

Modélisation des systèmes cinétiques limités

Bastien HAMLAT, IFP Energies nouvelles

Jocelyne ERHEL, INRIA Rennes

Anthony MICHEL, IFP Energies nouvelles

Thibault FANEY, IFP Energies nouvelles

Mots-clés : transfert réactif, cinétique chimique, limitation

Notre travail porte sur la modélisation mathématique des transferts réactifs pour les problèmes d'écoulements multiphasiques en milieu poreux. Dans cet exposé, on se focalise sur l'étude de la cinétique des réactions dans des contextes pouvant mener à la disparition ou à l'apparition de phases pures, fluides ou solides.

La modélisation des processus de cinétique chimique dans un volume représentatif consiste habituellement à poser un système d'équations différentielles ordinaires (EDO) de la forme suivante :

$$\frac{d\mathbf{n}}{dt} + S_{kin}\boldsymbol{\tau}(\mathbf{n}) = \mathbf{q}(\mathbf{n}) \quad (1)$$

où \mathbf{n} est le vecteur des quantités de matière des espèces du système chimique, $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{n})$ est le vecteur des taux de réaction modélisés par des lois régulières comme la loi d'action de masse, S_{kin} est la matrice de stœchiométrie du système réactif et $\mathbf{q}(\mathbf{n})$ est un terme source.

Cette formulation ne suffit pas en général, à elle seule, pour empêcher les quantités de matière de devenir négatives. Pour cela, il est nécessaire d'introduire des facteurs limitant les vitesses de réaction tout en conservant les propriétés fondamentales de la formulation physique initiale (1) là où elle est bien définie. Le modèle modifié, incluant ces facteurs limitants, peut être formulé mathématiquement de différentes manières :

- Sous la forme d'un système d'EDO avec second membre discontinu (Cf. [1])
- Sous la forme d'un problème de complémentarité (Cf. [2])
- Sous la forme d'un problème de contrôle optimal

Le premier objectif de ce travail est de montrer des résultats d'équivalence entre ces différentes formulations pour des systèmes réactifs simples. Le second objectif est de proposer des formulations analogues pour des systèmes réactifs plus complexes. Pour illustrer et compléter ce travail théorique, nous présentons également des résultats de simulation numérique appliqués à des systèmes cinétiques variés.

Références

- [1] NICOLAS BOUILLARD, ROBERT EYMARD, RAPHAELE HERBIN AND PHILIPPE MONTARNAL, *Diffusion with dissolution and precipitation in a porous medium: Mathematical analysis and numerical approximation of a simplified model*, ESAIM: M2AN, Vol. 41, No 6, 2007
- [2] JOACHIM HOFFMANN, SERGE KRAUTLE AND PETER KNABNER, *Existence and uniqueness of a global solution for reactive transport with mineral precipitation-dissolution and aquatic reactions in porous media*, 2016

Bastien HAMLAT, IFP Energies nouvelles, 1 et 4 avenue du Bois Préau, 92852 Rueil-Malmaison
bastien.hamlat@ifpen.fr

Jocelyne ERHEL, INRIA Rennes, Campus de Beaulieu, 263 avenue Général Leclerc, 35042 Rennes
Jocelyne.Erhel@inria.fr

Anthony MICHEL, IFP Energies nouvelles, 1 et 4 Avenue du Bois Préau, 92852 Rueil-Malmaison
anthony.michel@ifpen.fr

Thibault FANEY, IFP Energies nouvelles, 1 et 4 avenue du Bois Préau, 92852 Rueil-Malmaison
thibault.faney@ifpen.fr