

Condition de convergence de l'algorithme de Newton pour un système de transport-réactif sous cinétique en milieu poreux saturé

Antonin COUVEZ, STMF - CEA Saclay

Nikos LETERRIER, STMF - CEA Saclay

Alexiane PLESSIER, STMF - CEA Saclay

Pascal OMNES, SGLS - CEA Saclay

Les équations du transport réactif, en milieu poreux saturé sous cinétique, forment un système d'équations algèbro-différentielles qui permettent de décrire l'évolution d'espèces chimiques en fonction de leur transport et des réactions chimiques [1]. Ces équations se présentent sous la forme :

$$\begin{cases} \partial_t[\phi \mathbf{C}_i] + \nabla \cdot [\mathbf{C}_i \vec{U}] = \nabla \cdot d_i \nabla \mathbf{C}_i + f_i(t, \mathbf{C}, \mathbf{R}), & (1) \\ \partial_t[(1 - \phi) \mathbf{R}_k] = g_k(t, \mathbf{C}, \mathbf{R}), & (2) \\ 1 - \phi = \sum_k \mathcal{V}_k \mathbf{R}_k, & (3) \end{cases}$$

où ϕ est la porosité, \mathbf{C}_i est la concentration de l'espèce liquide i , \mathbf{R}_k est la concentration de l'espèce solide d'indice k , \vec{U} est la vitesse du fluide, f_i et g_k sont les termes de production-destruction chimiques, et \mathcal{V}_k est le volume molaire de l'espèce solide d'indice s . La résolution numérique du système nécessite l'utilisation d'un intégrateur temporel implicite dû à la raideur du système. La recherche de la solution se fait alors grâce à l'utilisation d'un solveur non-linéaire. Les solveurs les plus couramment utilisés sont dérivés de l'algorithme de Newton. La convergence de l'algorithme dépend de la distance entre le point initial de l'algorithme et la solution du système discret. En diminuant le pas de temps, le point initial de la suite est plus proche de la solution et la suite de Newton a de meilleures chances de converger. La résolution du système peut s'avérer coûteuse si le pas de temps choisi est trop grand ou non optimal, s'il est trop petit. Dans le cas de la résolution du problème par l'algorithme de Newton, l'application du théorème de Newton-Kantorovitch, [2], à notre système nous a permis d'obtenir une condition suffisante sur le pas de temps pour assurer la convergence de l'algorithme. Ce pas de temps dépend alors des paramètres de la chimie et des caractéristiques des espèces chimiques. Il n'est pas optimal, mais permet d'obtenir une convergence directe, ce qui diminue le coût des résolutions.

Références

- [1] Nicolas Bouillard, *Développement de méthodes numériques pour le transport réactif*.
- [2] Jean-Pierre Dedieu, *Points Fixes, Zéros et la méthode de Newton*.