



Université Lille Nord de France  
Pôle de Recherche  
et d'Enseignement Supérieur

## Ecole doctorale régionale Sciences Pour l'Ingénieur Lille Nord-de-France - 072



**Titre : Méthodes numériques avancées pour les problèmes à forte raideur en transport réactif**

**Directeur de thèse :** Clément Cancès  
**E-mail :** clement.cances@inria.fr

**Co-directeur de thèse :** Quang-Huy Tran  
**E-mail :** quang-huy.tran@ifpen.fr

**Laboratoire :** Laboratoire Paul Painlevé

**Equipe :** ANEDP

### **Descriptif :**

La simulation du transport réactif en milieu poreux est un enjeu majeur pour de nombreux projets IFPEN (stockage de CO<sub>2</sub>, combustion dans les moteurs et turbines à gaz ou encore design de réacteurs chimiques pour les procédés). Malheureusement, la performance des codes de transport réactif est aujourd'hui fortement limitée par les difficultés numériques liées à la modélisation chimique. Ces difficultés apparaissent sous des façades variées, mais toutes peuvent se rattacher à un problème de raideur des équations à résoudre.

En modélisation chimique, on distingue deux catégories de réactions : les réactions d'équilibre et les réactions cinétiques. Les réactions d'équilibre qui impliquent une phase minérale sont modélisées par des conditions de complémentarité. En soi, l'utilisation de cet outil est une avancée majeure permettant de traiter de manière unifiée le va-et-vient entre le régime sous-saturé (où le minéral ne se forme pas) et le régime saturé (où l'équilibre chimique a lieu). Or, la non-différentiabilité des conditions de complémentarité met en défaut les solveurs non-linéaires utilisés traditionnellement à IFPEN, comme la méthode de Newton. On est alors obligé d'utiliser une version semi-lisse, laquelle exhibe des comportements cycliques indésirables sur la plupart des cas difficiles. Dans ces conditions, le premier défi à relever est d'élaborer une méthode numérique de résolution des systèmes d'équations algébriques contenant des conditions de complémentarité, avec une meilleure garantie de convergence.

Les réactions à l'équilibre considérées recouvrent aussi une large gamme de valeurs du domaine de définition des inconnues, avec des plages de fonctionnement et des ordres de grandeurs tout à fait différents. Cela pose des problèmes de préconditionnement à lever plage-par-plage. Tantôt il est préférable de choisir comme inconnues les nombres de moles des espèces ; tantôt il est souhaitable de prendre leurs logarithmes, sous peine de faire « exploser » les calculs. Le choix de variables judicieusement adaptées aux plages de fonctionnement, quelle que soit la méthode de résolution numérique employée, constitue le deuxième verrou que nous devons lever.



Dans l'autre catégorie, les réactions cinétiques font explicitement intervenir l'évolution temporelle des concentrations, avec toutefois des temps caractéristiques très différents. Une réaction est dite « raide » lorsqu'elle atteint l'équilibre très rapidement, en un temps beaucoup plus petit que le pas de temps qui proviendrait uniquement de la partie transport. Pour bien prendre en compte les réactions cinétiques raides, il est nécessaire de développer des solveurs d'équations différentielles ordinaires adaptés. Ce problème a fait l'objet de beaucoup de recherches dans le passé à IFPEN. Cependant, de nouveaux projets IFPEN demandent une modélisation des interactions chimiques toujours plus complexe (influence de la température pour les projets liés à la géothermie, réactions microbiologiques pour le stockage d'hydrogène) faisant apparaître de nouveaux types de réactions cinétiques, pour lesquelles il est essentiel de concevoir de nouvelles méthodes numériques. C'est la troisième tâche qui nous attend.

Le quatrième et dernier volet que nous proposons d'incorporer dans les objectifs de cette thèse concerne le traitement du pas de temps. En effet, le modèle de transport réactif dans son ensemble est discrétisé par un schéma implicite en temps, ce qui conduit à la résolution d'un grand système non-linéaire à chaque pas de temps. Plus ce pas de temps est grand, plus le système est difficile à résoudre, compte-tenu des non-linéarités présentes dans les termes de transport et ceux de réaction. Nous souhaitons améliorer la convergence du solveur non-linéaire pour les grands pas de temps. Ce point rejoint certes le premier défi, mais diffère de celui-ci en ce que nous cherchons à reformuler le système différemment de sorte à faire apparaître des instants intermédiaires.