

Les méthodes de Newton-Krylov pour le couplage transport chimie

Laila AMIR, ITASCA Consultants & INRIA-Rocquencourt

Michel KERN, INRIA-Rocquencourt

La migration d'éléments chimiques à l'état dissous dans les eaux souterraines est un sujet d'actualité qui touche divers domaines (la pollution des nappes souterraines, le stockage de déchets radioactifs). La simulation de l'évolution de ces espèces dans les eaux souterraines nécessite donc un modèle couplé qui prenne en compte à la fois les phénomènes chimiques et le transport des contaminants.

La majorité des méthodes proposées se base sur un couplage pas à pas: on résout itérativement la chimie et le transport. Ce procédé converge, mais parfois au prix d'une réduction draconienne du pas de temps. Le système couplé transport-chimie est décrit par un système d'équations non linéaires, et les méthodes basées sur des variantes robustes de la méthode de Newton ont fait la preuve de leur efficacité dans des domaines variés, La difficulté est bien évidemment la taille du système sous-jacent, dont le nombre d'inconnues est le nombre de points de grille multiplié par le nombre d'espèces chimiques. Par ailleurs, une mise en oeuvre naïve de cette méthode (en formant le jacobien du système) est impossible pour des systèmes réalistes, et ne permet pas de conserver les codes de chimie et de transport séparés. Il en résulte que les temps de calculs de ce type de simulation s'élèvent rapidement avec la complexité du problème simulé jusqu'à devenir prohibitifs.

Il est possible de remédier à ce problème en utilisant une méthode de Newton-Krylov [1] pour résoudre le système non-linéaire. Il s'agit d'une méthode de Newton dans laquelle les systèmes linéaires sont résolus par une méthode itérative (plus souvent GMRES ou BiCGSTAB). Ces méthodes, aussi appelées "Jacobian free" dans la littérature anglophone [2]) demandent seulement le produit Jacobien-vecteur sans former et stocker la matrice Jacobien, ces méthodes se sont montrées efficaces dans de nombreuses applications [3], [4], [5].

Nous décrirons l'origine des modèles, et présentons les différentes méthodes de couplage [6],[7]. Des résultats numériques obtenus sur des cas tests seront présentés lors de la conférence.

Références

- [1] C. T. KELLEY, *Iterative methods for linear and nonlinear equations*, volume 16 of *Frontiers in Applied Mathematics*, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 1995.
- [2] D. BILLAUX, B. PARIS ET C. DARCEL, *3FLO Version 2.1. Calculs d'écoulements et de transport tridimensionnels*, Rapport Interne ITASCA Consultants, Volumes 1 à 4, 2004.
- [3] G. E. HAMMOND, A.J. VALOCCHI, AND P.C. LICHTNER, *Application of Jacobian-free Newton-Krylov with physics-based preconditioning to biogeochemical transport*, *Advances in Water Resources*, v28, 2005.
- [4] JIM. E. JONES AND CAROL S. WOODWARD, *Newton-Krylov-multigrid solvers for large-scale, highly heterogeneous, variably saturated flow problems*, *Advances in Water Resources*, 24 :763-774, 2001.
- [5] KNOLL, D. A. AND KEYES, *Jacobian-free Newton-Krylov methods: a survey of approaches and applications*, *J. Comput. Phys.*, 193 (2), 2004.
- [6] J. ERHEL, *Coupling flow, transport and geochemistry*, presented at the Workshop on model order reduction, coupled problems and optimization, Leiden (Nederlands), 2005.
- [7] G. T. YEH AND V. S. TRIPATHI, *A CRITICAL EVALUATION OF RECENT DEVELOPMENTS IN HYDRO-GEOCHEMICAL TRANSPORT MODELS OF REACTIVE MULTICHEMICAL COMPONENTS*, *Water Res. Res.*, 25, 1989.

Laila AMIR – laila.amir@inria.fr

ITASCA Consultants, S.A, 64, Chemin des Mouilles 69134 - ECULLY, France

Michel KERN – michel.kern@inria.fr

INRIA-Rocquencourt, B.P. 105, F-78153 Le Chesnay Cedex, France