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

Antonin COUVEZ, LDEL - CEA Saclay
Nikos LETERRIER, LDEL - CEA Saclay
Alexiane PLESSIER, LTBC - CEA Saclay **Pascal OMNES**, LCAN - CEA Saclay

Les équations du transport réactif, en milieu poreux saturé sous cinétique, forment un système d'équations algébro-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 :

$$\begin{cases} \partial_t(\phi\,\mathbf{C}_i) + \nabla\cdot(\mathbf{C}_i\,\vec{U} - \phi\,d_i\nabla\mathbf{C}_i) + f_i(t,x,\mathbf{C},\mathbf{R}) = 0, \\ \partial_t((1-\phi)\mathbf{R}_k) - h_k(t,x,\mathbf{C},\mathbf{R}) = 0, \\ \phi + \sum \mathcal{V}_k\mathbf{R}_k - 1 = 0. \end{cases}$$

où ϕ est la porosité, $(\mathbf{C}_i)_i$ est le vecteur des concentrations des espèces liquides, $(\mathbf{R}_k)_k$ est le vecteur des concentrations des espèces solides, $\vec{U}$ 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.
La résolution du système discret repose sur l'emploi d'un solveur non linéaire, le plus souvent fondé sur une variante de l'algorithme de Newton. La convergence de cet algorithme dépend fortement de la distance entre l'itération initiale et la solution recherchée. En particulier, une diminution du pas de temps diminue généralement cette distance, augmentant ainsi les chances de convergence de la suite de Newton. Le choix du pas de temps résulte d'un compromis : un pas trop grand peut empêcher la convergence, tandis qu'un pas trop petit accroît inutilement le coût de calcul. Dans le cadre de la résolution par l'algorithme de Newton [2], l'application du théorème de Newton–Kantorovich à notre système a permis d'établir une condition suffisante sur le pas de temps garantissant la convergence de l'algorithme de Newton. Cette borne dépend des paramètres cinétiques ainsi que des propriétés des espèces chimiques considérées. Bien qu'elle ne soit pas optimale, elle permet d'assurer une convergence directe, et contribue ainsi à réduire le coût global de la résolution.

Références

[1] Nicolas Bouillard, *Développement de méthodes numériques pour le transport réactif.*

[2] Jean-Pierre Dedieu, *Points Fixes, Zéros et la méthode de Newton.*

Contact : antonin.couvez@cea.fr