

Méthodes numériques pour le transport réactif

J. Erhel^{*}, M. Kern[†]

Le transport de solutés réactifs en milieu poreux est un problème difficile du point de vue numérique. Il faut d'une part coupler le modèle de transport et le modèle de chimie. D'autre part, il faut résoudre le problème de l'équilibre chimique, qui est un système d'équations algébriques.

Nous étudions d'abord la résolution des équations d'équilibre, sans prendre en compte les réactions de précipitation–dissolution. Nous montrons qu'une méthode de Newton avec recherche linéaire donne une méthode robuste.

Les réactions de précipitation–dissolution présentent une difficulté particulière de par leur caractère à seuil, donc non-différentiable. Nous proposons de les formuler comme un problème de complémentarité non-linéaire, et de résoudre ce problème par une méthode de points intérieurs, ce qui a l'avantage d'éviter l'approche combinatoire usuelle.

Nous examinons ensuite les méthodes classiques de couplage, en les réinterprétant à la lumière de l'analyse numérique, ce qui permet de suggérer des améliorations. Pour aller plus loin, et relâcher la contrainte pesant sur le pas de temps, il faut utiliser une (variante de la) méthode de Newton, en gardant à l'esprit qu'il n'est pas possible de former la matrice jacobienne du système couplé. Une solution possible est de résoudre le système linéaire à chaque itération par un solveur linéaire itératif, par exemple GMRES. Nous proposons deux méthodes de ce type, permettant de découpler les codes de transport et de chimie.

^{*}INRIA Rennes – IRISA, Campus de Beaulieu, 35000 Rennes, Jocelyne.Erhel@inria.fr

[†]INRIA Rocquencourt, BP 105, 78153 Le Chesnay Cedex, Michel.Kern@inria.fr