEN - Rueil-Malmaison  
**Benjamin BRACONNIER**, IFPEN - Rueil-Malmaison  
**Quang-Huy TRAN**, IFPEN - Rueil-Malmaison  
**Iryna MALINOUSKAYA**, IFPEN - Rueil-Malmaison

Dans le cadre de la transition énergétique, l'activité microbienne joue un rôle clé en modifiant les conditions physiques et (géo)chimiques des milieux naturels et industriels. Sa prise en compte est essentielle pour de nombreuses applications, notamment la gestion des réservoirs souterrains (géothermie, stockage d'hydrogène, ...) et la dépollution des eaux. Pour cette raison, l'intégration de modèles biogéochimiques modélisant l'activité bactérienne dans les simulateurs d'écoulement en milieu poreux est nécessaire. Ces modèles prennent en compte des phénomènes tels que la consommation de substrats contribuant à la croissance des organismes et leur déclin par biodégradation. L'un des modèles numériques précurseurs dans ce domaine est UTCHEM [1].

Les modèles microbiens usuels [2] prennent la forme d'un système d'équations différentielles représentant la cinétique ou l'équilibre d'un ensemble de réactions chimiques, où certains 'constituants' sont des entités microscopiques (souches bactériennes, substrats) sensiblement plus grandes que des molécules. Ce système d'équations comprend des dynamiques multi-échelles induisant une forte raideur, et nécessite de maintenir la positivité des grandeurs physiques. Cette situation soulève des défis numériques majeurs ; la stabilité des solutions à long terme n'est pas garantie et préserver la positivité de concentrations impose d'utiliser des pas de temps réduits ce qui augmente significativement le coût de calcul. Il est donc nécessaire de réaliser une étude mathématique approfondie pour comprendre les difficultés intrinsèques, identifier les plages de fonctionnement problématiques et élaborer des méthodes numériques robustes. La finalité étant de coupler ce système d'activité microbienne à un modèle d'écoulement en milieu poreux, il est très important de disposer d'une méthode numérique robuste, et ce quelles que soient les valeurs des paramètres du système d'activité microbienne à résoudre. Pour ce travail, notre étude porte plus particulièrement sur des activités microbiennes qui ont lieu en exploitation de réservoirs souterrains, que ce soit pour le stockage du CO<sub>2</sub>, de l'H<sub>2</sub> ou en géothermie. Par exemple les bactéries dite BSR (Bactéries Sulfato Réductrices) qui peuvent engendrer une production de gaz H<sub>2</sub>S particulièrement dangereux pour les êtres vivants [2]. Dans ce cadre, nous comparons différentes approches numériques afin d'améliorer la robustesse et l'efficacité des solutions numériques. Nous évaluons notamment l'efficacité des schémas A-stables comme les méthodes de Radau, reconnus pour leur robustesse face aux systèmes raides, de même que des intégrateurs de Magnus [3], qui garantissent la positivité des solutions. Dans cette optique, ces méthodes sont comparées aux schémas explicites de Runge-Kutta afin d'analyser leur efficacité en fonction du degré de raideur du système étudié. Ce travail constitue donc une avancée vers une modélisation plus robuste et performante des processus biogéochimiques.

- [1] Peyman Hosseininoosheri. Further model development and application of UTCHEM for microbial enhanced oil recovery and reservoir souring. Master's thesis, 2016.
- [2] Lin Wu, Zheng-Meng Hou, Zhi-Feng Luo, Yan-Li Fang, Liang-Chao Huang, Xu-Ning Wu, Qian-Jun Chen, and Qi-Chen Wang. Impacts of microbial interactions on underground hydrogen storage in porous media : A comprehensive review of experimental, numerical, and field studies. 2024.
- [3] Sergio Blanes, Arieh Iserles, and Shev Macnamara. Positivity-preserving methods for ordinary differential equations. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, pages 1843–1870, 2022.