



HAL
open science

Méthodes Numériques pour la Simulation des Ecoulements Miscibles en Milieux Poreux Hétérogènes

Mustapha El Ossmani

► **To cite this version:**

Mustapha El Ossmani. Méthodes Numériques pour la Simulation des Ecoulements Miscibles en Milieux Poreux Hétérogènes. Mathématiques [math]. Université de Pau et des Pays de l'Adour, 2005. Français. NNT: . tel-00009683

HAL Id: tel-00009683

<https://theses.hal.science/tel-00009683>

Submitted on 5 Jul 2005

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ de PAU et des PAYS de l'ADOUR

**ÉCOLE DOCTORALE DES SCIENCES EXACTES ET DE
LEURS APPLICATIONS**

par

Mustapha EL OSSMANI

pour obtenir le grade de

DOCTEUR

Spécialité : **Mathématiques Appliquées**

**MÉTHODES NUMÉRIQUES POUR LA SIMULATION
DES ÉCOULEMENTS MISCIBLES EN MILIEUX
POREUX HÉTÉROGÈNES**

Soutenue le 12 MAI 2005 :

Après avis des rapporteurs :

M. A. BOURGEAT Professeur – Université Lyon I
M. M. EL ALAOUI TALIBI Professeur – Université Cadi Ayyad, Marrakech, Maroc

Devant la commission d'examen formée des rapporteurs et de :

M. M. AMARA Professeur – Université de Pau et des Pays de l'Adour
M. M. ABKARI Professeur – Université Hassan II – Mohammédia, Casablanca, Maroc
M. B. AMAZIANE Maître de Conférences – Université de Pau et des Pays de l'Adour
M. M. CHAGDALI Professeur – Université Hassan II – Mohammédia, Casablanca, Maroc
M. H. EL AMRI Professeur – Université Hassan II – Mohammédia, Casablanca, Maroc
M. A. GUESSAB Professeur – Université de Pau et des Pays de l'Adour
M. J. JAFFRE Directeur de Recherche, INRIA, Rocquencourt, Le Chesnay
Mme. Z. MGHAZLI Professeur – Université Ibn Tofaïl, Kénitra, Maroc
M. C. SERRES Docteur Ingénieur de Recherche, IRSN, Fontenay aux Roses

Remerciements

Le travail présenté dans ce mémoire rentre dans le cadre d'une co-tutelle de thèse établie entre l'Université de Pau et des Pays l'Adour, Laboratoire de Mathématiques Appliquées-CNRS UMR 5142, Pau, France et l'Université Hassan II-Mohammédia, Faculté des Sciences Ben M'Sik, Casablanca, Maroc. Ce travail a bénéficié du soutien de l'Agence Universitaire de la Francophonie et de l'Action Intégrée n° MA/04/94 du Comité Mixte Inter Universitaire Franco-Marocain.

Je remercie Monsieur M. Amara, de l'intérêt qu'il a marqué pour ce travail et de l'honneur qu'il me fait de présider le jury. Je remercie également Messieurs A. Abkari, M. Chagdali, A. Guessab, J. Jaffré et Madame Z. Mghazli, de l'attention qu'ils ont porté à cette thèse et de leur participation au jury.

Messieurs A. Bourgeat et M. El Alaoui Talibi ont accepté d'être mes rapporteurs. Je souhaite leur exprimer toute ma gratitude pour leurs remarques constructives et leurs sais gré d'avoir bien voulu examiner ce travail et de leur participation au jury.

J'exprime également toute ma reconnaissance à Monsieur C. Serres pour ses discussions fructueuses, sa collaboration dans le développement du code MFlow et pour sa participation au jury.

Je tiens à remercier tout particulièrement mes directeurs de thèse Messieurs B. Amaziane et H. El Amri pour m'avoir proposé ce sujet et pour m'avoir guidé dans ma formation de Mathématiques Appliquées. Durant mes années de thèse, ils m'ont apporté une aide précieuse et un soutien sans limites, que je ne saurais oublier.

C'est l'occasion aussi pour moi d'exprimer mes remerciements à tous les membres des départements de Mathématiques de l'Université de Pau et de la Faculté des Sciences Ben M'Sik pour leur chaleureux accueil et de l'expérience professionnelle qu'ils m'ont transmise.

Mes vifs remerciements vont également à mes amis et à tous mes collègues de Pau et Casa, pour leur soutien, leur encouragement et leur bonne humeur, ce qui m'a parfois permis de surmonter les moments difficiles.

Enfin, J'exprime toute ma reconnaissance à mes parents et à toute ma famille pour leur soutien permanent, leurs encouragements et leur amour.

Résumé

Dans ce travail, nous nous intéressons à des méthodes numériques pour un modèle d'écoulements incompressibles et miscibles ayant des applications dans l'ingénierie pétrolière et l'hydrogéologie. De manière précise, le problème étudié est modélisé par un système couplé composé d'une équation elliptique (1), et d'une équation de type diffusion-convection-réaction (2). Soit Ω un ouvert polygonal de frontière Γ composée de trois parties telles que $\Gamma = \bar{\Gamma}_1 \cup \bar{\Gamma}_2 \cup \bar{\Gamma}_3$. On s'intéresse au modèle d'écoulements miscibles en milieux poreux donné par le système suivant :

Equation en vitesse-pression :

$$\begin{cases} \vec{q} = -\frac{K(x)}{\mu(c)} \nabla p & \text{dans } \Omega \times]0, T[\\ \operatorname{div} \vec{q} = 0 & \text{dans } \Omega \times]0, T[\\ \vec{q} \cdot \vec{n}|_{\Gamma_1} = -q_0; \vec{q} \cdot \vec{n}|_{\Gamma_2} = 0; p|_{\Gamma_3} = p_0 & \text{sur }]0, T[\end{cases} \quad (1)$$

Equation en concentration :

$$\begin{cases} \Phi(x) \frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div} (D(x, \vec{q}) \nabla c - c \vec{q}) + R(x)c = f(x, t) & \text{dans } \Omega \times]0, T[\\ c|_{\Gamma_1} = c_1; D \nabla c \cdot \vec{n}|_{\Gamma_2} = 0; (D \nabla c - c \vec{q}) \cdot \vec{n}|_{\Gamma_3} = c_3 & \text{sur }]0, T[\\ c(x, 0) = c_0(x) & \text{sur } \Omega \end{cases} \quad (2)$$

où p et \vec{q} sont la pression et la vitesse de Darcy du fluide, Φ et K sont la porosité cinématique et la perméabilité absolue du milieu poreux. La viscosité du fluide μ est une fonction non linéaire de la concentration c de la phase, R est le terme de réaction, et f est le terme source. q_0 est le flux imposé sur Γ_1 et p_0 est la pression donnée sur Γ_3 . c_1 est la concentration donnée sur Γ_1 , c_3 est le flux total donné sur Γ_3 . c_0 est la concentration initiale.

Le tenseur de diffusion-dispersion D est donné par :

$$D(x, \vec{q}) = d_e I + |\vec{q}| [\alpha_l E(\vec{q}) + \alpha_t (I - E(\vec{q}))]$$

avec $E_{ij}(\vec{q}) = \frac{q_i q_j}{|\vec{q}|^2}$, d_e est le coefficient de la diffusion moléculaire effective, α_l et α_t sont les dispersivités intrinsèques longitudinale et transversale respectivement.

Nous étudions et analysons un schéma numérique combinant une méthode d'éléments finis mixtes (EFM) et une méthode des volumes finis (VF) pour approcher le système couplé (1)-(2). Pour l'implémentation numérique, on utilise l'élément fini triangulaire de Raviart-Thomas de bas degré pour approcher l'équation de Darcy et la discrétisation de la concentration utilise un maillage dual non structuré de type Voronoi. Le schéma VF considéré est de type "vertex centred" semi-implicite en temps : explicite pour la convection et implicite pour la diffusion. On utilise un schéma de Godunov pour approcher le terme convectif et une approximation élément fini P_1 pour le terme de diffusion. Nous montrons des résultats de stabilité L^∞ , des estimations BV et le principe du maximum discret sous une condition CFL appropriée. Ensuite, nous montrons la convergence de la

solution approchée obtenue par le schéma combiné EFM-VF vers la solution du problème couplé. La démonstration de la convergence se fait en plusieurs étapes : premièrement, on déduit la convergence forte de la solution approchée de la concentration dans $L^2(Q)$, en utilisant la stabilité L^∞ , les estimations BV et des arguments de compacité. Dans l'étape suivante, on étudie le schéma découplé EFM, en donnant des résultats de convergence pour la pression et la vitesse. Enfin, le processus de convergence de la solution approchée du schéma combiné EFM-VF vers la solution exacte est obtenu par passage à la limite et par unicité de la solution du problème continu. Des simulations numériques académiques et réalistes pour des problèmes bidimensionnels confirment la stabilité et l'efficacité du schéma combiné.

Enfin, nous étudions des estimateurs d'erreur a posteriori de type résiduel pour une équation de convection-diffusion-réaction discrétisée par un schéma VF "vertex centred" semi-implicite en temps. Nous introduisons deux sortes d'indicateurs. Le premier est local en temps et en espace et constitue un outil efficace pour l'adaptation du maillage à chaque pas de temps. Le second est global en espace mais local en temps et peut être utilisé pour l'adaptation en temps. Nous montrons que l'estimateur est une borne supérieure de l'erreur. Des résultats numériques d'adaptations de maillage sont présentés et montrent l'efficacité de la méthode.

La partie logiciels de ce travail porte sur deux volets. Le premier a permis de réaliser un code de calcul 2D, MFlow, écrit en C++, pour la résolution du système des écoulements miscibles considérés dans cette thèse. Le second volet concerne la collaboration avec un groupe de chercheurs du GdR MoMaS (<http://momas.univ-lyon1.fr/>) pour l'élaboration de la plate-forme Homogenizer++ de calcul numérique des coefficients effectifs obtenus par des méthodes asymptotiques d'homogénéisation de mise à l'échelle. Cette plate-forme en Java est basée sur une Interface Homme Machine conviviale et utilisée comme un pré-processing à des simulations numériques d'écoulements en milieux poreux hétérogènes. Notre contribution dans cette partie était de réunir trois modules pour le calcul des coefficients effectifs sous le même environnement en proposant une interface graphique. Le premier module consiste à calculer la perméabilité effective pour un écoulement monophasique. Le second module est consacré à la détermination des caractéristiques effectives (perméabilités relatives, pressions capillaires) pour des écoulements diphasiques. Le dernier module permet d'obtenir la dispersion effective pour un modèle d'écoulement miscible.

Table des matières

1	Introduction Générale	1
2	Modélisation Mathématique et Numérique des Écoulements Miscibles en Milieu Poreux	13
2.1	Caractéristiques d'un milieu poreux	14
2.1.1	Types d'eau	14
2.1.2	Masses volumiques	14
2.1.3	Porosité	14
2.1.4	Perméabilité	15
2.2	Écoulement en milieu poreux	15
2.2.1	Milieu poreux	16
2.2.2	Principe de conservation de la masse	17
2.2.3	Equation du mouvement : loi de Darcy	18
2.3	Transfert de matière	19
2.3.1	Mécanismes de convection	19
2.3.2	Mécanismes de dispersion-diffusion	20
2.4	Modèles de transfert	22
2.4.1	Transport conservatif	22
2.4.2	Transport non-conservatif	23
2.5	Conditions aux limites et conditions initiales	24
2.5.1	Cas des modèles de l'écoulement	25
2.5.2	Cas des modèles de transfert	26
2.6	Modèle mathématique	26
2.7	Existence et unicité de solution	27
2.8	Quelques références bibliographiques sur les méthodes numériques	28

2.8.1	Maillages duaux dans le cas structuré	31
2.8.2	Maillages duaux dans le cas non structuré	32
2.8.3	Schémas volumes finis pour une équation hyperbolique	34
2.8.4	Schémas volumes finis pour une équation elliptique	37
2.8.5	Schémas volumes finis pour une équation de convection-diffusion	38
3	Convergence d'un Schéma Combiné Eléments Finis Mixtes-Volumes	
	Finis	41
3.1	Introduction	41
3.2	Notations et discrétisation	43
3.3	Discrétisation par EFM de l'écoulement	45
3.4	Discrétisation par VF de l'équation de la concentration	47
3.4.1	Flux de convection	48
3.4.2	Flux de diffusion	48
3.5	Stabilité L^∞ et estimations BV	52
3.6	Résultats de convergence	62
3.6.1	Convergence forte de la solution approchée	62
3.6.2	Étude du schéma découplé EFM	63
3.6.3	Stabilité et convergence du schéma découplé EFM	63
3.6.4	Convergence du schéma combiné EFM et VF	65
3.7	Conclusion	69
4	Simulations Numériques 2D d'Écoulements Miscibles en Milieux	
	Poreux	71
4.1	Introduction	71
4.2	Résolution numérique	74
4.2.1	Schéma EFM hybrides	74
4.2.2	Schéma VF semi-implicite "vertex centred"	75
4.3	Test 1 : domaine homogène et isotrope	76
4.4	Test 2 : "Labyrinthe"	79
4.5	Test 3 : Exercice Couplex1	82
4.5.1	Description du modèle physique	83
4.5.2	Résultats numériques	84
4.6	Test 4 : Exercice REGIME	87

4.6.1	Description physique du modèle	88
4.6.2	Résultats numériques	89
4.6.3	Résultats d'écoulement	91
4.6.4	Résultats du Transport	91
4.7	Test 5 : domaine fracturé & homogénéisation	92
5	Estimation d'Erreur a posteriori pour un Schéma VF d'une Équation de type Convection-Diffusion-Réaction	99
	Références bibliographiques	133

Table des figures

2.1	Cellule cell-vertex	31
2.2	Cellule cell-centred.	32
2.3	Maillage primal et dual.	33
2.4	Cellule vertex-centered.	33
2.5	Cellule cell-centred.	33
2.6	Discrétisation au temps t^n du champ $u^n(x)$	35
2.7	Solution du problème de cauchy sous la condition de stabilité.	36
3.1	Cellule "vertex-centered" en 2-D	44
3.2	Une partie de la cellule "vertex-centered" en 3-D.	44
4.1	Test 1 : Maillage primal et dual	77
4.2	Test 1 : Conditions aux bords et géométrie.	77
4.3	Test 1 : Vitesse de Darcy.	77
4.4	Test 1 : Pression.	77
4.5	Test 1 : Profil de la concentration au cours du temps.	78
4.6	Test 2 : Distribution des perméabilités.	80
4.7	Test 2 : Vitesse de Darcy.	80
4.8	Test 2 : Pression.	80
4.9	Test 2 : Concentrations à T=20 ans.	81
4.10	Test 2 : Concentrations à T=30 ans.	81
4.11	Test 2 : Concentrations à T=50 ans.	82
4.12	Test 3 : Domaine de calcul Ω	84
4.13	Test 3 : Vitesse de Darcy.	85
4.14	Test 3 : Charge hydraulique.	85
4.15	Test 3 : Concentration à T=50110 ans.	85

4.16	Test 3 : Concentration à $T=200440$ ans.	85
4.17	Test 3 : Concentration à $T= 1503300$ ans.	86
4.18	Test 3 : Concentration à $T=4008800$ ans.	86
4.19	Test 3 : Concentration à $T=10^7$ ans.	86
4.20	Test 4 : Distribution de la perméabilité K	89
4.21	Test 4 : Conditions aux bords.	89
4.22	Test 4 : Charge hydraulique.	90
4.23	Test 4 : Vitesse de Darcy.	90
4.24	Test 4 : Concentration après environ 30 années.	90
4.25	Test 4 : Concentration après environ 500 années.	90
4.26	Test 4 : Concentration après environ 20000 années.	91
4.27	Test 5 : Perméabilité hétérogène.	94
4.28	Test 5 : Domaine de calcul Ω	94
4.29	Test 5 : Vitesse & Pression dans le cas homogène 1.	96
4.30	Test 5 : Vitesse & Pression dans le cas hétérogène.	96
4.31	Test 5 : Vitesse & Pression dans le cas homogène 2.	96
4.32	Test 5 : Concentrations dans le cas homogène 1	97
4.33	Test 5 : Concentrations dans le cas hétérogène	97
4.34	Test 5 : Concentrations dans le cas homogène 2	97
4.35	Test 5 : Concentrations à l'exutoire Γ_3	98

Liste des tableaux

4.1	Caractéristiques du maillage triangulaire et temps de calcul.	79
4.2	Test 3 : Perméabilité K dans les quatres couches géologiques.	83
4.3	Test 3 : Paramètres de diffusion/dispersion.	83
4.4	Test 4 : Paramètres de perméabilité et de diffusion/dispersion.	89

Nomenclature

- Ω domaine de \mathbb{R}^d ($d = 1, 2$ ou 3), figurant un milieu poreux.
- $\Gamma = \partial\Omega = \bar{\Gamma}_1 \cup \bar{\Gamma}_2 \cup \bar{\Gamma}_3$ frontière du domaine Ω .
- \vec{n} normale unitaire à une frontière, orientée vers l'extérieur.
- $x = x, (x, y), (x, y, z)$ variable d'espace dans $\Omega \subset \mathbb{R}^d$.
- t, T variable temporaire et temps final, en (année).
- h pas du maillage dans Ω , en (m).
- Δt pas de discrétisation en temps dans $[0, T[$, en (année).
- $K = K(x)$ perméabilité, en (m^2).
- μ viscosité dynamique du fluide, en ($gm^{-1}an^{-1}$).
- ρ masse volumique du fluide, en (gm^{-3}).
- ϕ porosité totale (sans dimension).
- g accélération de la pesanteur, en (man^{-2}).
- z côte définie selon un axe vertical ascendant, en (m).
- p pression du fluide, en (Pa).
- \vec{q} vitesse de Darcy, en (m/an).
- c concentration du soluté en solution, en (gm^{-3}).
- D_{mol} coefficient de la diffusion moléculaire en phase fluide, en (m^2an^{-1}).
- D_{cin} dispersion cinématique en phase fluide, en (m^2an^{-1}).
- $D_d = D_{cin} + D_{mol}$ dispersion hydraulique, en (m^2an^{-1}).
- $D_e = \Phi D_d$ dispersion effective, en (m^2an^{-1}).
- α_L dispersivités intrinsèque longitudinale, en (m).
- α_T dispersivités intrinsèque transversale, en (m).

Les opérateurs

- $(f)^+, (f)^- \max(f, 0), \min(f, 0)$.
- $|w|$ mesure de Lebesgue pour $w \subset \mathbb{R}^d, 1 \leq d \leq n$.

- \bar{w} fermeture de l'ouvert $w \subset \mathbb{R}^d, 1 \leq d \leq n$.
- $|\xi|$ norme euclidienne pour $\xi \in \mathbb{R}^d$.
- $\delta(p, q)$ distance euclidienne entre les points p et q dans \mathbb{R}^d .
- \cdot produit scalaire entre deux vecteurs de \mathbb{R}^d .
- I_d matrice identité dans \mathbb{R}^d .

Les espaces fonctionnels

- $L^p(\Omega) := \{f; l^d - \text{mesurable sur } \Omega; \text{ tel que } \int_{\Omega} |f|^p dx < \infty\}, 1 \leq p \leq \infty$.
- $L^\infty(\Omega) := \{f; l^d - \text{mesurable sur } \Omega; \text{ tel que } |f| < C < \infty \text{ p.p. sur } \Omega\}$.
- $W^{m,p}(\Omega) := \left\{ w \in L^p(\Omega); D^\delta w \in L^p(\Omega); \text{ pour } |\delta| := \sum_{i=1}^d \delta_i \leq m \right\}$.
- $H^m(\Omega) := W^{m,2}(\Omega)$, espace de Sobolev d'ordre m .
- $C^m(\Omega) := \left\{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \text{ tel que } D^\delta f \text{ est continue sur } \Omega, |\delta| := \sum_{i=1}^d \delta_i \leq m \right\}$.
- $C_0^m(\Omega) :=$ espace des fonctions de $C^m(\Omega)$ à support compact dans Ω .
- $H(\text{div}, \Omega) := \{ \vec{q} \in (L^2(\Omega))^d; \text{div}(\vec{q}) \in L^2(\Omega) \}$.
- $V(\Omega) := \{ v \in C^1(0, T; C^2(\bar{\Omega})); v = 0 \text{ sur } \Gamma_1 \cup \Gamma_3 \}$.
- P_k : ensemble des polynômes de degré $\leq k$, sur \mathbb{R}^d .

Chapitre 1

Introduction Générale

Ce mémoire est consacré au développement et l'analyse de méthodes numériques pour la simulation des écoulements miscibles en milieux poreux. L'étude des écoulements de fluides en milieux poreux hétérogènes porte une grande importance dans la gestion des ressources naturelles en eau et la récupération assistée d'hydrocarbures. Dans ces domaines les calculs et simulations numériques sont essentiels car les expérimentations sont très difficiles sinon impossibles mais par contre les prédictions sont vitales. Les questions d'écoulement et de transport en milieu poreux, comme la plupart des problèmes environnementaux, ont acquis ces dernières années dans nos sociétés une importance qui paraît méritée. Les enjeux principaux liés à ces questions résident principalement dans les gestions des ressources en eau et la maîtrise des pollutions souterraines. Avec l'explosion démographique et les activités industrielles, la demande en eau est de plus en plus croissante, les eaux de surface seules ne peuvent subvenir aux besoins, il est donc nécessaire d'utiliser les réserves en eaux souterraines. Il est extrêmement difficile d'estimer le volume de l'eau souterraine sur toute la planète. Toutefois, toutes les estimations impliquent que l'eau souterraine constitue un volume très important de l'eau douce utilisable de la terre. Etant donné l'importance vitale des eaux souterraines, sa qualité en fait une ressource de valeur. La qualité de l'eau souterraine est aussi importante que sa quantité. Les contaminations de l'eau souterraine proviennent de deux catégories de sources : les sources ponctuelles et les sources diffuses. Les décharges, les pertes de fosses septiques et des puits perdus, et les déversements accidentels sont des exemples de sources ponctuelles. L'infiltration des pesticides et des engrais des terres agricoles

1. Introduction

est un exemple de source diffuse. La contamination peut rendre l'eau inutilisable pendant des décennies. Dans les régions côtières, en raison de la concentration de la population et des industries, la demande en eau souterraine est plus grande. Le problème de la dégradation de la qualité des eaux souterraines dans les régions côtières est souvent lié au phénomène d'intrusion marine (cf., p.e., [18], [37], [38]). Ce phénomène est considéré comme l'un des problèmes majeurs de l'environnement. L'invasion d'eau salée peut poser un problème dans les zones côtières où la quantité de pompage des eaux souterraines est assez élevée pour entraîner une invasion d'eau salée dans les aquifères d'eau douce. L'exploitation intensive des nappes souterraines et les conditions défavorables ont entraîné des situations critiques provoquant ainsi des baisses du niveau d'eau et une augmentation de la salinité de l'eau des aquifères côtiers. Cette surrexploitation menace actuellement le développement hydro-agricole sur une grande superficie des zones côtières dans le monde. Pour faire face à cette situation préoccupante, il s'avère nécessaire d'étudier le problème d'intrusion marine pour tout aménagement d'un aquifère côtier. Dans ce contexte, une des approches utilisées est basée sur un modèle d'écoulement et de transport où la dispersion hydrodynamique est considérée puisque le modèle tient compte de la zone de transition via un mélange plus ou moins intense entre les deux fluides eau douce et eau salée. Afin de protéger l'environnement humain des déchets radioactifs issus de l'industrie nucléaire, ou de toute autre activité utilisant des radio-éléments, il convient de les traiter et de les isoler jusqu'à ce que leur radioactivité ait diminué suffisamment pour n'entraîner des conséquences nocives sur l'environnement humain. Les méthodes d'isolation dépendent du type de déchets : les déchets à vie courte et à faible activité peuvent être stockés en surface ou à proximité, alors que ceux à vie longue ou à moyenne et forte activité doivent subir des traitements plus sophistiqués et être stockés éventuellement en formation géologique profonde. L'isolation consiste alors à utiliser des barrières naturelles et "ouvrées", afin d'obtenir le niveau de protection désiré, pour diverses périodes de temps définies au préalable. Les différentes barrières sont constituées des matrices de conditionnement des déchets, conteneurs, sous-conteneurs, divers matériaux de remblayage et de sellements ainsi que de la formation géologique elle-même. Les divers matériaux sont choisis pour leurs propriétés mécaniques, chimiques, et hydrologiques afin de contenir l'activité au plus proche des déchets; la roche entourant le relâché doit empêcher toute circulation importante

1. Introduction

d'eau souterraine et retarder le transport de radionucléides vers l'environnement humain. La solution du stockage profond est évaluée actuellement par la plupart des pays industrialisés et motive de nombreuses recherches à travers le monde. Cette voie est actuellement explorée en France par l'ANDRA—Agence Nationale pour la gestion des Déchets Radioactifs—, qui doit remettre au Parlement français les conclusions de ses études en 2006, afin d'éclairer le débat sur le sujet [1]. L'étude de la faisabilité d'un stockage profond nécessite notamment de porter une appréciation sur la sûreté des installations de stockage des déchets radioactifs. L'évaluation des capacités de confinement des différentes barrières interposées entre les radionucléides et les exutoirs de la biosphère ainsi que l'estimation globale de l'impact dosimétrique des stockages contribuent à évaluer la sûreté, à long term notamment, des installations. Ces estimations s'appuient en grande partie sur la modélisation numérique des divers phénomènes hydrique, chimique, mécanique, thermique, et de présence de gaz pouvant influencer le transport de radionucléides. Compte tenu des hétérogénéités des différents paramètres pris en compte dans l'équation de transport, des simulateurs fiables sont indispensables afin de réduire au minimum l'imprécision due à la discrétisation, sachant que par ailleurs de nombreuses incertitudes phénoménologiques subsistent et doivent être prise en compte dans l'évaluation de sûreté. De nombreuses techniques d'exploitation des gisements de pétrole, qu'on continue à qualifier de "techniques de récupération secondaire" (bien que la tendance actuelle soit de les mettre en oeuvre très rapidement après le début d'exploitation, alors que naguère on les utilisait seulement une fois que toute l'huile susceptible d'être récupérée par les techniques de "récupération primaire" avait été produite) utilisent l'injection, par certains puits, d'un fluide chargé de déplacer l'huile vers d'autres puits (cf., p.e., [32], [58], [72], [76], [86]). Pour améliorer les récupérations d'huile, il vient tout naturellement à l'esprit de ne pas employer un fluide quelconque, mais un fluide miscible avec l'huile. Les forces interfaciales sont ainsi supprimées et l'efficacité qui traduit le piégeage de l'huile par les forces capillaires au niveau des pores envahis par le fluide déplaçant atteint théoriquement la valeur 1. C'est d'ailleurs ce procédé qui est depuis longtemps employé en laboratoire, où les carottes sont débarassées de l'huile qu'elles contiennent à l'aide de solvants appropriés. Malheureusement, les produits couramment utilisés en laboratoire et miscibles avec les huiles sont des produits chers (prix supérieur le plus souvent au prix d'un pétrole brut), dont on

1. Introduction

ne peut envisager l'injection en continu dans un gisement. L'intérêt pratique des déplacements miscibles est apparu quand on a découvert :

- d'une part qu'il suffisait, pour obtenir un tel déplacement, d'injecter un "bouchon" de solvant de volume limité (quelques pourcents du volume poreux à balayer) poussé par un fluide de chasse beaucoup moins onéreux.
- d'autre part que, dans certaines conditions de pression, température et compositions des phases en présence, divers fluides pouvaient devenir miscibles avec l'huile.

Cependant, il est à noter que si le fluide miscible déplaçant est un gaz de mobilité élevée, on peut avoir des phénomènes de digitations, de ségrégation par gravité, de cheminement préférentiel réduisant ou même détruisant l'intérêt du procédé par rapport à un procédé classique tel que, par exemple, une injection d'eau. La modélisation mathématique des trois problèmes décrits précédemment introduit un système couplé introduisant une équation elliptique pour l'écoulement (pression-vitesse) et une équation de diffusion-convection-réaction pour le transport de contaminant (concentration) ([15], [17], [19], [49]). Les principales difficultés rencontrées pour la simulation numérique sont la dimension du réservoir, la prise en compte des hétérogénéités et la complexité des phénoménologies couplées. La modélisation numérique à grand échelle, en trois dimensions, sur une longue période de temps, dans un milieu hétérogène, dépasse les capacités actuelles des ordinateurs et nécessite une réflexion sur le choix et la conception de méthodes numériques appropriées. Diverses techniques de caractérisation des formations géologiques peu profondes permettent de disposer d'un modèle géologique composé de plusieurs millions de mailles, à chacune desquelles sont associés des paramètres hydrogéologiques tels que la perméabilité, la porosité etc. Cependant, la difficulté réside dans la prise en compte de cette complexité lors des simulations numériques des écoulements des fluides en milieux poreux hétérogènes. Il est envisageable de simuler de tels phénomènes sur un modèle géologique aux moyens des simulations parallèles par exemple. Toutefois bien que les moyens informatiques ne cessent de progresser la durée de simulation est encore trop grande et d'autres difficultés (convergence, stabilité, etc.) peuvent apparaître. D'autre part comme la géostatistique est fondée sur des techniques probabilistes, on ne dispose pas d'un seul modèle géologique mais d'un ensemble de modèles (réalisations) équiprobables du domaine. Par ailleurs le modèle géologique

1. Introduction

est construit en respectant au mieux les particularités de la géométrie réelle du réservoir, tels que les chenaux et les failles ce qui engendre en général un maillage réservoir irrégulier sur lequel sont simulés les écoulements des fluides. Pour pallier ces difficultés, on est donc amené à recourir aux méthodes d'homogénéisation ou de changements d'échelles[79]. L'approche consiste à construire un modèle équivalent en calculant des paramètres géologiques effectifs. Le problème du changement d'échelle consiste à déterminer, à partir de données ou de caractéristiques locales, les paramètres effectifs d'un milieu intervenant dans une description à plus grande échelle. Cette étape est un problème majeur pour la simulation numérique des écoulements de fluides en formation géologique. Dans ce travail, nous nous intéressons au développement d'un schéma numérique performant pour un modèle d'écoulements incompressibles et miscibles ayant des application dans l'ingénierie pétrolière et l'hydrogéologie. D'une manière plus précise, le problème étudié est modélisé par un système couplé composé d'une équation elliptique(1.1), et d'une équation de type diffusion-convection-réaction (1.2) (voir [58] et[17]).

Equation en vitesse-pression :

$$\begin{cases} \vec{q} = -\frac{K(x)}{\mu(c)} \nabla p & \text{dans } \Omega \times]0, T[\\ \operatorname{div} \vec{q} = 0 & \text{dans } \Omega \times]0, T[\\ \vec{q} \cdot \vec{n}|_{\Gamma_1} = -q_0; \quad \vec{q} \cdot \vec{n}|_{\Gamma_2} = 0; \quad p|_{\Gamma_3} = p_0 & \text{sur }]0, T[\end{cases} \quad (1.1)$$

Equation en concentration :

$$\begin{cases} \Phi(x) \frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div} (D(x, \vec{q}) \nabla c - c \vec{q}) + R(x)c = f(x, t) & \text{dans } \Omega \times]0, T[\\ c|_{\Gamma_1} = c_1; \quad D \nabla c \cdot \vec{n}|_{\Gamma_2} = 0; \quad (D \nabla c - c \vec{q}) \cdot \vec{n}|_{\Gamma_3} = c_3 & \text{sur }]0, T[\\ c(x, 0) = c_0(x) & \text{sur } \Omega \end{cases} \quad (1.2)$$

où la frontière Γ est composée de trois parties telles que $\Gamma = \bar{\Gamma}_1 \cup \bar{\Gamma}_2 \cup \bar{\Gamma}_3$, p et \vec{q} sont la pression et la vitesse de Darcy du fluide, Φ et K sont la porosité cinématique et la perméabilité absolue du milieu poreux. La viscosité du fluide μ est une fonction non linéaire de la concentration c de la phase, et f est le terme source. R est le terme de réaction, et dans le cas des déchets radioactifs, il est donné par : $R(x) = r\Phi(x)$, où r est le coefficient de décroissance radioactive qui dépend de la demi-vie temps $T_{1/2}$ des radionucléides par la relation $r = \frac{\ln 2}{T_{1/2}}$. q_0 est le flux imposé sur Γ_1 et p_0 est

1. Introduction

la pression donnée sur Γ_3 . c_1 est la concentration donnée sur Γ_1 , c_3 est le flux total donné sur Γ_3 . c_0 est la concentration initiale.

Le tenseur de diffusion-dispersion D est donné par :

$$D(x, \vec{q}) = d_e I + |\vec{q}|[\alpha_l E(\vec{q}) + \alpha_t (I - E(\vec{q}))]$$

avec $E_{ij}(\vec{q}) = \frac{q_i q_j}{|\vec{q}|^2}$, d_e est le coefficient de la diffusion moléculaire effective, α_l et α_t sont les dispersivités intrinsèques longitudinale et transversale respectivement. Dans ce travail, nous étudions et analysons un schéma numérique combinant une méthode d'éléments finis mixtes hybrides (EFMH) et une méthode des volumes finis (VF) pour approcher le système couplé (1.1)-(1.2). La méthode EFMH (cf. [27]) est utilisée pour approcher l'équation de Darcy. L'équation de la concentration est approchée par une méthode des volumes finis (cf. voir [61]), voir aussi [4], [5], [62] et [28]. La modélisation numérique de l'équation (1.1) par des schémas numériques classiques (éléments finis conformes ou différences finies) est souvent peu satisfaisante car il n'y a pas de conservation de flux au niveau de l'élément et aussi à cause du caractère diffusif de ces schémas (voir [61]). Les méthodes mixtes utilisant des formulations avec les deux inconnues pallient à ce type d'insuffisance ([27] et [101]). Elles permettent d'approcher simultanément un champ de potentiel (pression ou charge) et la vitesse avec la même précision. De plus elles assurent la continuité de la composante du flux diffusif d'un élément à l'autre et préservent la conservation de la masse à l'échelle d'un élément. La contrepartie de ces avantages réside, d'une part, dans l'accroissement substantiel du nombre d'inconnues, et d'autre part, dans le fait que le système final à résoudre n'est plus à matrice symétrique définie positive mais correspond à la détermination d'un point selle. L'une des approches utilisées pour ramener la résolution à celle d'un problème à matrice symétrique définie positive consiste à dualiser les conditions de raccord des flux. On obtient ainsi les méthodes mixtes hybrides (cf. [27]). La technique proposée par Bendali et al. [20], pour réduire le nombre d'inconnues, consiste à donner une nouvelle décomposition de l'espace des fonctions chapeaux pour les éléments finis mixtes en introduisant l'espace de Raviart Thomas de plus bas degré [100] et [107]. Plusieurs auteurs ont développé des algorithmes efficaces pour le traitement algébrique du système linéaire des méthodes hybrides (voir, p.e., [35]). Une étude comparative entre des calculs menés avec la

1. Introduction

méthode des éléments finis mixtes et des calculs menés avec des éléments finis mixtes hybrides a été abordée dans [34] pour un maillage rectangulaire. L'extension de cette procédure pour un maillage triangulaire a été traitée dans [12]. En outre, une discrétisation utilisant la méthode des éléments finis mixtes et volumes finis est présentée dans [33] et [69]. convection-diffusion-réaction (1.2), les méthodes des volumes finis sont les plus utilisées pour la discrétisation de ce type d'équations. Une classe des schémas volumes finis est fondée sur l'approximation des flux le long des interfaces entre deux volumes de contrôles voisins. En effet, la discrétisation en volumes finis résulte d'un choix en sens physique, basée sur l'écriture des bilans. Elle consiste à discrétiser sur chaque cellule, appelée volume de contrôle, la forme intégrale du problème à résoudre à la place de sa forme différentielle considérée en différences finies. La connaissance d'un tel schéma volumes finis repose donc sur l'approche des flux d'une manière à avoir la consistance et la conservation. L'avantage de ces méthodes réside dans leurs facilités d'adaptation aux géométries complexes comme c'est le cas dans de nombreux problèmes industriels. De plus, elles permettent aisément de prendre en compte la présence d'hétérogénéités et de traiter de façon naturelle les conditions aux limites. Ces méthodes permettent d'avoir des propriétés physiques intéressantes : conservation des flux élément par élément avec une stabilité numérique et une diffusion numérique minimales et respecte le principe du maximum discret, (voir [83], [5], [6], [10], [28], [62], [94], [77] et [64]). Les premiers schémas développés sont apparus avec Godunov en 1959 pour un problème hyperbolique (voir [74],[91] et [82]). Plusieurs auteurs ont utilisé le schéma de Godunov pour discrétiser le terme de convection car il est consistant et conservatif ([45],[91], [82], [83], [94], [62], [44] et [5]). D'autres ont utilisé la méthode "upwind-mixed method" (voir, p.e., [47] et [46]). Quant au terme de diffusion, les techniques d'approximations varient suivant la nature du maillage et le tenseur de diffusion. On trouve par exemple dans [4] et [67] que le flux de diffusion est approché de manière consistante par différences finies. Ils utilisent une approximation d'ordre 1 du gradient sur la direction perpendiculaire à l'interface. L'inconvénient de cette méthode est qu'elle ne permet pas d'utiliser des maillages raffinés ou hybrides. Pour remédier à ce problème, Coudière, dans [44], [43] et [42], a utilisé une méthode qui est dite "cellules diamants". Cette technique consiste à reconstruire le gradient complet de la solution approchée le long de l'interface. Elle utilise une valeur interpolée

1. Introduction

de la solution approchée en chaque noeud du maillage, pour calculer le gradient dans la direction tangentielle à l'interface. Plusieurs auteurs ont traité l'équation de convection-diffusion en combinant la méthode des éléments finis et des volumes finis (voir, p.e., [105], [21], [48], [56] et [84]). Cette technique nécessite deux types de maillage (primal et dual). Feistauer [68] a proposé une méthode de Galerkin discontinue en utilisant les avantages des deux méthodes VF et EF avec un seul type de maillage. Dans [59], [60] et [109] des méthodes volumes finis ont été développées et analysées pour des modèles d'écoulement de deux fluides immiscibles dans un milieu poreux dans le cas où la diffusion est négligeable. Pour le problème qui nous intéresse, l'équation de concentration peut être à convection dominante, dans ce cas le terme de diffusion est petit, mais important et ne peut pas être négligé, voir [17] et [86], et ceci doit être pris en considération lors de la discrétisation. En outre, la complexité de la géométrie des domaines géologiques exige l'utilisation de maillages non structurés, voir [78]. Ainsi notre but est de développer un schéma numérique performant, en combinant les méthodes d'éléments finis mixtes et les volumes finis, en prenant en compte l'anisotropie des hétérogénéités, des maillages non structurés et le couplage entre l'écoulement et le transport. Ce schéma doit satisfaire le principe du maximum discret. Les principales difficultés rencontrées pour montrer la convergence du schéma combiné sont le couplage et la nature du schéma volumes finis utilisé (dont la performance dépend de la qualité du maillage et de l'approximation de la vitesse) ainsi que la prise en compte de l'anisotropie des hétérogénéités qui se traduit mathématiquement par la discontinuité des paramètres physiques. Les premiers schémas éléments finis mixtes-volumes finis développés sont dûs à [57] et [99] pour un écoulement diphasique mais sans aucun résultat de convergence. Toujours dans le cas diphasique, on trouve dans [5] un résultat de convergence pour une équation de convection-diffusion dégénéré sans prise en compte du couplage via le terme de convection et la viscosité. D'autres résultats de convergence pour un schéma combiné entre éléments finis mixtes et éléments finis discontinus ont été abordés dans [32] et [53]. Dans [10], on peut trouver un résultat de convergence d'un schéma éléments finis mixtes-volumes finis pour un système non linéaire de type parabolique-hyperbolique. Pour un problème modèle simplifié, des résultats de convergence, à l'aide d'estimations a priori, pour un schéma combiné entre une méthode éléments finis mixtes et des volumes finis pour un écoulement immiscible

1. Introduction

sont donnés dans [94]. Récemment, Ohlberger, [95], [94], [96] et [98], a présenté des résultats d'estimation a posteriori d'erreur, pour une équation de convection-diffusion non linéaire avec deux types de schémas volumes finis "vertex centred" et "cell centred". De plus dans [97] il a traité le système couplé entre une équation qui décrit l'écoulement (loi de Darcy) et une équation de transport. Pour approcher ce système, il a utilisé la méthode des éléments finis mixtes pour discrétiser l'équation régissant l'écoulement et un schéma volumes finis de type "vertex centred" implicite en temps, pour approcher l'équation du transport.

Le plan de ce mémoire est organisé comme suit :

Dans le **chapitre 2**, nous présentons le modèle mathématique décrivant l'écoulement et le transport en milieu poreux. Il revient d'abord sur la description du milieu poreux et ses caractéristiques physiques (porosité, viscosité, perméabilité...), il est ensuite consacré à la définition des lois de l'écoulement en milieu poreux et les mécanismes de transfert de matière. L'effet de l'hétérogénéité physique du milieu poreux sur le transport non conservatif est rappelé. Ces différents rappels nous permettent finalement de définir plus précisément le modèle mathématique régissant les écoulements miscibles et incompressibles en milieux poreux hétérogènes. Des résultats d'existence et d'unicité de la solution sont rappelés. Enfin nous présentons quelques notions sur les schémas volumes finis utilisés dans le cas d'un maillage structuré ou non structuré. Trois problèmes seront traités : problème hyperbolique, problème elliptique et problème de type convection-diffusion.

Le **chapitre 3** est consacré à l'analyse numérique d'un schéma combiné éléments finis mixtes et volumes finis. La méthode des éléments finis mixtes est utilisée pour discrétiser l'équation en vitesse-pression (1.1) et le schéma volumes finis est utilisé pour approcher l'équation de convection-diffusion-réaction (1.2). Le schéma volumes finis considéré est de type "vertex centred" semi-implicite en temps : explicite pour la convection et implicite pour la diffusion. On utilise un schéma de Godunov pour approcher le terme convectif et une approximation élément finis P_1 pour le terme de diffusion. Nous montrons des résultats de stabilité L^∞ , des estimations BV et le principe du maximum discret sous une condition CFL appropriée. On montre ensuite la convergence faible de la solution dans $L^\infty(Q)$ faible *, et par des résultats de compacité on a la convergence forte dans $L^2(Q)$. Afin de montrer la convergence de la solution couplée approchée, obtenue par le schéma combiné, vers la solution

1. Introduction

du problème (1.1)-(1.2), nous étudions tout d'abord un schéma découplé éléments finis mixtes, en donnant des résultats de convergence pour la solution mixte, enfin le processus de la convergence du schéma combiné est obtenu par passage à la limite dans la formulation variationnelle faible de l'équation discrète de (1.2) et par unicité de solution du problème continu (1.1)-(1.2).

Dans le **chapitre 4**, nous présentons des simulations numériques pour les schémas traités au chapitre 3 pour des maillages non structurés en 2D. Pour cela nous avons développé un code de calcul en 2 dimensions, **MFlow**, écrit en C++. Le code **MFlow** permet donc de résoudre un système couplé formé d'une équation elliptique (1.1) discrétisée par une méthode d'éléments finis mixtes hybrides et d'une équation parabolique linéaire de type diffusion-convection-réaction (1.2), discrétisée par une méthode de volumes finis de type "vertex centred" semi-implicite en temps. Pour la résolution des systèmes linéaires obtenus, le code **MFlow** utilise les procédures de la bibliothèque *LASPack*, où les solveurs sont LU, GC et GMERS avec des préconditionneurs ILU et SSOR. Dans le premier test, on valide notre code sur un domaine homogène isotrope. Le deuxième test est également académique, il s'agit d'une coupe 2D d'un réservoir fracturé fortement hétérogène avec un fort contraste de perméabilité. Dans le troisième test "Labyrinthe" [106], nous allons présenter des simulations numériques pour lesquelles le terme de convection domine le terme de diffusion dans l'équation de concentration. Comme tests réalistes, nous avons choisi l'exercice proposé par l'Andra Couplex1 ([25]) et l'exercice Franco-Allemand Regime proposé par l'IRSN et GRS. Ces deux tests rentrent dans le cadre de la modélisation de la migration de radionucléides autour d'un stockage en formations géologiques profondes. Le dernier test est consacré à l'étude par homogénéisation (par passage micro-macro) du comportement macroscopique du transport d'un soluté en milieux poreux hétérogène, en effectuant des simulations numériques sur un domaine périodique hétérogène et homogène.

Dans le **chapitre 5**, Nous étudions des estimateurs d'erreur *a posteriori* de type résiduel pour une équation de convection-diffusion-réaction pour un schéma VF de type "vertex centred" implicite en temps. Nous introduisons deux sortes d'indicateurs. Le premier est local en temps et en espace et constitue un excellent outil pour l'adaptation du maillage à chaque pas de temps. Le second est global en espace mais local en temps et peut être utilisé pour l'adaptation en temps. Nous mon-

1. Introduction

trons que l'erreur entre la solution exacte et la solution discrète en temps et en espace est bornée supérieurement par ces indicateurs d'erreurs et les données des problèmes. Nous obtenons ainsi des estimations *a posteriori* optimales. Ces résultats sont confirmés par des tests numériques d'adaptations de maillages qui donnent une bonne répartition des erreurs locales.

Enfin, en plus de la réalisation du code de calcul 2D, **MFlow**, décrit précédemment, nous avons participé à la réalisation de la plate-forme Homogenizer++. Dans le cadre du GdR MoMaS (Modélisations Mathématiques et Simulations numériques liées aux problèmes de gestion des déchets nucléaires : <http://momas.univ-lyon1.fr/>), une plate-forme, Homogenizer [9], de calcul numérique des coefficients effectifs obtenus par des méthodes asymptotiques d'homogénéisation de mise à l'échelle (perméabilité absolue, perméabilités relatives, pression capillaire, dispersion, etc.) pour des écoulements mono ou multiphasiques en milieux poreux a été développée. Cette plate-forme en Java est basée sur une Interface Homme Machine conviviale et utilisée comme un pré-processing à des simulations numériques d'écoulements en milieux poreux hétérogènes. L'enjeu du logiciel est de mettre à disposition des partenaires du GdR des outils informatiques de mise à l'échelle, simples à utiliser. Cette deuxième version, gratuite disponible sur <http://lma.univ-pau.fr/accueil/>. Elle est constituée de trois modules :

- Mise à l'Echelle des Perméabilités Absolues : ce module permet d'obtenir la perméabilité effective pour un écoulement monophasique ou diphasique miscibles ou immiscibles dans un milieu poreux hétérogène à un seul type de roche. Dans ce cas, le calcul des paramètres effectifs nécessite la résolution de problèmes locaux sur les mailles grossières. Pour ces modèles, ce sont des équations elliptiques du second ordre du type loi de Darcy. Ce module considère trois types de Conditions aux Bords (CB) : périodiques, linéaires (homogénéisation stochastique) et confinées. Les méthodes numériques utilisées sont de type Eléments Finis Conformés (EFC) et Eléments Finis Mixtes hybrides (EFM). Il permet d'obtenir les paramètres effectifs dans les cas suivants :- perméabilité absolue avec des CB périodiques en 2D et 3D par EFC.- perméabilité absolue avec des CB linéaires en 2D par EFC et EFM.- perméabilité absolue avec des CB confinées en 2D par EFC et EFM.- perméabilité absolue avec des CB périodiques en 2D par EFC pour un milieu fracturé.

1. Introduction

- Mise à l'Echelle des Permabilités Absolues et Relatives & Pressions Capillaires : Ce module développé par [24] permet d'obtenir les caractéristiques effectives pour des écoulements diphasiques. La version actuelle permet de traiter des problèmes en 2D et 3D, la discrétisation des problèmes locaux est réalisée par une méthode EFC.
- Mise à l'Echelle de la Dispersion : ce module développé par [8] permet le calcul numérique de la dispersion effective pour un modèle monophasique (cf. [23]). Dans ce cas, les problèmes locaux sont donnés par un système couplé faisant intervenir une équation elliptique et une équation de diffusion-convection. Une méthode des volumes finis est utilisée pour l'approximation numérique du système.

Notre contribution dans cette partie était de réunir les trois modules ensemble sous le même environnement en proposant une interface graphique, réaliser des tests de validation, rédiger un manuel d'utilisation et enfin l'installation de la plate-forme sur le serveur du Laboratoire de Mathématiques Appliquées de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour (<http://lma.univ-pau.fr/accueil/>).

Chapitre 2

Modélisation Mathématique et Numérique des Écoulements Miscibles en Milieu Poreux

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la description des équations qui modélisent des écoulements miscibles en milieux poreux hétérogènes. Ces équations sont liées à l'hydrodynamique d'écoulement et à la physico-chimie des milieux poreux. L'écoulement hydraulique est régi par la loi de Darcy et une équation de continuité (cf. [16]). Le transfert de masse qui est associé au mouvement de l'eau est décrit par l'équation classique de convection-diffusion-réaction. Le problème qui nous intéresse est donc modélisé par un système couplé composé d'une équation elliptique (écoulement : pression-vitesse) et d'une équation parabolique de type convection-diffusion-réaction (transport : concentration). Le modèle mathématique retenu prend en compte les hétérogénéités du milieu poreux. Notre objectif ici n'est pas d'étudier la théorie de l'hydrogéologie et le transfert, mais seulement d'en rappeler les lois de comportement de l'écoulement, ainsi que l'origine physique des paramètres (perméabilité, porosité, viscosité, ...) qui apparaissent dans le modèle mathématique que nous allons traiter dans la suite de ce travail. Pour une présentation complète de la théorie, le lecteur pourra se reporter par exemple à ([22], [87], [58], [17] et [19]).

2.1. Caractéristiques d'un milieu poreux

2.1 Caractéristiques d'un milieu poreux

2.1.1 Types d'eau

L'hydrodynamique considère deux types d'eau en milieu poreux saturé :

- l'eau de gravité qui représente la fraction mobile de l'eau du sol et contribue activement aux transferts de matière en solution et en suspension,
- l'eau de rétention, immobile, qui constitue le principal milieu réactionnel des phénomènes de solubilisation et insolubilisation organo-minérales.

L'eau de rétention est absorbée par la roche. Elle comprend l'eau hygroscopique et l'eau capillaire. L'eau gravitaire remplit l'espace libre des pores, obéit à la force de gravité et transmet la pression hydrostatique.

2.1.2 Masses volumiques

La masse volumique apparente humide, ou totale, d'un milieu poreux, est exprimée par :

$$\rho = \frac{M_t}{V_t},$$

où M_t est la masse totale du solide humide et V_t le volume total du solide humide. La masse volumique apparente sèche est le rapport de la masse sèche M_s et du volume total V_t :

$$\rho_a = \frac{M_s}{V_t}$$

La masse volumique réelle du solide est définie par :

$$\rho_s = \frac{M_s}{V_s},$$

où V_s est le volume de solide sec.

2.1.3 Porosité

Les eaux souterraines se trouvent dans les pores des sédiments et des roches, ou encore dans les fractures de la roche. On appelle porosité le volume des vides par rapport au volume total d'un matériau, roche ou sédiment. La porosité s'exprime en pourcentage. En hydrogéologie, on considère principalement la porosité efficace

2.2. Écoulement en milieu poreux

(ϕ_e) ou cinématique (ϕ_c), plutôt que la porosité totale (ϕ).

- La porosité efficace (ϕ_e) est le rapport du volume d'eau gravitaire, qu'un milieu poreux peut contenir en état de saturation puis libérer sous l'effet d'un drainage complet, à son volume total. Elle est exprimée en pourcentage.
- La porosité cinématique (ϕ_c) est le rapport de la vitesse de déplacement moyenne de l'eau en mouvement dans un milieu perméable, déterminée expérimentalement (notamment par traçage), à la vitesse de filtration (de Darcy). En fait il s'agit de la teneur en eau mobile ou du rapport entre le volume des vides, réellement parcourus par l'eau en mouvement, au volume total (saturé ou non saturé).

2.1.4 Perméabilité

La perméabilité est une caractéristique physique qui représente la facilité qu'a un matériau à permettre le transfert de fluide au travers d'un réseau connecté, sous l'action d'un gradient hydraulique. Elle exprime la résistance du milieu à l'écoulement de l'eau qui le traverse, par l'influence de la viscosité. Elle est reliée à la dimension et la connection des pores entre eux. Elle est définie par la loi de Darcy sous la forme suivante :

$$k = \frac{Q\mu}{A(\Delta p/\Delta s)} \quad (2.1)$$

où

Q : le débit du fluide qui s'écoule [L^3T^{-1}],

μ : la viscosité du fluide [$ML^{-1}T^{-1}$],

A : l'aire de la section traversée par le fluide [L^2],

$\Delta p/\Delta s$: la variation de la pression par unité de longueur, [$ML^{-2}T^{-2}$].

Cette quantité représente le volume d'eau gravitaire [L^3] traversant en une unité de temps une unité de section [L^2] orthogonale à la direction de l'écoulement sous l'effet d'une unité de gradient hydraulique. Elle a la dimension d'une vitesse.

2.2 Écoulement en milieu poreux

Avant de donner les différentes lois qui régissent le comportement du fluide en mouvement, nous allons tout d'abord décrire macroscopiquement un milieu poreux.

2.2. Écoulement en milieu poreux

2.2.1 Milieu poreux

Un milieu poreux est un assemblage de grains séparés par des vides, qui porte une forte densité des hétérogénéités. Ces vides et ces grains sont petits à l'échelle réelle. Dans le cas où la distinction entre les grains et les vides ne peut se faire qu'à l'échelle microscopique, le milieu est qualifié de milieu finement divisé. Dans ce type de situation, le milieu poreux constitue une très grande partie des aquifères. A l'opposé, on trouve une autre catégorie qu'on appelle milieu fracturé, où la description de ce dernier permet de distinguer d'une façon claire la matrice rocheuse et les vides éventuellement occupés par l'eau : ce sera le cas des milieux peu fissurés. Cette notion est liée à celle de Volume Élémentaire Représentatif (VER). En effet, les composites d'un milieu poreux sont, bien entendu, des matériaux hétérogènes. Lors de la détermination des propriétés du composite, la prise en compte de l'ensemble de ces hétérogénéités constitue une tâche insurmontable. Il s'avère donc indispensable d'idéaliser le milieu en le considérant comme continu et donc en moyennant ses propriétés à une certaine échelle en fonction de la microstructure. On parle alors d'homogénéisation du composite et les propriétés sont moyennées sur un VER. Ce dernier doit être suffisamment petit pour prendre en compte la structure microscopique du matériau et suffisamment grand pour décrire le comportement global du matériau. Pour les formations géologiques rencontrées on peut citer :

- les formations dites perméables qui constituent les aquifères et qui autorisent une circulation aisée de l'eau de telle sorte qu'il soit envisageable de la mobiliser grâce à des captages,
- les formations dites imperméables qui, bien que pouvant contenir une grande quantité de fluide, n'en permettent que très difficilement la mobilisation,
- les formations de type intermédiaire, souvent qualifiées de semi-perméables, dans lesquelles l'eau est localement difficilement mobilisable, mais à travers lesquelles des transferts sont possibles à l'échelle locale entre les formations aquifères.

2.2. Écoulement en milieu poreux

2.2.2 Principe de conservation de la masse

La conservation de la masse du fluide en mouvement sur chaque VER est exprimée par l'équation dite équation de continuité :

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} + \text{div}(\rho\vec{q}) = \rho f, \quad (2.2)$$

qui met en jeu les grandeurs macroscopiques suivantes :

- ρ : masse volumique de l'eau [ML^{-3}],
- ϕ : porosité totale (sans dimension),
- f : débit volumique d'eau prélevée (ou injectée) par unité de volume de VER [T^{-1}],
- \vec{q} : vitesse de filtration de l'écoulement (vitesse de Darcy) [LT^{-1}] exprimant la vitesse fictive d'un fluide qui percolerait à travers le milieu en occupant l'espace (pores + grains) au lieu de n'occuper que les vides.

Si le milieu poreux est indéformable, la porosité ϕ est indépendante du temps et si on suppose que la masse volumique ρ ne dépend que de la pression p , on a

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = \frac{\partial(\phi\rho)}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{s}{g} \frac{\partial p}{\partial t},$$

où $s = g \frac{\partial(\phi\rho)}{\partial p}$ [L^{-1}] est le coefficient d'emmagasinement spécifique qui représente la capacité du milieu poreux à libérer du fluide sous l'effet d'une diminution de la pression et g est l'accélération de la pesanteur [LT^{-2}].

En introduisant cette dernière expression dans l'équation (2.2), on obtient une forme de l'équation de continuité en fonction de la pression. Si l'on admet que la variation spatiale de la masse volumique est négligeable, en simplifiant par ρ , l'équation de continuité (2.2) se simplifie, donc, et s'écrit sous la forme :

$$s \frac{\partial h}{\partial t} + \text{div}(\vec{q}) = f, \quad (2.3)$$

où h est la charge hydraulique liée à la pression p par (cf. [16]) :

$$p = \rho g(h - z),$$

2.2. Écoulement en milieu poreux

où z est la cote définie selon un axe vertical ascendant [L].

L'équation (2.3) est la forme la plus courante de l'équation de continuité. Elle permet de lier la variation temporelle de la charge et la variation spatiale de la vitesse de Darcy. En régime permanent, la charge ne varie pas avec le temps. L'équation (2.3) se réduit sous la forme :

$$\operatorname{div}(\vec{q}) = f. \quad (2.4)$$

2.2.3 Equation du mouvement : loi de Darcy

La loi de Darcy issue de l'expérience de Henri Darcy en 1856 exprime, dans le cadre du modèle macroscopique, la relation fondamentale de la mécanique des fluides. Elle exprime la vitesse de filtration en régime permanent ou transitoire en fonction du gradient de la charge hydraulique. Pour un fluide compressible, la formulation la plus courante en hydrogéologie revêt la forme suivante :

$$\vec{q} = -\frac{k}{\mu}(\nabla p + \rho g \nabla z), \quad (2.5)$$

où

\vec{q} : la vitesse de Darcy [LT^{-1}],

μ : la viscosité dynamique du fluide [$ML^{-1}T^{-1}$],

k : la perméabilité intrinsèque du milieu [L^2],

p : la pression [$ML^{-1}T^{-2}$],

ρ : la masse volumique du fluide [L^2],

g : l'accélération de la pesanteur [LT^{-2}],

z : la cote définie selon un axe vertical ascendant [L].

On note par h la charge hydraulique macroscopique définie par la relation $h = \frac{p}{\rho g} + z$. Lorsque la masse volumique ρ peut être considérée comme constante, la charge s'identifie au niveau piézométrique. La charge attachée à un VER est alors matérialisée par la cote de la surface libre de l'eau dans un tube ouvert dont l'orifice inférieur pénètre dans ce VER (piézomètre). La cartographie du champ h au sein d'un aquifère constitue la carte piézométrique d'une nappe. La charge, ou niveau piézométrique, s'exprime habituellement en mètres d'eau. La loi de Darcy (4.1) se réécrit sous la forme simple :

$$\vec{q} = -K \nabla h, \quad (2.6)$$

2.3. Transfert de matière

où $K = \frac{k\rho g}{\mu} [LT^{-1}]$ est le coefficient de conductivité hydraulique ou perméabilité du milieu poreux relativement à l'écoulement d'un fluide donné (l'eau dans le cas qui nous intéresse). Dans le cas où le milieu poreux est isotrope ou bien si l'écoulement est unidirectionnel les perméabilités sont des scalaires. Dans le but de rendre compte l'anisotropie du milieu poreux, la perméabilité est considérée comme un tenseur symétrique.

Les deux équations (2.4) et (2.6) constituent la base de la plupart des modèles d'écoulement en milieu poreux lorsque la masse volumique du fluide est supposée constante et uniforme.

2.3 Transfert de matière

Les mécanismes fondamentaux de transfert de la matière sont la convection, la dispersion et l'interaction entre la fraction mobile et la fraction immobile du milieu (à ce propos voir [50]). Il y a deux types de transports : conservatif et non conservatif. Le transport conservatif d'une espèce met en oeuvre les mécanismes de convection et dispersion en respectant la loi de conservation de la matière : aucune molécule du soluté n'est retenue lors de son passage dans le sol. Le caractère non conservatif du transport est lié aux mécanismes d'interactions entre la phase immobile (matrice solide et eau liée) et les éléments transportés (pour plus de détails voir [87]). Ce qui conduit à introduire un terme source/puits dans la loi de conservation de la matière au cours du transport. Ce terme traduit l'effet des mécanismes d'interactions en exprimant de manière globale les phénomènes de sorption.

2.3.1 Mécanismes de convection

La convection est le déplacement des particules sous l'influence du mouvement du milieu dont celles-ci font partie. Le mouvement du milieu peut être dû à un gradient thermique ou mécanique. Dans notre cas, la loi de Darcy décrit le transport de soluté par le mouvement général de l'eau en zone saturée à la vitesse constante \vec{q} . Le flux convectif du soluté (au travers d'une surface unitaire perpendiculaire au sens de l'écoulement) s'exprime par le produit de la concentration c et de la vitesse de

2.3. Transfert de matière

déplacement \vec{q} :

$$\mathcal{F}_c = \vec{q}c$$

où $c [ML^{-3}]$ est la concentration du soluté en solution, *i.e.*, rapport de la quantité de soluté exprimée dans une unité quelconque au volume du liquide.

2.3.2 Mécanismes de dispersion-diffusion

La dispersion recouvre l'ensemble des phénomènes mécaniques et physico-chimiques provoquant l'éloignement dans le temps et dans l'espace de particules initialement voisines. En milieu poreux, on distingue dans les mécanismes de dispersion liés au déplacement d'une solution

- la diffusion moléculaire ;
- la dispersion cinématique.

La diffusion moléculaire est un phénomène physique provenant de l'agitation moléculaire. Elle est liée aux caractéristiques du produit en solution. La dispersion cinématique exprime la non uniformité de la distribution de vitesse d'un fluide s'écoulant à travers un milieu poreux. Elle dépend des caractéristiques de l'écoulement.

Diffusion moléculaire :

Sous l'influence de l'agitation moléculaire, les particules migrent des zones de fortes concentrations vers les zones de faibles concentrations. Pour un milieu liquide immobile, les atomes ou les molécules d'un élément ou d'un composé chimique, dissous dans ce milieu, sont soumis au phénomène de diffusion, qui transforme une hétérogénéité locale de concentration en une concentration homogène dans tout le milieu considéré. Dans un sol saturé, la diffusion est le mécanisme qui stocke, réversiblement, dans des compartiments où l'eau est immobile et piégée, des ions, qui, par ailleurs, circulent rapidement dans des pores continus. Ce phénomène engendre un flux de matière décrit par la loi de *Fick*. Cette loi exprime le fait que le flux de matière transportée par unité de surface, $\mathcal{F}_d [ML^{-2}T^{-1}]$, est proportionnel au gradient de concentration de la substance. Ce flux est mesuré normalement à la surface et il est donné par :

$$\mathcal{F}_d = -D_{mol} \nabla c, \quad (2.7)$$

où

- D_{mol} : le coefficient de diffusion moléculaire en phase fluide [L^2T^{-1}]

2.3. Transfert de matière

- c : la concentration massique [ML^{-3}].

Le signe négatif dans l'équation (2.7) montre que la diffusion a lieu dans la direction opposée au gradient de la concentration. Ceci constitue la première loi de *Fick*. En milieu poreux, on admet généralement que la même loi s'applique.

Dispersion cinématique :

Contrairement à la diffusion, qui se produit par l'agitation thermique des particules dont la solution tend à une homogénéisation de la concentration, même si le solvant est macroscopiquement immobile (l'absence de mouvement convectif), la dispersion est l'ensemble des phénomènes qui contribuent au déplacement relatif, les uns par rapport aux autres, des molécules des corps dissous (ou en suspension), quand le solvant (fluide vecteur) est en mouvement. Le milieu poreux lui-même (ainsi que ses caractéristiques géométriques, physiques et chimiques) est l'un des paramètres globaux qui influencent le système dispersif. En effet, les hétérogénéités microscopiques de la vitesse des parcelles fluides circulant au sein du VER, qui sont négligées par la présentation macroscopique de l'écoulement selon la loi de Darcy, contribuent également au mélange, et ceci d'autant plus que le mouvement convectif est important. On admet généralement que D_{cin} est proportionnel à la vitesse interstitielle de l'eau :

$$D_{cin} = \lambda |\vec{v}|, \quad (2.8)$$

où

- \vec{v} : la vitesse interstitielle ou vitesse de pores [LT^{-1}], définie par :

$$\vec{v} = \frac{\vec{q}}{\phi_c}, \quad (2.9)$$

- λ : la dispersivité [L], coefficient déterminé de manière empirique.

Il est possible de modéliser la dispersion totale en exprimant (loi de Fick) que le flux dispersif \mathcal{F}_D est proportionnel au gradient de concentration du soluté :

$$\mathcal{F}_D = -D_d \nabla c \quad (2.10)$$

où $D_d = D_{cin} + D_{mol}$ est le coefficient de dispersion hydraulique [L^2T^{-1}].

La vitesse interstitielle de l'eau n'est qu'une valeur moyenne sur un VER à l'échelle du pore, plusieurs phénomènes peuvent intervenir pour varier localement cette vi-

2.4. Modèles de transfert

tesse. Les filets fluides doivent contourner les grains par des cheminements de longueurs différentes, ce qui crée des avances ou des retards de certaines particules par rapport à la vitesse moyenne, d'où une dispersion longitudinale et un étalement transversal des trajectoires (dispersion transversale). Le caractère anisotrope du phénomène est pris en compte par une forme tensorielle du coefficient de dispersion. En tenant compte de ces paramètres, le tenseur de dispersion hydraulique s'écrit (voir, p.e., [17]) sous la forme suivante :

$$D_d = |\vec{q}| \begin{bmatrix} \alpha_L & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_T & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_T \end{bmatrix} + d\phi I, \quad (2.11)$$

où α_L [L] et α_T [L] sont les dispersivités intrinsèques longitudinale et transversale respectivement. Le second terme correspond à la diffusion moléculaire. Il est utile de rappeler que, dans la plupart des cas lors d'études de transfert de solutés, la diffusion moléculaire est négligeable par rapport à la dispersion cinématique.

2.4 Modèles de transfert

Comme on l'a déjà signalé dans le paragraphe précédent, il y a deux types de transfert, à savoir conservatif et non conservatif. Nous présentons ici les équations correspondant à chaque cas.

2.4.1 Transport conservatif

Le flux total du soluté dû aux mécanismes physiques de transport conservatif (ou non réactif), qui sont la convection et la dispersion, s'écrit sous la forme :

$$\mathcal{F}_T = \mathcal{F}_C + \mathcal{F}_D = \vec{q}c - (D_d \nabla c). \quad (2.12)$$

Il est à noter que la décomposition du transfert en terme convectif, représentant le déplacement moyen, et en terme dispersif, intégrant les effets des hétérogénéités, est arbitraire. Le rôle respectif de chacun des termes dépend essentiellement du degré

2.4. Modèles de transfert

de finesse avec lequel le milieu poreux peut être décrit (voir [75] et [87] pour plus de détails).

Le principe de continuité s'exprime :

$$\frac{\partial(\phi_c c)}{\partial t} + \text{div}(\mathcal{F}_T) = 0. \quad (2.13)$$

Cette équation est dite équation de convection-dispersion.

2.4.2 Transport non-conservatif

Les mécanismes d'interactions entre la phase immobile (matrice solide et eau liée) et les éléments transportés peuvent rendre la migration des solutés au sein du milieu poreux non conservative ou réactive. Il convient alors d'introduire un terme source/puits dans la loi de conservation de la matière au cours du transport. Le terme source traduit l'effet des mécanismes d'interaction en exprimant de manière globale les phénomènes de sorption :

$$\frac{\partial(\phi_c c)}{\partial t} + \text{div}(\mathcal{F}_T) = f_s, \quad (2.14)$$

où f_s est le terme source.

Interactions physico-chimiques :

Durant la migration des solutés, certains éléments peuvent se fixer sur les particules minérales (phénomène de sorption). Ce phénomène ralentit le déplacement des contaminants. La sorption peut être prise en compte par l'introduction d'un coefficient de retard qui correspond à un coefficient multiplicateur du temps de transfert. Dans le cas où la sorption est réversible, instantanée et suit une loi linéaire en fonction de la concentration, le coefficient de retard est défini de la manière suivante :

$$R = 1 + \frac{1 - \phi}{\phi_c} \rho_s K_d$$

où $(1 - \phi)\rho_c$ est la masse de solides dans une unité de volume du milieu poreux et K_d le coefficient de distribution, il est fonction du contaminant et de la nature du milieu poreux. On note que $R \geq 1$ et s'il n'y a pas de sorption alors $R = 1$. On introduit le coefficient de retard dans l'équation (2.14) on trouve :

2.5. Conditions aux limites et conditions initiales

$$\phi_c R \frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div} (-D_d \vec{q} \cdot \nabla c + \vec{q}c) = f_s. \quad (2.15)$$

Décroissance radioactive :

Par unité de volume de la masse liquide, une masse égale à Lc de noyaux radioactifs disparaît, L étant la constante de décroissance radioactive. Pour ramener cette masse à l'unité de volume du milieu poreux, on la multiplie par la porosité ϕ_c . Comme il y a aussi désintégration des noyaux qui ont été adsorbés, la masse est de plus multipliée par le coefficient de retard R . Si on prend en compte la décroissance radioactive dans l'équation (2.15), on obtient :

$$\phi_c R \frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div} (-D_d \vec{q} \cdot \nabla c + \vec{q}c) + L\phi_c R c = f_s. \quad (2.16)$$

2.5 Conditions aux limites et conditions initiales

Dans le cadre de nos préoccupations, notre problème est modélisé par un système composé d'une équation elliptique et d'une équation parabolique sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \vec{q} = -\frac{K(x)}{\mu} \nabla p \\ \operatorname{div} \vec{q} = 0 \end{cases} \quad (2.17)$$

$$\Phi(x) \frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div} (D(x, \vec{q}) \nabla c - c\vec{q}) + R(x)c = f_s(x, t) \quad (2.18)$$

La description des conditions aux limites et des conditions initiales permet la fermeture de ce problème, en donne un sens physique de la structure et en conditionne fortement la validité. Par exemple le bilan d'un aquifère ou d'un réservoir s'établit toujours à travers les limites. Donc il est avantageux pour la représentativité du modèle que les limites du domaine d'étude coïncident avec des limites physiques où la description des flux puisse être effectuée de manière conceptuelle à partir des observations sur le terrain. Ici, pour étudier le problème (2.17) et (2.18), il faut spécifier les conditions aux limites et initiales pour les modèles d'écoulement (2.17) et pour le modèle de transfert de matière (2.18).

2.5. Conditions aux limites et conditions initiales

2.5.1 Cas des modèles de l'écoulement

Pour étudier les équations décrivant l'écoulement il faut donner les caractéristiques qui expriment l'état initial ($t=0$) et les conditions aux limites associées. Il y a deux types de conditions aux limites à regarder qu'il est possible de combiner entre elles :

- Condition de Dirichlet : la pression est imposée sur les frontières concernées :

$$p(x, t) = p_0(x, t), \quad (2.19)$$

où p_0 est une fonction connue.

Ce type de condition aux limites est, en général, nécessaire pour assurer l'unicité de la solution. Les situations naturelles qu'on peut trouver pour ce genre de conditions, sont variées et concernent plusieurs degrés d'échelle de la modélisation. Il peut s'agir d'un plan d'eau libre (lac, réservoir, cours d'eau, etc.), d'un contact de la nappe avec une rivière, d'un seuil autorisant le déversement d'une nappe (source).

- Conditions de Neumann : Il s'agit d'imposer des débits à la frontière. Elles s'expriment par :

$$\vec{q} \cdot \vec{n} = q_0(x, t), \quad (2.20)$$

où \vec{n} est la normale unitaire à la frontière, q_0 est une fonction connue. Ces conditions peuvent être : des puits d'injection, de production ou de prélèvement à travers les frontières, un flux nul au long d'une partie imperméable.

- Conditions mixtes : pression imposée avec limitation du débit. L'existence d'une condition de pression imposée peut créer un échange de flux quelconque entre l'aquifère et le milieu extérieur, ce qui peut, dans certains cas, ne pas correspondre au comportement réel du système. Dans ce cas le flux aux limites est décrit en fonction de la pression, sous la forme combinée :

$$\vec{q} \cdot \vec{n} = g_F(x, t)p + f_F(x, t), \quad (2.21)$$

où f_F et g_F sont des fonctions connues.

2.6. Modèle mathématique

2.5.2 Cas des modèles de transfert

Dans notre cas, les conditions aux limites associées au problème de transfert peuvent être :

- conditions de Dirichlet : concentration imposée ($c(x_0, t) = c_0$),
 - conditions de Neumann : flux dispersif imposé ($D(x, t)\nabla c \cdot \vec{n} = c_1$) sur γ_1),
 - conditions mixtes : flux total imposé ($D(x, t)\nabla c \cdot \vec{n} + \vec{q} \cdot \vec{n}c = c_2$ sur γ_2),
- et les conditions initiales sont données pour c à ($t = 0$).

2.6 Modèle mathématique

Nous décrivons ici le modèle mathématique que nous allons traiter par la suite. Soit Ω un ouvert polygonal de frontière $\partial\Omega = \Gamma$ et $J =]0, T[$. On s'intéresse au modèle d'écoulements miscibles en milieux poreux donné par le système suivant :

Equation en vitesse-pression :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{q} = -\frac{K(x)}{\mu(c)} \nabla p & \text{dans } \Omega \times]0, T[\\ \operatorname{div} \vec{q} = 0 & \text{dans } \Omega \times]0, T[\\ \vec{q} \cdot \vec{n}|_{\Gamma_1} = -q_0; \quad \vec{q} \cdot \vec{n}|_{\Gamma_2} = 0; \quad p|_{\Gamma_3} = p_0 & \text{sur }]0, T[\end{array} \right. \quad (2.22)$$

Equation en concentration :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Phi(x) \frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div} (D(x, \vec{q}) \nabla c - c\vec{q}) + R(x)c = f(x, t) & \text{dans } \Omega \times]0, T[\\ c|_{\Gamma_1} = c_1; \quad D\nabla c \cdot \vec{n}|_{\Gamma_2} = 0; \quad (D\nabla c - c\vec{q}) \cdot \vec{n}|_{\Gamma_3} = c_2 & \text{sur }]0, T[\\ c(x, 0) = c_0(x) & \text{sur } \Omega \end{array} \right. \quad (2.23)$$

où la frontière Γ est composée de trois parties telles que $\Gamma = \bar{\Gamma}_1 \cup \bar{\Gamma}_2 \cup \bar{\Gamma}_3$, p et \vec{q} sont la pression et la vitesse de Darcy du fluide, Φ et K sont la porosité cinématique et la perméabilité absolue du milieu poreux. La viscosité du fluide μ est une fonction non linéaire de la concentration c de la phase et elle peut s'écrire sous la forme suivante : $\mu(c) = \mu(0)(1 + (M^{1/4} - 1)c)^{-4}$, $c \in [0, 1]$, où $M = \frac{\mu(0)}{\mu(1)}$ est le rapport de mobilité. f est le terme source et R est le facteur de retard. q_0 est le flux imposé sur Γ_1 et p_0 est la pression donnée sur Γ_3 . c_1 est la concentration donnée sur Γ_1 , c_2 est le flux total donné sur Γ_3 . c_0 est la concentration initiale. Le tenseur de diffusion-dispersion D

2.7. Existence et unicité de solution

est donné par :

$$D(x, \vec{q}) = d_e I + |\vec{q}|[\alpha_l E(\vec{q}) + \alpha_t (I - E(\vec{q}))]$$

avec $E_{ij}(\vec{q}) = \frac{q_i q_j}{|\vec{q}|^2}$, d_e est le coefficient de la diffusion moléculaire effective, α_l et α_t sont les dispersivités intrinsèques longitudinale et transversale respectivement.

2.7 Existence et unicité de solution

De nombreux auteurs se sont intéressés à l'analyse mathématique du modèle d'écoulements miscibles décrit dans le paragraphe précédent. Dans ce qui suit nous donnons quelques références. Dans le cas monodimensionnel, on trouve dans [104] un résultat d'existence et unicité, en supposant que la viscosité du fluide ne dépend pas de la concentration. Une extension en trois dimensions a été traitée par [89] mais dans le cas stationnaire. Nous référons à [66] et [65] pour d'autres résultats d'existence et unicité. En tenant compte du couplage via la viscosité qui dépend de la concentration, un résultat d'existence et unicité est donné dans [70] mais seulement en deux dimensions. Tous les résultats théoriques obtenus dans [104], [89] et [70] sont étudiés avec des conditions aux bords de type Neumann homogène et sans effets de la gravité. En se basant sur le travail effectué dans [7] pour un système elliptique-parabolique quasi-linéaire, l'existence d'une solution faible avec des conditions aux bords variées et en tenant compte de l'effet de la gravité a été montré dans [36].

Formulation variationnelle du problème (2.22)-(2.23) :

Tout d'abord, nous rappelons les hypothèses suivantes pour avoir l'existence d'une solution faible du problème (2.22)-(2.23).

- (H₁) Ω est un ouvert borné polygonal de \mathbb{R}^d , $1 \leq d \leq 3$, $Q = \Omega \times]0, T[$.
- (H₂) $\Phi \in L^\infty(\Omega)$, $0 < \Phi_- \leq \Phi(x) \leq \Phi^+ \leq 1$ p.p. dans Ω .
- (H₃) $c_0 \in L^\infty(\Omega)$, $0 \leq c_0(x) \leq 1$ p.p. dans Ω , $R \in L^\infty(\Omega)$, $R(x) \geq 0$ p.p. dans Ω .
- (H₄) D et K sont des tenseurs uniformément bornés, symétriques et définis positifs.
- (H₅) $\vec{q} \in H(\text{div}, \Omega)$, $\vec{q} \in (L^\infty(\Omega))^d$ p.p. dans $]0, T[$.
- (H₆) $f \in L^\infty[J, L^2(Q)]$, $f(x, t) \geq 0$ p.p. dans Q .
- (H₇) μ est une fonction continue lipschitzienne telle que, $0 < \mu_- \leq \mu(c) \leq \mu^+$,
- (H₈) si $\Gamma_3 = \emptyset$, alors $\int_{\Gamma_1} q_0 ds = 0$.

2.8. Quelques références bibliographiques sur les méthodes numériques

(H₉) $q_0 \in L^\infty[J, H^{-1/2}(\Gamma_1)]$, $p_0 \in L^\infty[J, H^1(\Omega)]$, $c_1 \in L^2[J, W^{1,4}(\Omega)]$, $c_2 \in L^2[J, H^{-1/2}(\Gamma_3)]$, $0 \leq c_1, c_2 \leq 1$.

On note par X_0 , V et W les trois espaces suivants :

$$X_0 = \{ \vec{s} \in H(\text{div}, \Omega); \vec{s} \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_2 \} \quad (2.24)$$

$$V = \left\{ v \in H^1(\Omega); v|_{\Gamma_3} = 0, \text{ si } \Gamma_2 = \emptyset \int_{\Omega} v dx = 0 \right\} \quad (2.25)$$

$$W = \{ v \in H^1(\Omega), v|_{\Gamma_3} = 0 \}, \quad (2.26)$$

Théorème 2.1 *Sous les hypothèses (H₁) – (H₉), le système (2.22)-(2.23) admet une solution faible (p, \vec{q}, c) qui vérifie la formulation variationnelle suivante :*

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} K^{-1}(x) \mu(c) \vec{q} \cdot \vec{s} d\Omega - \int_{\Omega} p \text{ div } \vec{s} d\Omega &= - \int_{\Gamma_3} p_0 \vec{s} \cdot \vec{n} ds \quad \forall \vec{s} \in L^\infty[J, X_0] \\ \int_{\Omega} v \text{ div } \vec{q} d\Omega &= 0 \quad \forall v \in L^\infty[J, L^2(\Omega)] \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \int_Q -[\phi c v_t + (c \vec{q} - D(x, \vec{q}) \nabla c) \cdot \nabla v] dt dx + \int_Q R v dx dt &= \\ \int_Q f v dx dt - \int_{\Omega} \phi c_0 v dx & \quad \forall v \in L^2[J, W(\vec{q})] \end{aligned} \quad (2.28)$$

où $W(\vec{q})$ est défini par :

$$W(\vec{q}) = \{ v \in W; (D(\vec{q}) \nabla v, \nabla v) < +\infty \}. \quad (2.29)$$

Preuve : Voir ([36], Théorème 2.1).

2.8 Quelques références bibliographiques sur les méthodes numériques

L'approximation numérique des équations aux dérivées partielles (edp) modélisant les écoulements miscibles en milieux poreux est un problème important en pratique. Plusieurs méthodes numériques peuvent être utilisées pour résoudre ces équations. Parmi les premiers schémas développés, on peut citer les différences finis (DF) et les éléments finis (EF) (voir, p.e., [103], [110], [52], [12]). Ces schémas sont peu satisfaisants car ils sont non conservatifs. De manière précise, il n'y a pas de conservation

2.8. Quelques références bibliographiques sur les méthodes numériques

de flux au niveau de l'élément. Ces schémas sont en effet conçus pour résoudre le problème en donnant comme résultat la fonction d'état, par exemple dans le problème qui nous intéresse, la pression. La vitesse de l'écoulement est donc déduite par différenciation de la variable d'état. Ceci génère des erreurs supplémentaires notamment en milieu fortement hétérogène. Comme l'équation en pression-vitesse et l'équation en concentration sont couplées via le terme de convection, une bonne approximation de la vitesse est indispensable dans la simulation numérique du transport. D'où l'apparition des méthodes éléments finis mixtes (EFM) (cf. [88], [100], [93], [92], [54], [53], [55] et [27]) qui utilisent des formulations avec les deux inconnues (pression et vitesse) pallient à ce type d'insuffisance. La contrepartie de ces avantages réside, d'une part, dans l'accroissement substantiel du nombre d'inconnues, et d'autre part, dans le fait que le système final à résoudre n'est plus à matrice symétrique définie positive mais correspond à la détermination d'un point selle. En effet, lorsque nous abordons l'écoulement hydraulique en régime permanent, l'équation edp à traiter est une équation elliptique. L'utilisation de la méthode des EFM associée à un espace de Raviart-Thomas de plus bas degré (RT_0) pour discrétiser l'équation elliptique mène à la résolution d'un système linéaire dont la matrice associée n'est pas définie positive (cf. [27]). L'une des approches utilisées pour ramener la résolution à celle d'un problème à matrice symétrique définie positive, consiste à dualiser les conditions de raccord des flux. Il s'agit d'introduire des multiplicateurs de Lagrange sur les arêtes pour obtenir la continuité des flux normaux à travers les interéléments. On obtient ainsi les méthodes des éléments finis mixtes hybrides (EFMH) (cf. [34], [101] et [27]). Cette méthode est considérée comme méthode des éléments finis non-conformes. Cette technique réduit la formulation mixte, où les inconnues sont la pression et la vitesse, à une formulation primale dont la seule inconnue est le vecteur des multiplicateurs de Lagrange. Dans le cas d'une discrétisation rectangulaire et d'un tenseur de perméabilité diagonal, le travail effectué dans [103] montre qu'en utilisant des formules spéciales pour l'intégration numérique, la méthode des EFM se réduit au schéma des DF. Dans le cas d'un maillage triangulaire, une nouvelle formulation mixte sans l'utilisation de formules d'intégration numérique, qui est équivalente à la méthode des EFMH, a été développée dans [111]. D'autres études comparatives entre les méthodes EFM et EFMH ont été abordées dans [34] (pour un maillage rectangulaire) et dans [12] (pour

2.8. Quelques références bibliographiques sur les méthodes numériques

un maillage triangulaire). Une étude comparative du comportement numérique de deux formulations EFM et EFMH a été traitée dans [81] en montrant que la méthode des EFMH ne vérifie pas le principe du maximum discret, ce qui induit sous certains hypothèses des résultats de calcul présentant des oscillations non physiques. La première solution pour remédier à ce problème est un raffinement global ou local du maillage. La deuxième idée est de trouver des méthodes d'intégrations adéquates pour réduire la méthode des EFMH à un schéma des volumes finis (VF) et dans les deux cas le principe du maximum est respecté.

Les méthodes des VF sont actuellement les plus utilisées pour la résolution numérique des edp issues des lois de conservation physiques. Elles consistent à discrétiser sur chaque cellule, appelée volume de contrôle, la forme intégrale du problème à résoudre à la place de sa forme différentielle considérée en différences finies. La connaissance d'un tel schéma volumes finis repose donc sur l'approche des flux d'une manière à avoir la consistance et la conservation. L'avantage de ces méthodes réside dans leurs facilités d'adaptation aux géométries complexes comme c'est le cas dans de nombreux problèmes industriels. De plus, elles permettent de prendre en compte la présence des hétérogénéités et de traiter de façon naturelle les conditions aux limites. Ces méthodes permettent de préserver des propriétés physiques intéressantes : conservation des flux élément par élément avec une stabilité numérique et une diffusion numérique minimales et respect du principe du maximum discret, (voir, p.e., [83], [5], [6], [10], [28], [62], [94], [77] et [64]). Une équation venant d'une loi de conservation a donc de bonnes chances de se trouver correctement discrétisée par une méthode des VF. Cette dernière exige de définir avec soin un maillage dual associé à un maillage primal (qui peut être triangulaire ou quadrilatéral structuré ou non). Ceci donne l'idée de base du principe des VF ; comme leur définition précise est délicate et dépend de l'équation étudiée (la manière dont on partitionne Ω en petits volumes de contrôles dépend de la nature de l'équation : hyperbolique, elliptique, parabolique, ...), nous donnons dans ce qui suit différents maillages duaux utilisés dans le cas structuré ou non structuré et ensuite nous présentons quelques schémas VF utilisés dans la littérature pour trois problèmes différents : problème hyperbolique, problème elliptique et un problème de type convection-diffusion.

2.8. Quelques références bibliographiques sur les méthodes numériques

2.8.1 Maillages duaux dans le cas structuré

Dans ce paragraphe, on s'intéresse à des discrétisations par volumes finis avec des maillages structurés. Tout d'abord nous introduisons les notations suivantes : soit $\mathcal{J}_h = \{t_0, \dots, t_N\}$ une partition de $J = [0, T]$, $\Delta t^n = t_{n+1} - t_n$ le pas de temps et $\Delta t = \max_n \Delta t^n$. $\mathcal{Q}_h := (M_{ij})$ une partition rectangulaire de $\bar{\Omega}$, où $M_{ij} = I_i \times I_j$, pour $i = 1, \dots, N_x$ et $j = 1, \dots, N_y$. Ensuite, on désigne par $\mathcal{I}_h = \{(x_i, y_j); i = 1, \dots, N_x \text{ et } j = 1, \dots, N_y\}$ l'ensemble des sommets dans \mathcal{Q}_h . Maintenant pour construire le maillage dual, on distingue deux types : "cell vertex" et "cell centred". La première technique se définit comme indiqué dans la Figure 2.1. Les points de discrétisation forment naturellement un espace d'éléments finis, $Q_1([x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}])$, puisque ces points de discrétisations définissent les rectangles $[x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}]$. Les volumes de contrôle sont les cellules duales des points de discrétisation, c'est-à-dire les rectangles $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [y_{j-1/2}, y_{j+1/2}]$. Les points $x_{i+1/2}$ et $y_{j+1/2}$ sont les milieux des arêtes $[x_i, x_{i+1}]$ et $[y_j, y_{j+1}]$ respectivement. Dans le cas d'un problème purement diffusif, le schéma s'exprime comme un schéma éléments finis où les fonctions tests sont constantes par morceaux sur les volumes de contrôle M_{ij} (voir, p.e., [91]).

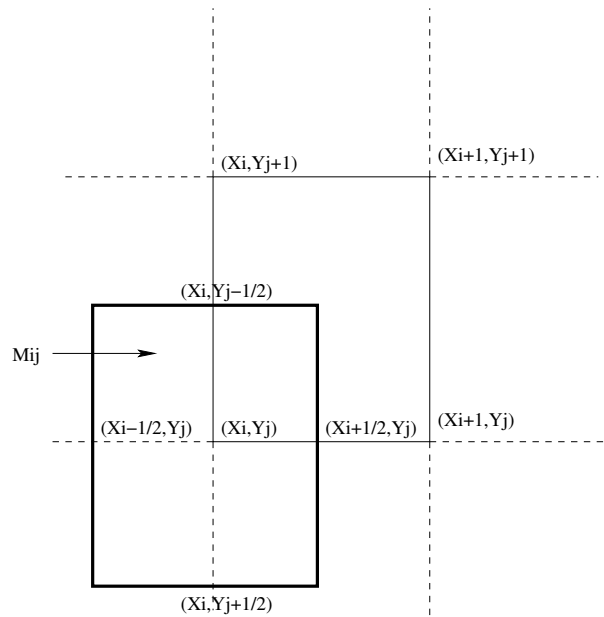


FIG. 2.1 – Cellule cell-vertex

La deuxième technique consiste à définir les volumes de contrôle de telle façon

2.8. Quelques références bibliographiques sur les méthodes numériques

que les points de discrétisation soient les centres de gravité des cellules duales M_{ij} . Les points x_i et y_j sont les milieux des arêtes $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ et $[y_{j-1/2}, y_{j+1/2}]$ respectivement (voir Figure 2.2). Le schéma s'exprime en localisant l'inconnue aux centres

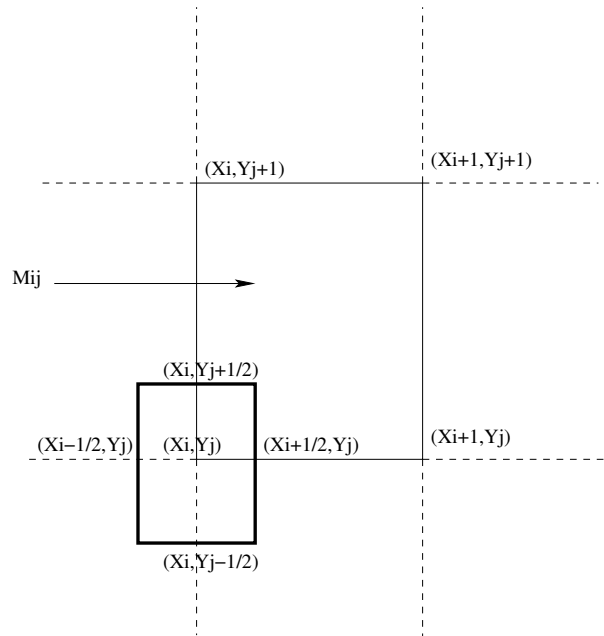


FIG. 2.2 – Cellule cell-centred.

de gravité des cellules primales, en considérant les valeurs de la dérivée le long des arêtes comme une inconnue intermédiaire. Le problème dans cette méthode est de trouver la formule d'intégration numérique qui permet d'éliminer le gradient dans le système discret (voir, p.e., [110]).

2.8.2 Maillages duaux dans le cas non structuré

Pour généraliser la technique “cell-vertex” à un ensemble quelconque de discrétisation x_j dans Ω , il faut que les x_j permettent de construire un espace d'élément fini avec un degré de liberté par x_j , où les x_j sont les sommets associés à la triangulation \mathcal{T}_h de Ω . Dans ce cas le maillage dual $\Sigma_h := M_j$ (voir Figures 2.3 et 2.4) est construit à partir de la triangulation primaire \mathcal{T}_h . Le volume de contrôle M_j associé au sommet x_j est obtenu en joignant le barycentre de chaque triangle $T \in \mathcal{T}_h$ qui contient le sommet x_j avec le milieu de chaque arête de T contenant x_j . Le maillage dual Σ_h

2.8. Quelques références bibliographiques sur les méthodes numériques

forme une partition de Ω . Quant à la méthode "cell-centred", les techniques utilisant la formulation mixte ne sont pas facile à étendre aux maillages non structurés. Car il faut trouver la formulation variationnelle mixte et éventuellement l'intégration numérique adéquate pour éliminer l'inconnue flux dans le système discret (choix des espaces de discrétisation pour l'inconnue et son gradient, et des espaces de fonctions tests). Ici les volumes de contrôles coïncident avec les triangles du maillage primal (voir Figure 2.5). Pour cette formulation, les degrés de liberté sont pris aux centres de gravité des triangles. Remarquons que dans la formulation utilisant le maillage

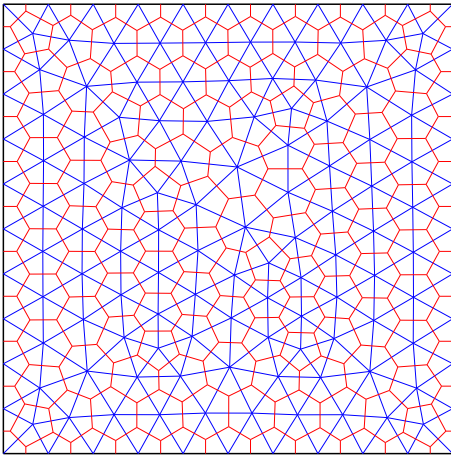


FIG. 2.3 – Maillage primal et dual.

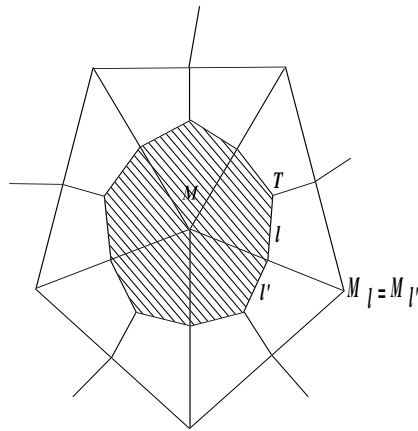


FIG. 2.4 – Cellule vertex-centered.

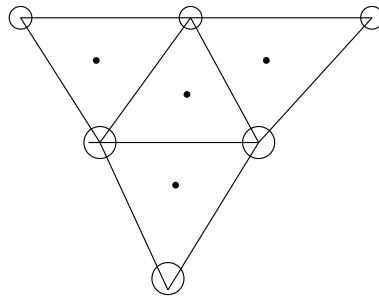


FIG. 2.5 – Cellule cell-centred.

"vertex-centred", il y a peu d'inconnues à évaluer, mais l'inconvénient par rapport à celle utilisant "cell-centred" est que les aires des volumes de contrôles sont plus importantes.

2.8. Quelques références bibliographiques sur les méthodes numériques

2.8.3 Schémas volumes finis pour une équation hyperbolique

Les premiers schémas VF développés sont apparus avec Godunov en 1959 pour un problème hyperbolique (voir, p.e., [74], [82] et [91]). Nous donnons ici une brève description du schéma de Godunov pour le problème de cauchy suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0, & x \in \mathbb{R}, t > 0, \\ u(x, 0) = u_0(x). \end{cases} \quad (2.30)$$

On suppose que $f \in C^2(\mathbb{R})$, $u_0 \in L^\infty(\mathbb{R})$ et on pose $a(u) = f'(u)$. Soient Δt , Δx les pas de temps et d'espace respectivement et $\lambda = \frac{\Delta t}{\Delta x}$.

Pour résoudre le problème (2.30), Godunov a développé un schéma numérique de type volumes finis qui est fondé sur la résolution d'un problème de Riemann localisé à chaque interface de maillage. Pour plus de détails sur cette méthode le lecteur pourra consulter [74] et [82]. Le problème de Riemann est donné par :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0, \\ u(x, 0) = \begin{cases} u_l & \text{si } x < 0, \\ u_r & \text{si } x \geq 0. \end{cases} \end{cases} \quad (2.31)$$

Nous supposons dans toute la suite que le problème de Riemann (2.31) admet une unique solution entropique $w_R(\cdot; u_l, u_r)$ qui s'écrit sous la forme suivante :

$$u(x, t) = w_R(x/t; u_l, u_r), \quad x \in \mathbb{R}, t > 0 \quad (2.32)$$

où w_R dépend seulement de la fonction f .

L'idée est de discrétiser au temps $t^n = \Delta t$ le champ inconnu $u^n(x)$ par volumes finis, un champ constant sur chaque volume de contrôle $K =]x_{j-1/2}, x_{j+1/2}[$ i.e. $u^n(x) = u_j^n(x)$, $x \in K$. Supposons connue $u^n = (u_j^n)_{j \in \mathbb{Z}}$ approximation de la solution (2.30) au temps t_n , l'approximation u^{n+1} à l'instant t_{n+1} est obtenue comme suit :

Première étape :

On résout exactement le problème :

2.8. Quelques références bibliographiques sur les méthodes numériques

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial f(w)}{\partial x} = 0, & x \in \mathbb{R}, t \in]t_n, t_{n+1}], \\ w(x, t_n) = u_\Delta(x, t_n), \end{cases} \quad (2.33)$$

où u_Δ est définie par : $u_\Delta = u_j^n$, $x \in]x_{j-1/2}, x_{j+1/2}[$. Puisque $u_\Delta \in L^\infty(\mathbb{R})$, ce problème admet une unique solution entropique. Notons que $u_\Delta(x, t_n)$ est constante sur chaque cellule $]x_{j-1/2}, x_{j+1/2}[$ et elle est discontinue à chaque point $x_{j+1/2}$. Pour l'interface $x_{j+1/2}$, on définit un problème de Riemann entre les états u_j^n et u_{j+1}^n :

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial f(w)}{\partial x} = 0, \\ w(x, 0) = \begin{cases} u_j^n & \text{si } x < x_{j+1/2}, \\ u_{j+1}^n & \text{si } x \geq x_{j+1/2}, \end{cases} \end{cases} \quad (2.34)$$

La solution de ce problème est donnée par :

$$u(x, t) = w_R\left(\frac{x - x_{j+1/2}}{t - t^n}; u_j^n, u_{j+1}^n\right), \quad t \geq t^n. \quad (2.35)$$

Les deux problèmes de Riemann voisins n'agissent pas l'un sur l'autre avant le temps Δt , c'est à dire que l'onde qui partira de $x_{j-1/2}$ n'atteindra pas les lignes $x = x_{j-1}$ et $x = x_j$ avant le temps Δt (Figure 2.7).

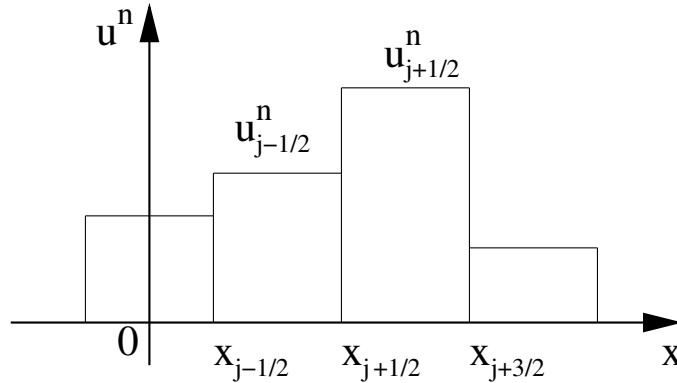


FIG. 2.6 – Discretisation au temps t^n du champ $u^n(x)$.

Par conséquent le problème (2.33) peut être vu comme une superposition du problème de Riemann local. Sa solution explicite est donnée par :

$$w(x, t_{n+1}) = w_R((x - x_{j+1/2}/\Delta t); u_j^n, u_{j+1}^n), x \in]x_j, x_{j+1}[, j \in \mathbb{Z}, \quad (2.36)$$

2.8. Quelques références bibliographiques sur les méthodes numériques

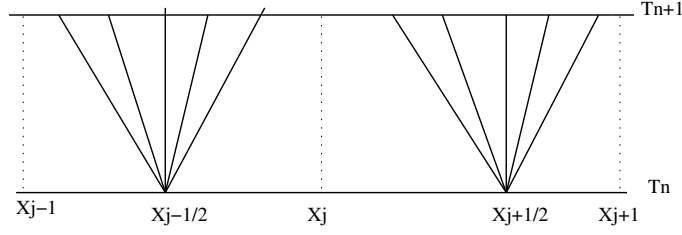


FIG. 2.7 – Solution du problème de cauchy sous la condition de stabilité.

Deuxième étape :

u_j^{n+1} est défini comme la valeur moyenne de la solution (2.36) dans la maille $[x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]$.

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} w(x, t_{n+1}) dx. \quad (2.37)$$

En utilisant (2.36) et la CFL suivante :

$$\lambda \max \{ |a(u)|; u \text{ entre } u_{j-1}^n \text{ et } u_j^n \} < 1/2, \quad (2.38)$$

on obtient :

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{\Delta x} \left[\int_0^{-\Delta x/2} w_R(x/\Delta t; u_j^n, u_{j+1}^n) dx + \int_{\Delta x/2}^0 w_R(x/\Delta t; u_{j-1}^n, u_j^n) dx \right]. \quad (2.39)$$

Pour avoir une expression plus simple de u_j^{n+1} , on intègre l'équation (2.33) sur la cellule $]x_{j-1/2}, x_{j+1/2}[\times]0, \Delta t[$, on obtient :

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^{\Delta t} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \left(\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(w) \right) dx dt \\ &= \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} (w(x, \Delta t) - w(x, 0)) dx + \int_0^{\Delta t} (f(w(x_{j+1/2} - 0, t)) - f(w(x_{j-1/2} + 0, t))) dt \\ &= \Delta x (u_j^{n+1} - u_j^n) - \Delta t (f(w_R(0^-; u_j^n, u_{j+1}^n)) - f(w_R(0^-; u_{j-1}^n, u_j^n))). \end{aligned}$$

La fonction $\xi \rightarrow f(w_R(\xi; u_l, u_r))$ est continue au point $\xi = 0$ (pour la démonstration

2.8. Quelques références bibliographiques sur les méthodes numériques

voir [73]). Par suite on a

$$f(w_R(0^+; u_l, u_r)) = f(w_R(0^-; u_l, u_r)).$$

Alors le schéma de Godunov est obtenu par :

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \lambda [f(w_R(0; u_j^n, u_{j+1}^n)) - f(w_R(0; u_{j-1}^n, u_j^n))]. \quad (2.40)$$

Ce schéma est conservatif et le **flux numérique convectif** est donné par :

$$g^G(u, v) = f(w_R(0; u, v)),$$

lorsque f est linéaire, ou plus généralement, quand f est convexe, le schéma de Godunov s'écrit sous la forme simple :

$$w_R(0; u, v) = \begin{cases} u & \text{si } a = f' > 0, \\ v & \text{si } a = f' < 0, \end{cases} \quad (2.41)$$

alors que le flux numérique, dans ce cas, est donné par :

$$g^G(u, v) = \begin{cases} f(u) & \text{si } a > 0, \\ f(v) & \text{si } a < 0. \end{cases} \quad (2.42)$$

2.8.4 Schémas volumes finis pour une équation elliptique

Dans cette section, on donne quelques références bibliographiques sur les schémas volumes finis utilisés pour discrétiser une équation purement diffusif (2.43) :

$$-\operatorname{div} (K \nabla u) = f \quad \text{sur } \Omega \quad (2.43)$$

La méthode des volumes finis consiste à intégrer l'équation (2.43) sur chaque volume de contrôle M . Ce qui revient, grâce à la formule de Green, à chercher la méthode adéquate pour approcher l'intégrale $\int_e K \nabla u \cdot \vec{n}_{M,e}$ sur les interfaces e . La définition donc d'un tel schéma VF est liée au choix du volume de contrôle et de la méthode d'intégration adéquate pour approcher l'intégrale. Plusieurs types de schémas VF peuvent être utilisés pour approcher l'équation (2.43). Un schéma VF

2.8. Quelques références bibliographiques sur les méthodes numériques

pour un problème elliptique a été étudiée et analysée dans [31] et [30] dans le cas isotrope. Dans le cas anisotrope on renvoie à [41]. Puisqu'on ne construit pas les flux de manière consistante, l'opérateur discret (la divergence discrète des flux) n'est pas consistant en général. En effet, l'utilisation d'un maillage non régulier pour approcher l'équation (2.43) au sens des différences finies est insuffisante pour avoir la consistance (voir, p.e., [61]). Par suite le schéma associé n'est pas forcément convergent. Plusieurs techniques permettent néanmoins de démontrer la convergence du schéma (cf. [71], [110] et [67]).

D'autres schémas VF sont étudiés et développés, par exemple, dans le cas d'un écoulement en milieu poreux hétérogène (voir cf. [67]), un schéma volumes finis a été développée pour traiter l'équation (2.43) avec K discontinue et variant beaucoup. En utilisant les moyennes harmoniques de K , les méthodes volumes finis centrés sur les mailles permettent d'obtenir une bonne approximation de la vitesse de Darcy, tout en respectant les propriétés de conservations au niveau de la maille de discrétisation. En résumé, les techniques de discrétisation, qui ont fait l'objet d'une analyse mathématique, associent à la solution approchée une fonction dérivable d'un espace de type éléments finis (cf. [31], [91], [13], [90], [108] et [51]), ou bien supposent que le flux est approché de manière consistante par différences finies dans la direction perpendiculaire à l'interface e . Dans le cas des maillages non conformes, une nouvelle technique qui est dite "cellules diamants" a été utilisée (voir, p.e., [43], [42] et [44]). Elle consiste à reconstruire le gradient complet de la solution approchée le long de l'interface e . Elle utilise une valeur interpolée de la solution approchée en chaque noeud du maillage pour calculer le gradient dans la direction tangentielle à l'interface.

2.8.5 Schémas volumes finis pour une équation de convection-diffusion

Le problème qui nous intéresse est modélisé par un système d'équations composé par une équation elliptique et une équation de type convection-diffusion. Nous avons présenté précédemment des schémas VF d'une équation hyperbolique et elliptique, il nous reste à étudier l'équation de convection-diffusion. Pour cela on considère le

2.8. Quelques références bibliographiques sur les méthodes numériques

problème modèle suivant :

$$\operatorname{div} (-D\nabla c + \vec{q}c) = f. \quad (2.44)$$

Comme dans le cas elliptique, le principe des schémas VF est le suivant : on considère une partition primale \mathcal{T}_h de Ω qui peut être d'éléments quelconques (triangle, rectangle, tétraèdres, ...), ensuite on construit une partition duale Σ_h de Ω à partir de la partition primale \mathcal{T}_h . Les éléments de Σ_h sont appelés volumes de contrôle M . A chaque volume de contrôle, on associe une inconnue c_M . En intégrant l'équation (2.44) sur chaque volume de contrôle M on obtient le système discret suivant :

$$\sum_{e \in \partial M} (G_{M_e}(c_M) + F_{M_e}(c_M)) |e| = \int_M f, \quad (2.45)$$

où G_{M_e} et F_{M_e} sont les flux numériques de convection et de diffusion respectivement au travers des interfaces e qui composent la frontière de M orientés vers l'extérieur de M . Ils doivent approcher les flux exacts $-\int_e D_e \nabla c_e \cdot \vec{n}_{M,e}$, et $\int_e c_e \vec{q}_e \cdot \vec{n}_{M,e}$. La définition d'un tel schéma VF pour une équation de convection-diffusion repose donc sur la détermination de G_{M_e} et F_{M_e} de telle manière à avoir la conservation et la consistante. Le schéma de Godunov est le schéma le plus utilisé pour déterminer le flux numérique associé au terme de convection, car il est consistant et conservatif par définition. Quant au terme de diffusion, les techniques d'approximations varient suivant la nature de maillage et le tenseur de diffusion D (cf. [45], [83], [44], [94], [91], [82], [62] et [5]). Dans le cas où la fonction D est linéaire, on trouve dans [40] un schéma VF, 1D et 2D, utilisé pour traiter un problème d'interface. La technique utilisée consiste à modifier le schéma classique, en faisant un développement asymptotique de la solution à chaque noeud au voisinage du point d'interface, utiliser les conditions d'interface dans le but de transformer les dérivées à gauche et à droite de l'interface. L'intérêt de cette approximation est qu'elle assure que l'erreur de troncature pour les flux soit d'ordre 2. Plusieurs auteurs ont traité l'équation de convection-diffusion par un schéma VF en combinant la méthode des éléments finis et le schéma décentré amont (voir, p.e., [21], [48], [84], [56] et [105]). Dans [84], on trouve un schéma VF pour une équation de convection-diffusion qui combine la méthode des EFM et des VF. Un autre schéma VF a été développée dans [64]

2.8. Quelques références bibliographiques sur les méthodes numériques

en combinant la méthode des EFMH et le schéma VF. L'inconvénient de ces approches est qu'il faut choisir toujours deux types de maillage (primal et dual). Pour discrétiser l'équation de convection-diffusion en utilisant les avantages des méthodes VF et EF avec un seul type de maillage, une méthode de Galerkin discontinue a été proposée dans [68].

Chapitre 3

Convergence d'un Schéma Combiné Eléments Finis Mixtes-Volumes Finis

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous étudions un schéma numérique couplant une méthode d'éléments finis mixtes pour l'équation de la pression et une méthode volumes finis pour l'équation de la concentration des écoulements de deux fluides incompressibles et miscibles en milieux poreux. D'une manière plus précise, le modèle étudié est modélisé par un système couplé composé d'une équation elliptique (3.1), et d'une équation de type diffusion-convection-réaction (3.2).

Equation en vitesse-pression :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{q} = -\frac{K(x)}{\mu(c)} \nabla p & \text{dans } \Omega \times]0, T[\\ \operatorname{div} \vec{q} = 0 & \text{dans } \Omega \times]0, T[\\ \vec{q} \cdot \vec{n}|_{\Gamma_1} = -q_0; \quad \vec{q} \cdot \vec{n}|_{\Gamma_2} = 0; \quad p|_{\Gamma_3} = p_0 & \text{sur }]0, T[\end{array} \right. \quad (3.1)$$

3.1. Introduction

Equation en concentration :

$$\begin{cases} \Phi(x) \frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div} (D(x, \vec{q}) \nabla c - c \vec{q}) + R(x)c = f(x, t) & \text{dans } \Omega \times]0, T[\\ c|_{\Gamma_1} = 0; \quad D \nabla c \cdot \vec{n}|_{\Gamma_2} = 0; \quad (D \nabla c - c \vec{q}) \cdot \vec{n}|_{\Gamma_3} = 0 & \text{sur }]0, T[\\ c(x, 0) = c_0(x) & \text{dans } \Omega \end{cases} \quad (3.2)$$

où la frontière Γ est composée de trois parties telles que $\Gamma = \bar{\Gamma}_1 \cup \bar{\Gamma}_2 \cup \bar{\Gamma}_3$, p et \vec{q} sont la pression et la vitesse de Darcy du fluide, Φ et K sont la porosité cinématique et la perméabilité absolue du milieu poreux. La viscosité du fluide μ est une fonction non linéaire de la concentration c de la phase, et f est le terme source. R est le terme de réaction. q_0 est le flux imposé sur Γ_1 et p_0 est la pression donnée sur Γ_3 . c_0 est la concentration initiale.

Le tenseur de diffusion-dispersion D est donné par :

$$D(x, \vec{q}) = d_e I + |\vec{q}| [\alpha_l E(\vec{q}) + \alpha_t (I - E(\vec{q}))]$$

avec $E_{ij}(\vec{q}) = \frac{q_i q_j}{|\vec{q}|^2}$, d_e est le coefficient de la diffusion moléculaire effective, α_l et α_t sont les dispersivités intrinsèques longitudinale et transversale respectivement.

Ce chapitre est organisé comme suit : Dans la section 3.2, on introduit les hypothèses sur les données du système (3.1)-(3.2), sous lesquelles le système d'équations sera discrétisé. On utilise une méthode EFM pour approcher l'équation de Darcy 3.1 et un schéma VF, pour approcher l'équation de la concentration 3.2. Ces méthodes permettent d'avoir des propriétés physiques intéressantes : conservation de la masse, principe du maximum discret, prise en compte de l'anisotropie. Pour l'implémentation numérique, on utilise l'élément fini triangulaire de Raviart-Thomas de bas degré pour approcher l'équation de Darcy et la discrétisation de la concentration utilise un maillage dual déstructuré de type Voronoi. On utilise un schéma de Godunov pour approcher le terme convectif et une approximation éléments finis P_1 pour le terme de diffusion. Le schéma considéré est semi-implicite : explicite pour la convection et implicite pour la diffusion. Dans la section 3.3, on décrit la méthode EFM utilisée pour discrétiser l'équation elliptique (3.1). Le schéma VF que nous avons utilisé pour approcher l'équation de la concentration (3.2) sera présenté dans la section 3.4. Dans la section 3.5, nous montrons que le schéma VF vérifie le principe du maximum discret et qu'il est L^∞ stable et satisfait des estimations BV, sous une

3.2. Notations et discrétisation

condition CFL appropriée. Ensuite, dans la section 3.6 nous montrons la convergence de la solution approchée obtenue par le schéma combiné EFM-VF vers la solution du problème couplé (3.1)-(3.2). Les principales étapes de la démonstration de la convergence sont : premièrement, on déduit la convergence forte (Théorème 3.12) de la solution approchée de la concentration dans $L^2(Q)$, en utilisant la stabilité L^∞ (Proposition 3.8), les estimations BV (Proposition 3.11) et des arguments de compacité. Dans l'étape suivante, on étudie le schéma découplé EFM, en donnant des résultats de convergence pour la pression et la vitesse (Théorème 3.17). Enfin, le processus de convergence de la solution approchée du schéma combiné EFM-VF vers la solution exacte (Théorème 3.18) est obtenu par passage à la limite et par unicité de solution pour le problème continu (3.1)-(3.2).

3.2 Notations et discrétisation

Dans cette section, on décrit la discrétisation numérique du problème couplé (3.1)-(3.2). Nous donnons quelques notations. Soit $\mathcal{T} = \{t_0, \dots, t_N\}$ une partition de $J = [0, T]$, $\Delta t^n = t_{n+1} - t_n$ désigne le pas du temps de \mathcal{T} et $\Delta t = \max_n \Delta t^n$. Ensuite, on note par $(\Lambda_h)_{h>0}$ une triangulation admissible de Ω , telle que $\bar{\Omega} = \cup_{\mathcal{T} \in (\Lambda_h)_{h>0}} \bar{\mathcal{T}}$. La triangulation $(\Lambda_h)_{h>0}$ est appelée maillage primal. Soit $\mathcal{I}_h = \{x_j; j \in I\}$ l'ensemble des sommets dans $(\Lambda_h)_{h>0}$ où I est l'indice associé à l'ensemble, et N_v est le nombre des sommets dans $(\Lambda_h)_{h>0}$. \mathcal{E}_h représente l'ensemble des arêtes [resp. faces] en 2D [resp. 3D] de Λ_h . Pour une discrétisation par volumes finis, nous aurons besoin d'un maillage dual Σ_h dont les éléments sont appelés volumes de contrôle. Le volume de contrôle M_j associé à chaque sommet x_j , $j \in I$ est obtenu comme suit : Dans le cas 2D, on joint le barycentre de chaque triangle $\mathcal{T} \in (\Lambda_h)_{h>0}$, contenant le sommet x_j , avec le milieu de chaque arête de \mathcal{T} contenant x_j . De cette façon, nous obtenons la frontière ∂M_j de la cellule "vertex-centered" M_j (voir la Figure 3.1). Dans le cas 3D, on joint le barycentre $x_{\mathcal{T}}$ du tétraèdre $\mathcal{T} \in (\Lambda_h)_{h>0}$ avec le barycentre $x_{j\ell}$ des quatres faces $(x_j x_i x_\nu)$ de \mathcal{T} , et dans les faces correspondantes, les points $x_{j\ell}$ sont connectés avec le point milieu $x_{j\nu}$ de l'arête $(x_j x_\nu)$. Finalement le volume de contrôle M_j est défini en réunissant les quatres parties de $\mathcal{T} \in (\Lambda_h)_{h>0}$, qui ont le même sommet x_j (voir la Figure 3.2). Le maillage dual Σ_h construit une partition de Ω . Enfin, nous introduisons les notations suivantes : $|M_j| := \text{aire de } M_j \in \Sigma_h$, $|\mathcal{T}| :=$

3.2. Notations et discrétisation

aire de $\mathcal{T} \in (\Lambda_h)_{h>0}$ et $\vec{n}_{jl} :=$ le vecteur unitaire normale à M_j vers M_l , $j \in I$.

Avant de présenter la discrétisation du système (3.1)–(3.2), on donne quelques

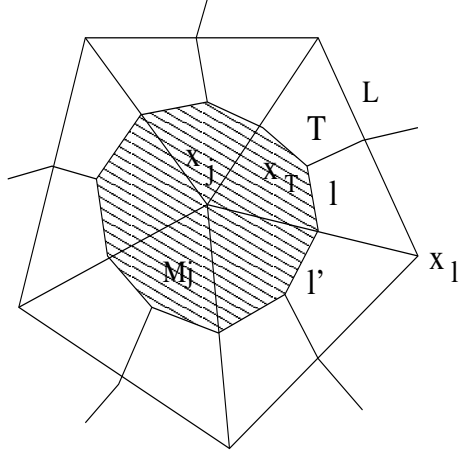


FIG. 3.1 – Cellule "vertex-centered" en 2-D

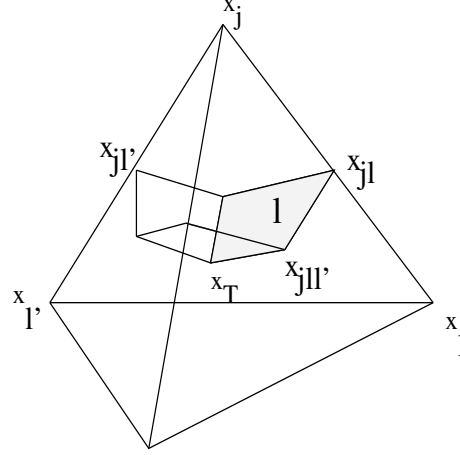


FIG. 3.2 – Une partie de la cellule "vertex-centered" en 3-D.

notations :

- $N_j^0 = \text{card} \{l \in \partial M_j\}$.
- $M^0 = \text{card} \{M_j \in \Sigma_h\}$.
- $h = \min\{|l|, l \in \partial M_j, M_j \in \Sigma_h\}$.
- $H = \max\{|L|, L \in \partial \mathcal{T}, \mathcal{T} \in (\Lambda_h)_{h>0}\}$.
- $\delta_{jl} = \delta(x_j, x_l)$ est la distance euclidienne entre x_j et x_l .
- $\Phi_j = \frac{1}{|M_j|} \int_{M_j} \Phi(x) dx$ et $R_j = \frac{1}{|M_j|} \int_{M_j} R(x) dx$.
- $f_{sj}^n = \frac{1}{\Delta t^n |M_j|} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{M_j} f(x, t) dx dt$ et $c_{0j} = \frac{1}{|M_j|} \int_{M_j} c_0(x) dx$.

Dans la suite, nous supposons que les données du problème vérifient :

(A₁) Ω est un polygonal borné de \mathbb{R}^d .

(A₂) $\Phi \in L^\infty(\Omega)$, $0 < \Phi_- \leq \Phi(x) \leq \Phi^+ \leq 1$ p.p. dans Ω .

(A₃) $c_0 \in L^\infty(\Omega)$, $0 \leq c_0(x) \leq 1$ p.p. dans Ω , $R \in L^\infty(\Omega)$, $R(x) \geq 0$ p.p. dans Ω .

(A₄) D et K sont deux tenseurs uniformément bornés, symétriques et définis positifs. (i.e. $\forall \vec{\xi} \neq 0$, $0 < d_- |\vec{\xi}|^2 \leq D \vec{\xi} \cdot \vec{\xi} \leq d^+ |\vec{\xi}|^2 < \infty$ et $0 < k_- |\vec{\xi}|^2 \leq K \vec{\xi} \cdot \vec{\xi} \leq k^+ |\vec{\xi}|^2 < \infty$ p.p. dans Ω).

(A₅) $\vec{q} \in (L^\infty(\Omega))^d$ p.p. dans $]0, T[$, $q_0 \geq 0$ et $\int_{\Gamma_3} \vec{q} \cdot \vec{n} ds = \int_{\Gamma_1} \vec{q} \cdot \vec{n} ds$ p.p. dans $]0, T[$

(A₆) $f \in L^2(Q)$, $f(x, t) \geq 0$ p.p. dans Q .

3.3. Discrétisation par EFM de l'écoulement

(A₇) μ est une fonction continue lipschitzienne telle que, $0 < \mu_- \leq \mu(c) \leq \mu^+$, $c \in [0, 1]$. d_e , α_l et α_t sont des constantes positives telle que $\alpha_t \leq \alpha_l$.

(A₈) pour $d = 2$, la triangulation $(\Lambda_h)_{h>0}$ de Ω est telle que tout les angles des triangles \mathcal{T} sont inférieurs à $\pi/2$.

(A₉) $\gamma H \leq |M_j|^{1/d} \leq \beta h$, $\forall j \in I$, où $\beta \geq \gamma > 0$ sont des constantes indépendantes de h .

(A₁₀) $h^d \leq |\mathcal{T}| \leq H^d$, $\forall \mathcal{T} \in (\Lambda_h)_{h>0}$.

3.3 Discrétisation par EFM de l'écoulement

L'équation de pression et l'équation de concentration sont couplées via le terme de convection, donc une bonne approximation de la vitesse (\vec{q}) est très importante dans la simulation numérique du transport. La discrétisation du problème (3.1) à l'aide d'une méthode des éléments finis conformes aboutit à des schémas non conservatifs. Plus précisément, il n'y a pas de conservation de flux au niveau de l'élément. De plus, la vitesse de Darcy est déduite par différenciation de la pression, et ceci génère des erreurs supplémentaires notamment en milieu fortement hétérogène. Les méthodes EFM utilisant des formulations avec les deux inconnues (pression et vitesse) pallient ce type d'insuffisance. La contrepartie de ces avantages réside, d'une part, dans l'accroissement substantiel du nombre d'inconnues, et d'autre part, dans le fait que le système final à résoudre n'est plus à matrice symétrique définie positive mais correspond à la détermination d'un point selle. Pour cela, nous avons choisi la méthode des EFM pour discrétiser l'équation de l'écoulement. L'élément fini triangulaire de Raviart-Thomas de bas degré est utilisé pour approcher la vitesse de Darcy.

Avant de donner le problème discret, on donne une formulation variationnelle mixte pour l'équation de Darcy (3.1). Tout d'abord, nous introduisons les espaces suivants :

$$X_0 = \{\vec{s} \in H(\text{div}, \Omega) \mid \vec{s} \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_2\} \text{ et } M = L^2(\Omega),$$

où

$$H(\text{div}, \Omega) = \{\vec{s} \in L^2(\Omega) \mid \text{div } \vec{s} \in L^2(\Omega)\}.$$

3.3. Discrétisation par EFM de l'écoulement

pour $\vec{r}, \vec{s} \in X_0$, $v \in M$ et $w \in L^\infty(\Omega)$, on définit les formes bilinéaires a et b comme suit :

$$a(w; \vec{r}, \vec{s}) = \int_{\Omega} K^{-1}(x) \mu(w) \vec{r} \cdot \vec{s} d\Omega$$

$$b(\vec{r}, v) = - \int_{\Omega} v \operatorname{div} \vec{q} d\Omega$$

et la forme linéaire $L(\cdot)$:

$$L(\vec{s}) = - \int_{\Gamma_3} p_0 \vec{s} \cdot \vec{n} ds.$$

Une formulation mixte du problème (3.1) est donnée par : pour $p.p. t$ dans $]0, T[$

$$\begin{cases} (\vec{q}(t), p(t)) \in X_0 \times M \\ a(c(t); \vec{q}(t), \vec{s}) + b(p(t), \vec{s}) = L(\vec{s}) & \forall \vec{s} \in X_0 \\ b(\vec{q}(t), v) = 0 & \forall v \in M \end{cases} \quad (3.3)$$

La pression p et la vitesse \vec{q} sont approchées dans deux espaces de dimension finie, M^h et X_0^h respectivement, qui sont définis comme suit (voir, p.e., [27] et [100]) :

$$X_0^h = \{ \vec{s}_h \in L^2(\Omega), \vec{s}_h \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_1, \vec{s}_h|_{\mathcal{T}} \in RT_0(\mathcal{T}); \forall \mathcal{T} \in (\Lambda_h)_{h>0} \}, \quad (3.4)$$

où RT_0 est l'élément fini de Raviart-Thomas de bas degré défini par ([100])

$$RT_0(\mathcal{T}) = \{ \vec{s} = \vec{\alpha} + \beta x : \vec{\alpha} \in \mathbb{R}^d, \beta \in \mathbb{R} \} \quad (3.5)$$

où $x = (x_1, \dots, x_d)^t$. Enfin on définit le sous-espace de dimension finie M^h de $L^2(\Omega)$ correspondant à $(\Lambda_h)_{h>0}$ comme suit :

$$M^h = \{ v^h \in L^2(\Omega), v^h|_{\mathcal{T}} = Cte; \forall \mathcal{T} \in (\Lambda_h)_{h>0} \}. \quad (3.6)$$

Alors le problème approché du problème (3.3) est donné par :

$$\begin{cases} \text{Trouver } (\vec{q}_h(t), p_h(t)) \in X_0^h \times M^h \text{ telles que :} \\ a(c_h(t); \vec{q}_h(t), \vec{s}_h) + b(p_h(t), \vec{s}_h) = L(\vec{s}_h) & \forall \vec{s}_h \in X_0^h \\ b(\vec{q}_h(t), v_h) = 0 & \forall v_h \in M^h \end{cases} \quad (3.7)$$

3.4 Discrétisation par VF de l'équation de la concentration

Dans cette section, nous décrivons la méthode numérique utilisée pour approcher l'équation de la concentration. Il s'agit d'un schéma volumes finis de type "vertex-centered". Le terme de convection est approché par un schéma décentré de Godunov (voir [74]) et une approximation élément fini P_1 pour la diffusion. Le schéma considéré est semi-implicite : explicite pour la convection et implicite pour la diffusion. La discrétisation par VF utilise un maillage dual déstructuré de type Voronoi. Le volume de contrôle sur lequel le schéma sera défini est illustré dans les Figures 3.1 et 3.2.

En intégrant l'équation (3.2) sur $M_j \times [t_n, t_{n+1}]$, on obtient le schéma suivant :

$$\Phi_j(c_j^{n+1} - c_j^n)|M_j| = \sum_{l \in \partial M_j} (G_{jl} - F_{jl}) - \Delta t^n |M_j| R_j c_j^{n+1} + \Delta t^n |M_j| f_{sj}^n \quad (3.8)$$

où G_{jl} et F_{jl} sont le flux convectif et le flux diffusif respectivement, à travers une arête l .

$$G_{jl} := \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_l c \vec{q} \cdot \vec{n}_{jl} ds dt$$

$$F_{jl} := \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_l D(x, \vec{q}) \nabla c \cdot \vec{n}_{jl} ds dt.$$

Maintenant la connaissance du schéma volumes finis repose sur la détermination des flux numériques G_{jl}^* et F_{jl}^* correspondants à G_{jl} et F_{jl} .

Définition 3.1 (Conservativité) *On dira que les flux approchés G_{jl}^* et F_{jl}^* sont conservatifs au sens des volumes finis, si on a une conservation locale*

$$F_{jl}^* + F_{lj}^* = 0 \text{ et } G_{jl}^* + G_{lj}^* = 0. \quad (3.9)$$

Pour une approximation F_{jl}^* à deux points (M_j, M_l) et G_{jl}^* une approximation à p points $(M_i)_{i=1}^p$, on a la définition suivante :

3.4. Discrétisation par VF de l'équation de la concentration

Définition 3.2 (Consistance) On dira que les flux approchés F_{jl}^* et G_{jl}^* sont consistants au sens des volumes finis, si on a :

$$\begin{aligned} G_{jl}^*(v, v) &= -v\vec{q}_l \cdot \vec{n}_{jl}|l| && \text{pour tout } v \in [0, 1], \text{ et} \\ F_{jl}^*((c_i)_{i=1}^p) &= D_l(\nabla c)_l \cdot \vec{n}_{jl}|l| + \theta(h) && \text{pour tout } c \text{ assez régulière} \end{aligned} \quad (3.10)$$

où $|\theta(h)| \leq Ch$, (C positive et ne dépend que de c)

Définition 3.3 (Volumes finis) On dira qu'un schéma numérique pour le problème (3.2) est de type volumes finis, si les flux numériques approchés sont conservatifs et consistants au sens des définitions 3.1 et 3.2.

3.4.1 Flux de convection

Le flux numérique de convection est déterminé à l'aide du schéma décentré de Godunov (voir [74]) *i.e.*

$$G_{jl}^*(\vec{q}, c_j, c_l) = q_{jl}^+ c_j^n + q_{jl}^- c_l^n, \quad (3.11)$$

où

$$q_{jl}^{-+} = \int_l (\vec{q}_h^n \cdot \vec{n}_{jl})^{-+} ds. \quad (3.12)$$

avec $\vec{q}_h^n := \vec{q}_h(t_n)$.

3.4.2 Flux de diffusion

Pour exprimer le flux de diffusion à travers chaque arête, on approche le gradient de l'inconnue c dans $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ par une approximation élément fini P_1 d'ordre 1. En effet :

pour tout $\mathcal{T} \cap M_j \neq \emptyset$ on a :

$$\sum_{l \in \partial M_j} D_l(\vec{q})(\nabla c)_l \cdot \vec{n}_{jl} ds |l| = \sum_{\mathcal{T} \cap M_j} D_{\mathcal{T}}(\vec{q})(\nabla c)_{\mathcal{T}} \cdot \vec{n}_{jl} ds |l|,$$

3.4. Discrétisation par VF de l'équation de la concentration

où

$$D_{\mathcal{T}}(\vec{q}) = \frac{1}{|\mathcal{T}|\Delta t^n} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\mathcal{T}} D_{\mathcal{T}}(\vec{q}) dx dt. \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \sum_{l \in \partial M_j \cap \mathcal{T}} D_{\mathcal{T}}(\vec{q})(\nabla c)_{\mathcal{T}} \cdot \vec{n}_{jl} ds |l| &= (\nabla c)_{\mathcal{T}} \cdot D_{\mathcal{T}}(\vec{q}) \sum_{l \in \partial M_j \cap \mathcal{T}} \vec{n}_{jl} |l| \\ &= -(\nabla c)_{\mathcal{T}} \cdot D_{\mathcal{T}}(\vec{q}) \sum_{l \in \partial \mathcal{T} \cap M_j} \vec{n}_{\mathcal{T}l} |l| \\ &= \frac{(\nabla c)_{\mathcal{T}}}{2} \cdot D_{\mathcal{T}}(\vec{q}) \vec{n}_{\mathcal{T}L} |L| \end{aligned} \quad (3.14)$$

où $L \in \partial \mathcal{T}$ tel que $L \cap M_j = \emptyset$. Soit $N_{M_l, \mathcal{T}}$ les fonctions de bases de l'élément fini P_1 . Pour tout $\mathcal{T} \cap M_j \neq \emptyset$ on a :

$$\nabla N_{M_j, \mathcal{T}} := -\frac{|L|}{2|\mathcal{T}|} \vec{n}_{\mathcal{T}l}.$$

Alors on exprime $(\nabla c)_{\mathcal{T}}$ sur chaque triangle $\mathcal{T} \in (\Lambda_h)_{h>0}$ à l'aide de l'approximation P_1 on trouve :

$$\begin{aligned} (\nabla c)_{\mathcal{T}} &= \sum_{M_l \cap \mathcal{T} \neq \emptyset} c_{M_l} \nabla N_{M_l, \mathcal{T}} = \sum_{M_l \cap \mathcal{T} \neq \emptyset} (c_{M_l} - c_{M_j}) \nabla N_{M_l, \mathcal{T}}, \\ &= \sum_{l \in \partial M_j \cap \mathcal{T}} (c_{M_l} - c_{M_j}) \nabla N_{M_l, \mathcal{T}}. \end{aligned}$$

L'équation (3.14) devient :

$$\begin{aligned} \sum_{l \in \partial M_j \cap \mathcal{T}} D_{\mathcal{T}}(\vec{q})(\nabla c)_{\mathcal{T}} \cdot \vec{n}_{jl} ds |l| &= \frac{(\nabla c)_{\mathcal{T}}}{2} \cdot D_{\mathcal{T}}(\vec{q}) \vec{n}_{\mathcal{T}L} |L| \\ &= \frac{1}{2} \left(\sum_{l \in \partial M_j \cap \mathcal{T}} (c_{M_l} - c_{M_j}) \nabla N_{M_l, \mathcal{T}} \right) \cdot D_{\mathcal{T}}(\vec{q}) \vec{n}_{\mathcal{T}, L} |L| \\ &= \sum_{l \in \partial M_j \cap \mathcal{T}} (c_{M_l} - c_{M_j}) \nabla N_{M_l, \mathcal{T}} \cdot D_{\mathcal{T}}(\vec{q}) \nabla N_{M_j, \mathcal{T}} |L| \\ &= - \sum_{l \in \partial M_j \cap \mathcal{T}} (c_{M_l} - c_{M_j}) \frac{D_{jl}^n}{\delta(x_j, x_l)} |l| \end{aligned}$$

3.4. Discrétisation par VF de l'équation de la concentration

où

$$D_{jl}^n = -\frac{|T|}{|l|} \delta_{jl} \nabla N_{M_l, T} \cdot D_T(\vec{q}) \nabla N_{M_j, T}. \quad (3.15)$$

Donc le flux numérique associé au terme de diffusion est donné par :

$$F_{jl}^* \left((c_{l'}^{n+1})_{M_{l'} \cap T \neq \emptyset} \right) = \sum_{l' \in \partial M_j \cap T} (c_{M_{l'}}^{n+1} - c_{M_j}^{n+1}) \nabla N_{M_{l'}, T} \cdot D_T(\vec{q}) \cdot \vec{n}_{jl},$$

ou encore

$$\sum_{l \in \partial M_j \cap T} F_{jl}^* \left((c_{l'}^{n+1})_{M_{l'} \cap T \neq \emptyset} \right) = \sum_{l \in \partial M_j \cap T} (c_{M_l}^{n+1} - c_{M_j}^{n+1}) \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l|. \quad (3.16)$$

Définition 3.4 (Schéma volumes finis Semi-implicite) En exprimant les flux numériques dans l'équation (3.8), le schéma volumes finis pour l'équation (3.2) est donné par :

$$\begin{aligned} & c_j^{n+1} - \frac{\Delta t^n}{|M_j| \Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j \setminus \Gamma} (c_l^{n+1} - c_j^{n+1}) \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l| + \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} R_j c_j^{n+1} \\ & = c_j^n + \frac{\Delta t^n}{|M_j| \Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j} (c_l^n - c_j^n) (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| + \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} f_{sj}^n. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Le schéma (3.17) peut s'écrire sous la forme matricielle :

$$A^n \mathbf{C}^{n+1} = \mathbf{S}^n,$$

où $\mathbf{C}^n = (c_j^n)_{1 \leq j \leq N_v}$, $\mathbf{S}^n = (S_j^n)_{1 \leq j \leq N_v}$; A^n est une matrice bande avec :

$$\begin{aligned} A_{jj}^n &= 1 + \frac{\Delta t^n}{|M_j| \Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j \setminus \Gamma} \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l| + \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} R_j, \\ A_{jl}^n &= -\frac{\Delta t^n}{|M_j| \Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j \cap \partial M_l} \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l| \quad \text{pour tout } j \neq l, \\ S_j^n &= c_j^n \left[1 - \frac{\Delta t^n}{|M_j| \Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j} (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| \right] + \frac{\Delta t^n}{|M_j| \Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j} c_l^n (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| + \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} f_{sj}^n. \end{aligned} \quad (3.18)$$

3.4. Discrétisation par VF de l'équation de la concentration

Il est à noter que le tenseur de diffusion D est plein et l'approximation obtenue dans (3.17) est telle que les coefficients D_{jl}^n définis par (3.15) vérifient la propriété suivante.

Propriété 3.5 *Sous les hypothèses (A₁)-(A₁₀), les coefficients D_{jl}^n satisfont l'inégalité suivante : pour $M_j \in \Sigma_h$, $l \in \partial M_j \setminus \Gamma$ et $n = 0, \dots, N$:*

$$0 < D_- \leq D_{jl}^n \leq D^+ < +\infty. \quad (3.19)$$

Preuve : En effet, les coefficients D_{jl}^n peuvent s'écrire sous la forme suivante :

$$D_{jl}^n = -\frac{\delta_{jl}}{d^2 |\mathcal{T}| |l|} |L'| \vec{n}_{\mathcal{T}, L'} \cdot D_{\mathcal{T}}^n |L| \vec{n}_{\mathcal{T}, L}$$

où L et $L' \in \partial \mathcal{T}$ telle que $L \cap M_j = \emptyset$ et $L' \cap M_l = \emptyset$, alors utilisant (A₄) et (A₉)-(A₁₀) on obtient

$$\sup |D_{jl}^n| \leq \sup \frac{\delta_{jl}}{d^2 |\mathcal{T}| |l|} |L| |L'| d^+ \leq \frac{H(H^{d-1})^2}{d^2 h^d h^{d-1}} d^+ \leq \frac{d^+}{d^2} \left(\frac{\beta}{\gamma}\right)^{2d-1}$$

donc

$$|D_{jl}^n| \leq D^+ := \frac{d^+}{d^2} \left(\frac{\beta}{\gamma}\right)^{2d-1} < +\infty.$$

Avec l'hypothèse (A8), il est facile de montrer que les coefficients D_{jl}^n sont positifs quand le tenseur de dispersion D se réduit à une fonction scalaire. Pour le cas général, nous renvoyons à [2] et [3].

Remarque 3.6 *La Propriété 3.5 est très importante dans l'analyse du schéma volumes finis (3.17), et elle dépend seulement de la triangulation et du tenseur D (voir [63]).*

Il est facile de voir que, sous les hypothèses (A₁) – (A₁₀) et la Propriété 3.5, A^n est une matrice monotone, *i.e.* A^n est une matrice régulière et $(A^n)^{-1}$ est une matrice positive.

3.5 Stabilité L^∞ et estimations BV

Avant de montrer la stabilité L^∞ et les estimations BV, nous donnons la condition de stabilité CFL reliant le pas du temps Δt et le pas d'espace h par l'inégalité suivante :

$$CFL := \frac{\Delta t}{h} C_q \leq 1 \quad (3.20)$$

où

$$C_q = \max_{n,j} \sum_{l \in \partial M_j} \frac{h|l|}{|M_j| |\Phi_j|} (-\bar{q}_l^n \cdot \bar{n}_{jl})^+.$$

Définition 3.7 (Stabilité L^∞) *On dira que la solution approchée (c_j^n) est L^∞ stable sur Ω , si on a :*

$$\|c^n\|_\infty := \sup_j |c_j^n| \leq C \text{ pour tout } n = 1, \dots, N \quad (3.21)$$

où C est une constante indépendante de h et Δt .

Proposition 3.8 *Sous les hypothèses (A_2) - (A_{10}) et la condition CFL (3.20), la solution approchée c_j^n définie par (3.17) satisfait le principe du maximum discret suivant :*

$$0 \leq c_j^n \leq 1 \quad \forall n, j \quad (3.22)$$

et de plus il existe une fonction c^* dans $L^\infty(Q)$, avec $0 \leq c^*(x, t) \leq 1$ p.p. dans Q , telle que,

$$c_h \rightharpoonup c^* \text{ dans } L^\infty(Q) \text{ faible}^* \quad (3.23)$$

où c_h est définie comme suit :

$$c_h(x, t) = c_j^n, \text{ pour } x \in M_j, \text{ et } t \in [t_n, t_{n+1}[.$$

Preuve : Nous montrons ce résultat par récurrence. D'après l'hypothèse (A_3) , il est supposé que $0 \leq c_{0j} \leq 1$. Nous supposons que $0 \leq c_j^n \leq 1 \quad \forall n, j$. Pour tout $M_j \in \Sigma_h$ et $n = 0 \dots N$, utilisant (3.20) on obtient

$$\left(1 - \frac{\Delta t^n}{|M_j| |\Phi_j|} \sum_{l \in \partial M_j} c_j^n (-\bar{q}_l^n \cdot \bar{n}_{jl})^+ |l| \right) \geq 0, \quad (3.24)$$

3.5. Stabilité L^∞ et estimations BV

ce qui implique que $S_j^n \geq 0$ pour tout $j \in I$, donc $c_j^{n+1} \geq 0$, puisque la matrice A^n est monotone. Maintenant selon le schéma dans (3.17), on a :

$$\begin{aligned} & c_j^{n+1} \left[1 + \frac{\Delta t^n}{|M_j|\Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j \setminus \Gamma} \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l| + \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} R_j \right] - \frac{\Delta t^n}{|M_j|\Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j \setminus \Gamma} c_l^{n+1} \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l| \\ &= c_j^n \left[1 - \frac{\Delta t^n}{|M_j|\Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j} (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| \right] + \frac{\Delta t^n}{|M_j|\Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j} c_j^n (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| + \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} f_{sj}^n, \end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned} & (1 - c_j^{n+1}) \left[1 + \frac{\Delta t^n}{|M_j|\Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j \setminus \Gamma} \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l| + \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} R_j \right] - \frac{\Delta t^n}{|M_j|\Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j \setminus \Gamma} (1 - c_l^{n+1}) \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l| \\ &= (1 - c_j^n) \left[1 - \frac{\Delta t^n}{|M_j|\Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j} (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| \right] + \frac{\Delta t^n}{|M_j|\Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j} (1 - c_l^n) (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| \\ &+ \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} (f_{sj}^n + R_j). \end{aligned}$$

Finalement on trouve

$$A^n (\mathbb{I} - \mathbb{C}^{n+1}) = \mathbb{S}^{*,n}, \quad \mathbb{I} = (1, \dots, 1)^t,$$

où

$$\mathbb{S}^{*,n} = (S_j^{*,n})_{1 \leq j \leq N_v},$$

et

$$\begin{aligned} S_j^{*,n} &= (1 - c_j^n) \left[1 - \frac{\Delta t^n}{|M_j|\Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j} (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| \right] \\ &+ \frac{\Delta t^n}{|M_j|\Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j} (1 - c_l^n) (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| + \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} (f_{sj}^n + R_j). \end{aligned}$$

Ainsi $S_j^{*,n} \geq 0 \forall j \in I$ et l'utilisation de la monotonie de la matrice A^n termine la démonstration du $0 \leq c_j^n \leq 1 \forall n, j$.

3.5. Stabilité L^∞ et estimations BV

De plus on a

$$0 \leq c_h \leq 1$$

donc c_h est une suite bornée dans $L^\infty(Q)$, par conséquent, il existe une sous-suite, qu'on note encore c_h , telle que :

$$c_h \rightharpoonup c^* \text{ dans } L^\infty(Q) \text{ faible}^*.$$

Dans ce qui suit, nous donnons quelques estimations pour la variation totale de la concentration, qui vont nous servir pour montrer la convergence forte de la solution approchée c_h vers c^* dans $L^2(Q)$.

Lemme 3.9 *Sous les mêmes hypothèses que dans la Proposition 3.8, on a pour le schéma (3.17), les estimations suivantes :*

$$A := \sum_{n,l} \Delta t^n (c_l^n - c_j^n)^2 |\bar{q}_l^n \cdot \bar{n}_{jl}| |l| \leq C_0 \Delta t + C_1, \quad (3.25)$$

$$B := \sum_{n,l} \Delta t^n (c_l^{n+1} - c_j^{n+1})^2 D_{jl}^n |l| \leq C_0 h^2 + C_1 h. \quad (3.26)$$

où C_0 et C_1 sont des constantes indépendantes de h et Δt .

Preuve : On réécrit le schéma (3.17) sous la forme suivante :

$$c_j^{n+1} = w_j^n + \frac{\Delta t^n}{\Phi_j |M_j|} \sum_{l \in \partial M_j \setminus \Gamma} (c_l^{n+1} - c_j^{n+1}) \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l| - \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} R_j c_j^{n+1}, \quad (3.27)$$

où

$$w_j^n = c_j^n + \frac{\Delta t^n}{\Phi_j |M_j|} \sum_{l \in \partial M_j} (c_l^n - c_j^n) (-\bar{q}_l^n \cdot \bar{n}_{jl})^+ |l| + \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} f_{sj}^n. \quad (3.28)$$

Utilisant l'identité suivante :

$$\frac{1}{2}(a - b)^2 = \frac{1}{2}(b^2 - a^2) + a(a - b), \quad \forall a, b \in \mathbb{R},$$

3.5. Stabilité L^∞ et estimations BV

on obtient

$$\begin{aligned}
A^* &:= \frac{\Delta t^n}{2} \sum_{j \in I} \sum_{l \in \partial M_j} (c_l^n - c_j^n)^2 (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l|, \\
&= \frac{\Delta t^n}{2} \sum_{j \in I} \sum_{l \in \partial M_j} ((c_l^n)^2 - (c_j^n)^2) (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| + \Delta t^n \sum_{j \in I} \sum_{l \in \partial M_j} c_j^n (c_j^n - c_l^n) (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l|, \\
&= \frac{\Delta t^n}{2} \sum_{j \in I} \sum_{l \in \partial M_j \setminus \Gamma} ((c_l^n)^2 (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| - (c_j^n)^2 (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l|), \\
&+ \frac{\Delta t^n}{2} \sum_{j \in I} \sum_{l \in \partial M_j \cap \Gamma_1} q_0 (c_l^n)^2 |\partial M_j \cap \Gamma_1| + \Delta t^n \sum_{j \in I} \sum_{l \in \partial M_j} c_j^n (c_j^n - c_l^n) (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l|.
\end{aligned}$$

d'après l'équation de pression-vitesse (3.1) on a

$$\sum_{l \in \partial M_j \setminus \Gamma} \vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl} |l| = 0, \quad \vec{q} \cdot \vec{n}|_{\Gamma_2} = 0 \text{ et } \vec{q} \cdot \vec{n}|_{\Gamma_3} \geq 0,$$

et alors

$$\begin{aligned}
A^* &= \frac{\Delta t^n}{2} \sum_{l \in \mathcal{E}_h \setminus \Gamma} (c_l^n)^2 (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| - (c_j^n)^2 (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l|, \\
&+ \frac{\Delta t^n}{2} \sum_{l \in \mathcal{E}_h \setminus \Gamma} (c_j^n)^2 (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{lj})^+ |l| - (c_l^n)^2 (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{lj})^+ |l|, \\
&+ \frac{\Delta t^n}{2} \sum_{j \in I} \sum_{l \in \partial M_j \cap \Gamma_1} q_0 (c_l^n)^2 |\partial M_j \cap \Gamma_1| + \Delta t^n \sum_{j \in I} \sum_{l \in \partial M_j} c_j^n (c_j^n - c_l^n) (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l|.
\end{aligned}$$

Utilisant l'équation (3.28) pour remplacer le dernier terme, on trouve

$$\begin{aligned}
A^* &= \frac{\Delta t^n}{2} \sum_{j \in I} \sum_{l \in \partial M_j \cap \Gamma_1} q_0 (c_l^n)^2 |\partial M_j \cap \Gamma_1| + \Delta t^n \sum_{j \in I} \Phi_j |M_j| c_j^n (c_j^n - w_j^n) \\
&+ \Delta t^n \sum_{j \in I} |M_j| f_{sj}^n c_j^n.
\end{aligned}$$

Donc

$$A^* \leq \frac{\Delta t^n}{2} q_0 |\Gamma_1| + \Delta t^n \sum_{j \in I} \Phi_j |M_j| [(c_j^n)^2 - w_j^n c_j^n] + \Delta t^n \sum_{j \in I} |M_j| f_{sj}^n c_j^n.$$

3.5. Stabilité L^∞ et estimations BV

De la même façon, on obtient

$$\begin{aligned}
B^* &= \Delta t^n \sum_{l \in \mathcal{E}_h} (c_l^{n+1} - c_j^{n+1})^2 \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l| \\
&= \Delta t^n \sum_{l \in \mathcal{E}_h} (c_l^{n+1} - c_j^{n+1}) c_l^{n+1} \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l| + \Delta t^n \sum_{l \in \mathcal{E}_h} (c_j^{n+1} - c_l^{n+1}) c_j^{n+1} \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l|, \\
&= \Delta t^n \sum_{j \in I} \sum_{l \in \partial M_j} (c_j^{n+1} - c_l^{n+1}) c_j^{n+1} \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l|, \tag{3.29} \\
&= \Delta t^n \sum_j \Phi_j |M_j| (w_j^n - c_j^{n+1}) c_j^{n+1} - \sum_j |M_j| \Delta t^n R_j (c_j^{n+1})^2, \\
&\leq \Delta t^n \sum_{j \in I} \Phi_j |M_j| [w_j^n c_j^{n+1} - (c_j^{n+1})^2].
\end{aligned}$$

Par conséquent

$$\begin{aligned}
A^* + B^* &= \frac{\Delta t^n}{2} \sum_{j \in I} \sum_{l \in \partial M_j} (c_l^n - c_j^n)^2 (-\bar{q}_l^n \cdot \bar{n}_{jl})^+ |l| + \Delta t^n \sum_{l \in \mathcal{E}_h} (c_l^{n+1} - c_j^{n+1})^2 \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l|, \\
&\leq \frac{\Delta t^n}{2} q_0 |\Gamma_1| + \Delta t^n \sum_{j \in I} \Phi_j |M_j| [(c_j^n)^2 - (c_j^{n+1})^2] \\
&\quad + \Delta t^n \left[\sum_{j \in I} \Phi_j |M_j| (w_j^n c_j^{n+1} - w_j^n c_j^n) \right] + \Delta t^n \sum_{j \in I} |M_j| f_{sj}^n c_j^n.
\end{aligned}$$

En passant à la somme sur $A^* + B^*$ pour $n = 0$ à N , on obtient

$$\begin{aligned}
\sum_n (A^* + B^*) &= \frac{1}{2} \sum_{n,j} \Delta t^n \sum_{l \in \partial M_j} (c_l^n - c_j^n)^2 (-\bar{q}_l^n \cdot \bar{n}_{jl})^+ |l| + \sum_{n,l \in \mathcal{E}_h} \Delta t^n (c_l^{n+1} - c_j^{n+1})^2 \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l|, \\
&\leq \frac{T}{2} q_0 |\Gamma_1| + \Delta t \sum_j \Phi_j |M_j| [(c_{0j})^2 - (c_j^{N+1})^2] \\
&\quad + \sum_{n,j} \Delta t^n \Phi_j |M_j| (w_j^n c_j^{n+1} - w_j^n c_j^n) + |\Omega| T \|f\|_{L^2(Q)}, \\
&\leq \frac{T}{2} q_0 |\Gamma_1| + \Delta t \Phi^+ |\Omega| \|c_0\|_{L^\infty(\Omega)}^2 + \sum_{n,j} \Delta t^n \Phi_j |M_j| w_j^n c_j^{n+1} + |\Omega| T \|f\|_{L^2(Q)}, \\
&\leq \frac{T}{2} q_0 |\Gamma_1| + \Delta t \Phi^+ |\Omega| \|c_0\|_{L^\infty(\Omega)}^2 + T \Phi^+ |\Omega| + |\Omega| T \|f\|_{L^2(Q)} \\
&:= C_0 \Delta t + C_1.
\end{aligned}$$

3.5. Stabilité L^∞ et estimations BV

Ceci implique les estimations suivantes :

$$\frac{\Delta t^n}{2} \sum_{j \in I} \sum_{l \in \partial M_j} (c_l^n - c_j^n)^2 (-\bar{q}_l^n \cdot \bar{n}_{jl})^+ |l| + \Delta t^n \sum_{l \in \mathcal{E}_h} (c_l^{n+1} - c_j^{n+1})^2 \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l| \leq C_0 \Delta t + C_1, \quad (3.30)$$

et

$$A := \sum_{n,l} \Delta t^n (c_l^n - c_j^n)^2 |\bar{q}_l^n \cdot \bar{n}_{jl}| |l| \leq C_0 \Delta t + C_1.$$

Puisque $\delta_{jl} \leq H \leq (\frac{\beta}{\gamma})h$, on trouve

$$B := \sum_{n,l} \Delta t^n (c_l^{n+1} - c_j^{n+1})^2 D_{jl}^n |l| \leq C_0 \frac{\beta}{\gamma C_q} h^2 + C_1 \frac{\beta}{\gamma} h.$$

Ceci termine la preuve du Lemme 3.9.

Lemme 3.10 *Sous les hypothèses (A_1) - (A_{10}) , les estimations suivantes sont vérifiées pour le schéma (3.17) sous la condition CFL (3.20) :*

$$TV_1(c_h) := \sum_{n,l \in \mathcal{E}_h} \Delta t^n |c_l^n - c_j^n| |\bar{q}_l^n \cdot \bar{n}_{jl}| |l| \leq \sqrt{C_2 + C_3 h^{-1}}, \quad (3.31)$$

$$TV_2(c_h) := \sum_{n,l \in \mathcal{E}_h} \Delta t^n |c_l^n - c_j^n| D_{jl}^n |l| \leq \sqrt{C_4 \Delta t + C_5}, \quad (3.32)$$

où $(C_i)_{2 \leq i \leq 5}$ sont des constantes indépendantes de h et Δt .

Preuve : On a

$$\sum_{n,l} \Delta t^n |c_l^n - c_j^n| |\bar{q}_l^n \cdot \bar{n}_{jl}| |l| \leq \left(\sum_{n,l} \Delta t^n (c_l^n - c_j^n)^2 |\bar{q}_l^n \cdot \bar{n}_{jl}| |l| \right)^{1/2} \left(\sum_{n,l} \Delta t^n |\bar{q}_l^n \cdot \bar{n}_{jl}| |l| \right)^{1/2}$$

3.5. Stabilité L^∞ et estimations BV

utilisant l'estimation (3.25) du Lemme 3.9, on obtient

$$\begin{aligned}
\sum_{n,l} \Delta t^n |c_l^n - c_j^n |\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl}| |l| &\leq \sqrt{C_0 \Delta t + C_1} (\|\vec{q}\|_{(L^\infty(Q))^d} T)^{1/2} \left(\frac{1}{2} \sum_j |\partial M_j| \right)^{1/2}, \\
&\leq \sqrt{C_0 \Delta t + C_1} (\|\vec{q}\|_{(L^\infty(Q))^d} T)^{1/2} \left(\frac{1}{2h} \sum_j |M_j| \right)^{1/2}, \\
&\leq \sqrt{C_0 \Delta t + C_1} \left(\frac{|\Omega|}{2} \right)^{1/2} h^{-1/2}, \\
&= (C_0 \frac{\Delta t}{h} + \frac{C_1}{h})^{1/2} \left(\frac{|\Omega|}{2} \right)^{1/2} h,
\end{aligned}$$

avec la condition CFL (3.20) on obtient

$$TV_1(c_h) := \sum_{n=0}^N \sum_{l \in \mathcal{E}_h} \Delta t^n |c_l^n - c_j^n |\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl}| |l| \leq \sqrt{C_2 + C_3 h^{-1}},$$

où

$$C_2 = \frac{C_0}{C_q} |\Omega|, \text{ et } C_3 = C_1 |\Omega|.$$

De même, on obtient

$$\sum_{n,l} \Delta t^n (c_l^{n+1} - c_j^{n+1}) D_{jl}^n |l| \leq \left(\sum_{n,l} \Delta t^n (c_l^{n+1} - c_j^{n+1})^2 D_{jl}^n |l| \right)^{1/2} \left(\sum_{n,l} \Delta t^n D_{jl}^n |l| \right)^{1/2},$$

utilisant l'estimation (3.26) du Lemme 3.9 et la Propriété 3.5, on obtient

$$\begin{aligned}
\sum_{n,l} \Delta t^n (c_l^{n+1} - c_j^{n+1}) D_{jl}^n |l| &\leq \sqrt{C_0 \Delta t + C_1} \left(\frac{\beta}{2\gamma} h \right)^{1/2} (D^+ T)^{1/2} \left(\frac{1}{2} \sum_j |\partial M_j| \right)^{1/2}, \\
&\leq \sqrt{C_0 \Delta t + C_1} \left(\frac{\beta}{2\gamma} \right)^{1/2} (D^+ T)^{1/2} \left(\frac{|\Omega|}{2} \right)^{1/2}, \\
&:= \sqrt{C_4 \Delta t + C_5},
\end{aligned}$$

où

$$C_4 = C_0 \frac{\beta}{4\gamma} D^+ T |\Omega|, \text{ et } C_5 = C_1 \frac{\beta}{4\gamma} D^+ T |\Omega|.$$

3.5. Stabilité L^∞ et estimations BV

Ce qui achève la démonstration du Lemme 3.10.

Proposition 3.11 *Sous les hypothèses (A_1) - (A_{10}) et la condition CFL (3.20), on obtient les estimations BV suivantes :*

$$\sum_{n,j} \Delta t^n |M_j| (c_j^{n+1} - c_j^n)^2 \leq C_6(\Delta t)^2 + C_7\Delta t, \quad (3.33)$$

$$\sum_{n,j} \Delta t^n |l| (c_l^n - c_j^n)^2 \leq C_8 h^2 + C_9 h, \quad (3.34)$$

avec $(C_i)_{6 \leq i \leq 9}$ sont des constantes indépendantes de h et Δt .

Preuve : Multiplions l'équation (3.17) par $c_j^{n+1} - c_j^n$ et par sommation sur $j \in I$ on obtient :

$$\begin{aligned} \sum_{j \in I} \Phi_j |M_j| (c_j^{n+1} - c_j^n)^2 &= \Delta t^n \sum_j \sum_{l \in \partial M_j} (c_j^{n+1} - c_j^n)(c_l^n - c_j^n)(-\bar{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| \\ &\quad + \Delta t^n \sum_j \sum_{l \in \partial M_j \setminus \Gamma} (c_j^{n+1} - c_j^n)(c_l^{n+1} - c_j^{n+1}) \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l| \\ &\quad - \sum_j \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} R_j c_j^{n+1} (c_j^{n+1} - c_j^n) + \sum_j \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} f_{sj}^n (c_j^{n+1} - c_j^n), \\ &:= A^{n+1} + B^{n+1} - A^n - B^n + Y_R^n + Z_f^n \end{aligned}$$

où

$$A^s = \Delta t^n \sum_j \sum_{l \in \partial M_j} c_j^s (c_l^n - c_j^n)(-\bar{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l|, \quad s = n \text{ or } n+1,$$

$$B^s = \Delta t^n \sum_j \sum_{l \in \partial M_j \setminus \Gamma} c_j^s (c_l^{n+1} - c_j^{n+1}) \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l|, \quad s = n \text{ or } n+1,$$

$$Y_R^n = - \sum_j \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} R_j c_j^{n+1} (c_j^{n+1} - c_j^n) \text{ et } Z_f^n = \sum_j \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} f_{sj}^n (c_j^{n+1} - c_j^n).$$

3.5. Stabilité L^∞ et estimations BV

alors

$$\begin{aligned} \sum_n |A^s| &\leq \sum_{n,l} \Delta t^n c_j^s (c_l^n - c_j^n) (-\bar{q}_l^n \cdot \bar{n}_{jl})^+ |l| + \sum_{n,l} c_l^s (c_j^n - c_l^n) (-\bar{q}_l^n \cdot \bar{n}_{lj})^+ |l| \\ &\leq \sum_{n,l} \frac{\Delta t^n}{2} [(c_l^n - c_j^n)^2 + (c_j^s)^2] |-\bar{q}_l^n \cdot \bar{n}_{jl}| |l| \\ &\quad + \sum_{n,l} \frac{\Delta t^n}{2} [(c_l^n - c_j^n)^2 + (c_l^s)^2] |-\bar{q}_l^n \cdot \bar{n}_{jl}| |l|, \end{aligned}$$

utilisant l'estimation (3.25) du Lemme 3.9, on obtient

$$\sum_n |A^s| \leq C_0 \Delta t + C_1 + \|\bar{q}\|_{(L^\infty(Q))^d} \Delta t \left(\frac{|\Omega|}{2h} \right),$$

avec la condition CFL (3.20), on déduit

$$\sum_n |A^s| \leq C_0 \Delta t + C_1 + \|\bar{q}\|_{(L^\infty(Q))^d} \left(\frac{|\Omega|}{2C_q} \right),$$

et on a aussi

$$\begin{aligned} \sum_n |B^s| &\leq \sum_{n,l} \Delta t^n (c_j^s - c_l^s) (c_l^{n+1} - c_j^{n+1}) \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l|, \\ &\leq \sum_{n,l} \frac{\Delta t^n}{2} [(c_l^{n+1} - c_j^{n+1})^2 + (c_j^s - c_l^s)^2] \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l|, \end{aligned}$$

avec l'équation (3.30), on trouve

$$\begin{aligned} \sum_n |B^s| &\leq C_0 \Delta t + C_1, \\ \sum_n |Y_R^n| &= \sum_{n,j} \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} R_j [(c_j^{n+1})^2 + c_j^{n+1} c_j^n] \leq 2N \frac{T}{\Phi_-} \|R\|_{L^\infty(\Omega)}, \end{aligned}$$

et

$$\sum_n |Z_f^n| = \sum_{n,j} \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} f_{sj}^n |c_j^{n+1} - c_j^n| \leq \frac{2T}{\Phi_-} \|f\|_{L^2(Q)}.$$

3.5. Stabilité L^∞ et estimations BV

Par conséquent

$$\begin{aligned}
\sum_{j,n} \Phi_j |M_j| (c_j^{n+1} - c_j^n)^2 &\leq \left(C_0 \Delta t + C_1 + \|\bar{q}\|_{(L^\infty(Q))^d} \left(\frac{|\Omega|}{C_q} \right) \right) \\
&\quad + (C_0 \Delta t + C_1) + 2N \frac{T}{\Phi_-} \|R\|_{L^\infty(\Omega)} + \frac{2T}{\Phi_-} \|f\|_{L^2(Q)}, \\
&= C_0 \Delta t + C_1 + \|\bar{q}\|_{(L^\infty(Q))^d} \left(\frac{|\Omega|}{C_q} \right) + 2N \frac{T}{\Phi_-} \|R\|_{L^\infty(\Omega)} \\
&\quad + \frac{2T}{\Phi_-} \|f\|_{L^2(Q)}.
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Maintenant avec l'estimation (3.26) du Lemme 3.9 et la Propriété 3.5, on trouve

$$\sum_{n,l} \Delta t^n (c_l^n - c_j^n)^2 D_- |l| \leq C_0 \frac{\beta}{\gamma C_q} h^2 + C_1 \frac{\beta}{\gamma} h,$$

ce qui implique

$$\sum_{n,j} \Delta t^n |l| (c_l^n - c_j^n)^2 \leq C_8 h^2 + C_9 h,$$

où

$$C_8 = C_0 \frac{\beta}{\gamma C_q D_-}, \text{ et } C_9 = C_1 \frac{\beta}{\gamma D_-}.$$

Enfin, on utilise l'hypothèse (A_2) et l'équation (3.35), d'où

$$\begin{aligned}
\sum_{n,j} \Delta t^n |M_j| (c_j^{n+1} - c_j^n)^2 &\leq \frac{\Delta t}{\Phi_-} \left[C_0 \Delta t + C_1 + \|\bar{q}\|_{(L^\infty(Q))^d} \left(\frac{|\Omega|}{C_q} \right) + 2N \frac{T}{\Phi_-} \|R\|_{L^\infty(\Omega)} \right] \\
&\quad + \frac{2T \Delta t}{\Phi_-^2} \|f\|_{L^2(Q)} \\
&= C_6 (\Delta t)^2 + C_7 \Delta t,
\end{aligned}$$

où

$$C_6 = \frac{C_0}{\Phi_-}, \text{ et } C_7 = \frac{C_1 + \|\bar{q}\|_{(L^\infty(Q))^d} \left(\frac{|\Omega|}{C_q} \right) + 2N \frac{T}{\Phi_-} \|R\|_{L^\infty(\Omega)} + \frac{2T}{\Phi_-} \|f\|_{L^2(Q)}}{\Phi_-}.$$

3.6 Résultats de convergence

Dans cette section, nous présentons un résultat de convergence donné dans le Théorème 3.18. La difficulté principale liée à la convergence de la solution approchée du schéma combiné est le couplage entre l'équation de vitesse-pressure et l'équation de la concentration. Pour un problème modèle simple, un résultat de convergence pour un schéma combiné EFM-VF pour un écoulement immiscible est donné dans [94], à l'aide des estimations à priori. Toujours dans le cas des écoulements immiscibles, on trouve dans [5] un autre résultat de convergence pour une équation de convection-diffusion dégénérée sans prise en compte du couplage. D'autres résultats de convergence pour un schéma combiné EFM et Galerkin ont été abordé dans [32] et [53]. Dans [10] on trouve un résultat de convergence d'un schéma EFM-VF pour un système non linéaire de type parabolique-hyperbolique.

Le résultat principal de ce chapitre est donné par le Théorème 3.18 dont la démonstration se fait en plusieurs étapes. Premièrement, on déduit la convergence forte (Théorème 3.12) de la solution approchée c_h dans $L^2(\Omega)$, en utilisant la stabilité L^∞ (Proposition 3.8), les estimations BV (Proposition 3.11) et des arguments de compacité. Dans l'étape suivante, on étudie le schéma découplé élément fini mixte, en donnant des résultats de convergence pour p_h et \vec{q}_h (Théorème 3.17). Ensuite on montre que (p_h, \vec{q}_h, c_h) converge vers (p^*, \vec{q}^*, c^*) . Enfin, le processus de convergence de (p_h, \vec{q}_h, c_h) vers (p, \vec{q}, c) (Théorème 3.18) est obtenu par passage à la limite dans la formulation variationnelle de l'équation de la concentration (3.17) et par unicité de solution pour le problème continu (3.1)-(3.2).

3.6.1 Convergence forte de la solution approchée

Théorème 3.12 *Sous les hypothèses (A_1) - (A_{10}) et la condition CFL (3.20), la solution approchée c_h donnée par le schéma (3.17) converge fortement vers c^* dans $L^2(Q)$ quand h et Δt tendent vers 0.*

Preuve : Utilisant les deux Propositions 3.8 et 3.11, on montre que la suite c_h est relativement compacte dans $L^2(Q)$ (voir [61] p. 136 et [63] Théorème 5.1 p. 12). On peut donc extraire une sous-suite qu'on note toujours c_h , telle que

$$c_h \rightarrow c^* \text{ in } L^2(Q) \tag{3.36}$$

3.6. Résultats de convergence

3.6.2 Étude du schéma découplé EFM

Définition 3.13 *Le schéma découplé EFM associé à l'équation (3.1) est donné par :*

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (\tilde{q}_h(t), \tilde{p}_h(t)) \in X_0^h \times M^h \text{ telles que :} \\ a(c^*(t); \tilde{q}_h(t), \vec{s}) + b(\vec{s}, \tilde{p}_h(t)) = L(\vec{s}) \\ b(\tilde{q}_h(t), v) = 0 \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \forall \vec{s} \in X_0^h \\ \forall v \in M^h \end{array} \quad (3.37)$$

Nous définissons également

$$p_h(x, t) = p_h^n(x), \quad \vec{q}_h(x, t) = \vec{q}_h^n(x), \text{ pour } t \in [t_n, t_{n+1}[\text{ et } 0 \leq n \leq N-1.$$

3.6.3 Stabilité et convergence du schéma découplé EFM

On rappelle dans le théorème suivant un résultat de convergence pour le schéma découplé (3.37) (voir, p.e., [27], [101]).

Théorème 3.14 *Soit $(\vec{q}^*(t), p^*(t))$ la solution du problème :*

$$\left\{ \begin{array}{l} a(c^*(t); \vec{q}^*(t), \vec{s}) + b(\vec{s}, p^*(t)) = L(\vec{s}) \\ b(\vec{q}^*(t), v) = 0 \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \forall \vec{s} \in X_0 \\ \forall v \in M \end{array} \quad (3.38)$$

Si $p^(t) \in H^1(\Omega)$, $\vec{q}^*(t) \in H^1(\Omega)$ et $\text{div } \vec{q}^*(t) \in H^1(\Omega)$ pour p.p. t dans J . Alors le schéma élément fini mixte donné par (3.37) a une solution unique $(\tilde{q}_h(t), \tilde{p}_h(t)) \in X_0^h \times M^h$ et il existe une constante C indépendante de h et $c^*(t)$ telle que :*

$$\|(\vec{q}^* - \tilde{q}_h)(t)\|_{H(\text{div}, \Omega)} + \|(p^* - \tilde{p}_h)(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq Ch. \quad (3.39)$$

Donnons maintenant une estimation L^∞ de la solution $(\tilde{q}_h, \tilde{p}_h)$ du schéma (3.37).

Lemme 3.15 (Stabilité du schéma découplé EFM)

Si on note par $(\tilde{q}_h, \tilde{p}_h)$ la solution découplée du schéma (3.37). Alors il existe une constante C indépendante de h , telle que pour p.p. $t \in J$, l'estimation suivante est vérifiée :

$$\|\tilde{q}_h(t)\|_{L^\infty(\Omega)} + \|\tilde{p}_h(t)\|_{L^\infty(\Omega)} \leq C. \quad (3.40)$$

Preuve : (Cf. Ohlberger [94] Lemme 4.8 p. 197).

3.6. Résultats de convergence

Théorème 3.16 Soit $(c_h^n, \vec{q}_h^n, p_h^n)$ la solution approchée du schéma combiné EFM et VF donné par (3.7)-(3.17) et $(\tilde{q}_h(t), \tilde{p}_h(t))$ la solution approchée du schéma découplé (3.37). Alors il existe une constante C indépendante de h , telle que pour tout $n \in 1, \dots, N$, on a l'estimation suivante :

$$\|(\vec{q}_h - \tilde{q}_h)(t_n)\|_{H(\text{div}, \Omega)} + \|(p_h - \tilde{p}_h)(t_n)\|_{L^2(\Omega)} \leq C \|(c_h - c^*)(t_n)\|_{L^2(\Omega)}. \quad (3.41)$$

Preuve : Par soustraction de l'équation du problème discret (3.7) par celle du problème linéaire découplé (3.37) on trouve :

$$\begin{cases} a(c_h; \vec{q}_h - \tilde{q}_h, \vec{s}_h) + a(c_h; \tilde{q}_h, \vec{s}_h) - a(c^*; \tilde{q}_h, \vec{s}_h) + b(p_h - \tilde{p}_h, \vec{s}_h) = 0 & \forall \vec{s}_h \in X_0^h \\ b(\vec{q}_h - \tilde{q}_h, v_h) = 0 & \forall v_h \in M^h \end{cases} \quad (3.42)$$

Il s'agit d'un problème de point selle pour $(\vec{q}_h - \tilde{q}_h, p_h - \tilde{p}_h)$ avec un second membre : $(g, \vec{s}_h) = a(c^*; \tilde{q}_h, \vec{s}_h) - a(c_h; \tilde{q}_h, \vec{s}_h)$. D'après le théorème de Brezzi pour l'existence et l'unicité d'un point selle (voir [27]) on a :

$$\|\vec{q}_h - \tilde{q}_h\|_{H(\text{div}, \Omega)} + \|p_h - \tilde{p}_h\|_{L^2(\Omega)} \leq C \|g\|_{L^2(\Omega)}. \quad (3.43)$$

En utilisant le résultat de stabilité dans le Lemme 3.15 et puisque $\mu(\cdot)$ est une fonction continue et lipchitzienne, on obtient :

$$\begin{aligned} \|g\|_{L^2(\Omega)} &\leq C \|(\mu(c^*) - \mu(c_h))\tilde{q}_h\|_{(L^2(\Omega))^d} \\ &\leq C \|\tilde{q}_h\|_{(L^\infty(\Omega))^d} \|c_h - c^*\|_{L^2(\Omega)}, \end{aligned}$$

ce qui implique

$$\|\vec{q}_h - \tilde{q}_h\|_{H(\text{div}, \Omega)} + \|p_h - \tilde{p}_h\|_{L^2(\Omega)} \leq C \|c_h - c^*\|_{L^2(\Omega)}. \quad (3.44)$$

Théorème 3.17 (Convergence du schéma découplé EFM)

Sous les mêmes hypothèses que le théorème 3.16, on obtient les résultats de convergence suivants :

$$p_h(t_n) \rightarrow p^*(t_n) \text{ fortement dans } L^2(\Omega) \quad \forall n \in \{0, \dots, N\} \quad (3.45)$$

3.6. Résultats de convergence

$$\vec{q}_h(t_n) \rightarrow \vec{q}^*(t_n) \text{ fortement dans } H(\text{div}, \Omega) \quad \forall n \in \{0, \dots, N\} \quad (3.46)$$

Preuve : C'est une conséquence immédiate du Théorème 3.16 et du Théorème 3.14.

3.6.4 Convergence du schéma combiné EFM et VF

Avant de présenter le théorème de convergence du schéma combiné EFM-VF, nous donnons tout d'abord une formulation variationnelle faible de l'équation de la concentration (3.2) sous la forme :

$$\begin{cases} c \in L^2(]0, T[; V); 0 \leq c(x, t) \leq 1 \text{ p.p. dans } Q \\ \int_Q -[\Phi c \varphi_t + (c\vec{q} - D(x, \vec{q})\nabla c) \cdot \nabla \varphi] dxdt + \int_Q R\varphi dxdt = \\ \int_Q f\varphi dxdt - \int_\Omega \Phi c_0 \varphi(x, 0) dx \end{cases} \quad \forall \varphi \in W \quad (3.47)$$

où

$$V = \{v \in H^1(\Omega); v = 0 \text{ sur } \Gamma_1\},$$

et

$$W = \{\varphi \in C^1(]0, T[, C^2(\bar{\Omega})); \varphi(\cdot, T) = 0 \text{ et } v = 0 \text{ on } \Gamma_1\}.$$

On suppose que les données sont assez régulières pour garantir l'existence et l'unicité de la solution faible du système couplé. Pour plus de détails voir [36], [66] et leurs bibliographies.

Théorème 3.18 *Sous les hypothèses (A₁)-(A₁₁) la solution approchée c_h converge vers c dans $L^2(Q)$, \vec{q}_h converge vers \vec{q} dans $H(\text{div}, \Omega)$ et p_h converge vers p dans $L^2(\Omega)$ quand h et Δt tendent vers zéro.*

Preuve : Soient $\varphi \in C^1(\bar{\Omega} \times [0, T])$ avec un support compact contenu dans $\bar{\Omega} \times [0, T]$.

On multiplie (3.17) par $\varphi(x_j, t_n)$ et en sommant sur j et n , on obtient :

$$\begin{aligned} \sum_{n,j} \Phi_j |M_j| (c_j^{n+1} - c_j^n) \varphi(x_j, t_n) &= \sum_{n,j} \Delta t^n \sum_{l \in \partial M_j} ((c_l^n - c_j^n) \varphi(x_j, t_n) (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| \\ &+ \sum_{n,j} \Delta t^n \sum_{l \in \partial M_j \setminus \Gamma} ((c_l^{n+1} - c_j^{n+1}) \varphi(x_j, t_n) \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l| \\ &- \sum_{n,j} \Delta t^n |M_j| R_j c_j^{n+1} \varphi(x_j, t_n) + \sum_{n,j} \Delta t^n |M_j| f_{s_j}^n \varphi(x_j, t_n). \end{aligned}$$

3.6. Résultats de convergence

Ceci peut s'écrire sous la forme

$$E_1^h + E_2^h + E_3^h + E_4^h + E_5^h = 0, \quad (3.48)$$

où

$$\begin{aligned} E_1^h &= \sum_{n,j} \Phi_j |M_j| (c_j^{n+1} - c_j^n) \varphi(x_j, t_n), \\ E_2^h &= - \sum_{n,j} \Delta t^n \sum_{l \in \partial M_j} ((c_l^n - c_j^n) \varphi(x_j, t_n) (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l|), \\ E_3^h &= - \sum_{n,j} \Delta t^n \sum_{l \in \partial M_j \setminus \Gamma} ((c_l^{n+1} - c_j^{n+1}) \varphi(x_j, t_n) \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l|), \\ E_4^h &= \sum_{n,j} \Delta t^n |M_j| R_j c_j^{n+1} \varphi(x_j, t_n), \end{aligned}$$

et

$$E_5^h = - \sum_{n,j} \Delta t^n |M_j| f_{sj}^n \varphi(x_j, t_n).$$

On a

$$E_1^h = \sum_{n,j} \Phi_j |M_j| (\varphi(x_j, t_n) - \varphi(x_j, t_{n-1})) c_j^n - \sum_{n,j} \Phi_j |M_j| \varphi(x_j, 0) c_{0j},$$

donc

$$\lim_{h \rightarrow 0} E_1^h = - \int_Q c^*(x, t) \partial_t \varphi(x, t) dx dt - \int_\Omega c_0(x) \varphi(x, 0) dx. \quad (3.49)$$

Lemme 3.19 *Sous les mêmes hypothèses que le Théorème 3.12, on a*

$$\lim_{h \rightarrow 0} E_2^h = E_2 = - \int_Q c^*(x, t) \vec{q}^*(x, t) \cdot \nabla \varphi dx dt. \quad (3.50)$$

Preuve : On définit

$$F_2^h = - \sum_{n=0}^{N-1} \Delta t^n \int_\Omega c_h(x, t_n) \vec{q}_h(t_n) \cdot \nabla \varphi(x, t_n) dx,$$

3.6. Résultats de convergence

par (3.36) et (3.46) on a

$$c_h \rightarrow c^* \text{ dans } L^2(Q) \text{ et } \vec{q}_h(t_n) \rightarrow \vec{q}^*(t_n) \text{ dans } (L^2(\Omega))^d,$$

donc

$$\lim_{h \rightarrow 0} F_2^h = E_2.$$

Pour conclure, montrons que E_2^h et F_2^h se comportent de la même manière quand h tend vers 0. Soit

$$F_{21}^h = - \sum_{n=0}^{N-1} \Delta t^n \sum_{j \in I} c_j^n \varphi(x_j, t_n) \sum_{l \in \partial M_j} |l| (\vec{q}_h^n \cdot \vec{n}_{jl}),$$

$$F_{22}^h = - \sum_{n=0}^{N-1} \Delta t^n \sum_{j \in I} c_j^n \sum_{l \in \partial M_j} \int_l \vec{q}_h^n \cdot \vec{n}_{jl} (\varphi(x, t_n) - \varphi(x_j, t_n)) dl,$$

et $F_2^h = F_{21}^h + F_{22}^h$. On a

$$|F_{22}^h| \leq \sum_{n=0}^{N-1} \Delta t^n \sum_{j \in I} c_j^n |\varphi(x, t_n) - \varphi(x_j, t_n)| \left| \sum_{l \in \partial M_j} \int_l \vec{q}_h^n \cdot \vec{n}_{jl} dl \right|.$$

Puisque $\varphi \in C^1(\bar{Q})$ avec un support compact contenu dans \bar{Q} , il existe une constante C telle que, pour $x \in M_j$ et $j \in I$, $|\varphi(x, t_n) - \varphi(x_j, t_n)| \leq Ch$, par conséquent

$$\lim_{h \rightarrow 0} F_{22}^h = 0.$$

$$\begin{aligned} F_{21}^h &= \sum_{n=0}^{N-1} \Delta t^n \sum_{j \in I} \sum_{l \in \partial M_j} c_j^n \varphi(x_j, t_n) (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| + \sum_{n=0}^{N-1} \Delta t^n \sum_{j \in I} \sum_{l \in \partial M_j} c_j^n \varphi(x_j, t_n) (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^- |l| \\ &= - \sum_{n=0}^{N-1} \Delta t^n \sum_{j \in I} \sum_{l \in \partial M_j} (c_l^n - c_j^n) (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| (\varphi(x_j, t_n) - \varphi(x_l, t_n)), \end{aligned}$$

Par suite

$$E_2^h - F_{21}^h = - \sum_{n=0}^{N-1} \Delta t^n \sum_{j \in I} \sum_{l \in \partial M_j} |l| (c_l^n - c_j^n) (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ (\varphi(x_j, t_n) - \varphi(x_l, t_n)),$$

3.6. Résultats de convergence

ce qui implique

$$|E_2^h - F_{21}^h| \leq Ch TV_1(c_h),$$

puisque $|\varphi(x_j, t_n) - \varphi(x_l, t_n)| \leq C\delta_{jl}$ grâce à l'hypothèse de régularité sur φ . En utilisant le Lemme 3.10, on déduit que

$$\lim_{h \rightarrow 0} (E_2^h - F_{21}^h) = 0.$$

Ceci termine la preuve du Lemme 3.19.

Lemme 3.20 *Sous les mêmes hypothèses que les Théorème 3.12 et le Théorème 3.17, on a*

$$\lim_{h \rightarrow 0} E_3^h = \int \int_Q D(x, \bar{q}^*) \nabla c^* \cdot \nabla \varphi dt dx.$$

Preuve : On a

$$\begin{aligned} E_3^h &= - \sum_{n,j} \Delta t^n c_j^{n+1} \sum_{l \in \partial M_j \setminus \Gamma} (\varphi(x_l, t_n) - \varphi(x_j, t_n)) \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l|, \\ &= \sum_{n,j} \Delta t^n c_j^{n+1} \sum_{\mathcal{T} \cap M_j \neq \emptyset} \sum_{l \in \partial M_j \cap \mathcal{T} \setminus \Gamma} (\varphi(x_l, t_n) - \varphi(x_j, t_n)) |\mathcal{T}| |\nabla N_{M_l, \mathcal{T}} D_{\mathcal{T}}^n \cdot \nabla N_{M_j, \mathcal{T}}|, \\ &= - \sum_{n,j} \Delta t^n c_j^{n+1} \sum_{\mathcal{T} \cap M_j \neq \emptyset} \sum_{l \in \partial M_j \cap \mathcal{T} \setminus \Gamma} (\nabla \varphi_{\mathcal{T}}^n D_{\mathcal{T}}^n \cdot \vec{n}_{jl} |l|), \\ &= - \sum_{n,j} \Delta t^n c_j^{n+1} \sum_{l \in \partial M_j \setminus \Gamma} D_l^n \nabla \varphi_l^n \cdot \vec{n}_{jl} |l|, \\ &= \sum_{n,j} \Delta t^n c_j^{n+1} \sum_{l \in \partial M_j \cap \Gamma} D_l^n \nabla \varphi_l^n \cdot \vec{n}_{jl} |l| - \sum_{n,j} \Delta t^n c_j^{n+1} \sum_{l \in \partial M_j} D_l^n \nabla \varphi_l^n \cdot \vec{n}_{jl} |l|. \end{aligned}$$

Ce qui implique que

$$\begin{aligned} E_3^h &\rightarrow \int_0^T \int_{\Sigma} c^*(x, t) D(x, \bar{q}^*) \nabla \varphi(x, t) \cdot \vec{n} d\sigma dt - \int_Q c^*(x, t) \operatorname{div} (D(x, \bar{q}^*) \nabla \varphi(x, t)) dx dt, \\ &= \int \int_Q D(x, \bar{q}^*) \nabla c^*(x, t) \cdot \nabla \varphi(x, t) dx dt, \end{aligned}$$

et de même quand $h \rightarrow 0$

$$E_4^h = \sum_{n,j} \Delta t^n |M_j| R_j c_j^{n+1} \varphi(x_j, t_n) \longrightarrow \int_Q R(x) c^*(x, t) \varphi(x, t) dx dt.$$

3.7. Conclusion

Finalement, on trouve que

$$\lim_{h \rightarrow 0} E_5^h = - \int \int_Q f(x, t) \varphi(x, t) dx dt.$$

Ceci complète la preuve du Lemme 3.20.

Maintenant, par passage à la limite dans l'équation discrète de la concentration écrite sous la forme (3.48), on obtient :

$$\int_Q - [\Phi c^* \varphi_t + (c^* \bar{q}^* - D(x, \bar{q}^*) \nabla c^*) \cdot \nabla \varphi] dt dx + \int_Q R c^* \varphi dx dt = \quad (3.51)$$

$$\int_Q f(x, t) \varphi(x, t) dx dt - \int_\Omega \Phi c_0 \varphi(x, 0) dx \quad \forall \varphi \in W.$$

Alors (c^*, \bar{q}^*, p^*) est une solution faible du problème variationnel donné par (3.3)-(3.47) qui admet une solution unique (c, \bar{q}, p) (voir [36], [16], [70]). Par conséquent c_h converge vers c , \bar{q}_h converge vers \bar{q} et p_h converge vers p .

Ce qui termine la démonstration du Théorème 3.18.

3.7 Conclusion

Dans ce chapitre, on a étudié et analysé un schéma combiné entre une méthode éléments finis mixtes et une méthode des volumes finis, pour un système couplé entre une équation elliptique et une équation de convection-diffusion-réaction. Nous avons montré que le schéma volumes finis est L^∞ stable et satisfait une estimation BV, sous une condition CFL. Ensuite, nous avons obtenu un résultat de convergence vers la solution faible du problème couplé.

3.7. Conclusion

Chapitre 4

Simulations Numériques 2D d'Écoulements Miscibles en Milieux Poreux

Dans ce chapitre, nous présentons des tests numériques 2D dans des cas académiques et dans des cas proches de la réalité pour la simulation de l'écoulement et le transport à travers des milieux poreux hétérogènes. Pour cela nous avons développé un code de calcul en 2D, **MFlow**, basé sur le schéma éléments finis mixtes-volumes finis traité dans le chapitre précédent. Le code **MFlow** permet donc de résoudre un système couplé formé d'une équation elliptique (4.1) discrétisée par une méthode d'éléments finis mixtes hybrides et d'une équation parabolique linéaire de type diffusion- convection-réaction (4.2), discrétisée par une méthode de volumes finis de type "vertex centred" semi-implicite en temps. Pour la résolution des systèmes linéaires obtenus, le simulateur **MFlow** utilise les utilités de la bibliothèque *LAS-Pack*.

4.1 Introduction

Différentes méthodes numériques ont été développées et utilisées pour approcher le système d'edp modélisant des écoulements miscibles en milieux poreux. En effet, on peut citer la méthode des différences finis [110], [52], [12], des éléments

4.1. Introduction

finis mixtes [100], [27], [34], des éléments finis de Galerkin [56], [68], [80], [106] des caractéristiques [29], [102], [112], des volumes finis [61], [33], [64], [98], [85], [105], [28],... Chaque méthode a des avantages et des inconvénients différents. Comme les équations régissant les écoulements miscibles en milieux poreux, sont issues de lois de conservation physique, alors la méthode la plus appropriée à la résolution numérique de ce type d'edp est celle qui satisfait les propriétés suivantes :

- la conservation de la masse sur chaque élément ;
- la continuité des flux entre deux éléments adjacents ;
- une bonne approximation de la vitesse ;
- le principe du maximum discret ;
- l'adaptation à la géométrie complexe du domaine ;
- la prise en compte de l'anisotropie des hétérogénéités ;
- l'efficacité dans la résolution des systèmes linéaires obtenus.

Dans la littérature, il existe plusieurs codes pour simuler les écoulements en milieux poreux hétérogènes en utilisant différentes méthodes numériques. Nous citons par exemple, le code *Parssim 1* [11], développé par CSM (Center for Subsurface Modeling) à l'Université du Texas à Austin", permet de simuler l'écoulement et le transport d'un fluide dans un milieu poreux. La méthode des éléments finis mixtes est utilisée pour approcher l'équation d'écoulement par contre l'équation de transport est discrétisée par trois schémas différents (schémas de Godunov et la méthode des caractéristiques). Dans le cadre de la gestion à long term des déchets radioactifs en France, l'IRSN (Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire) a développé un code de calcul *MELODIE*. Ce logiciel est utilisé par l'IRSN comme un code de référence pour l'évaluation de l'impact d'un stockage profond sur la géosphère à partir du calcul du transfert des radio-éléments au travers d'un milieu poreux hétérogène. *FreeFem+* et *FreeFem+3D* (<http://www.freefem.org>) sont deux autres logiciels qui utilisent la méthode des éléments fins comme méthode d'approximation pour résoudre les edp. L'implémentation numérique de *MELODIE*, *FreeFem+* et *FreeFem+3D* est basée sur la méthode des éléments finis, d'où la perte de quelques propriétés physiques intéressantes (conservation de la masse, monotonie de la solution, ...). On peut aussi citer le code *UG* [14] développé par Interdisciplinary Center for Scientific Computing, Universität Heidelberg, Germany, permet de résoudre, à l'aide d'un schéma volumes finis centré sur les noeuds et un schéma de Galerkin discontinu

4.1. Introduction

en ordre plus élevé, des edp décrivant l'écoulement et le transport dans un milieu poreux. Le code *PORFLOW* (<http://www.acricfd.com>) basé sur une méthode de type volumes finis, donne des résultats intéressants pour la simulation de l'écoulement et le transport. Des tests numériques effectués par ces codes sont présentés dans [25].

Dans notre cas, on s'intéresse à un modèle d'écoulements incompressibles et miscibles ayant des applications dans l'ingénierie pétrolière et l'hydrogéologie. Cela conduit à un système couplé composé d'une équation elliptique, calculant le champ des vitesses de Darcy, et d'une équation de type diffusion-convection-réaction, modélisant le transport d'un fluide en une seule phase, par exemple un contaminant dissous dans l'eau. Evidemment, le milieu considéré n'est pas homogène et est en fait composé de diverses couches géologiques. De plus, on prend en compte la présence de fractures qui sont, dans les cas qui nous intéressent, des milieux poreux de grande perméabilité. Si ces fractures ne sont pas trop nombreuses, on les modélise individuellement. Lorsqu'elles sont trop nombreuses on calcule des paramètres effectifs à l'aide des techniques d'homogénéisation (cf. [79]). Le calcul des caractéristiques du milieu poreux "globalement équivalent" nécessite la résolution de problèmes elliptiques posés sur une cellule de base. La résolution numérique de ces problèmes locaux peut être réalisée par différentes méthodes (cf. [9]).

Ici, on rappelle les edp qui modélisent l'écoulement et le transport dans un milieu poreux :

Equation en vitesse-pression :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{q} = -\frac{K(x)}{\mu(c)} \nabla p & \text{dans } \Omega \times]0, T[\\ \operatorname{div} \vec{q} = 0 & \text{dans } \Omega \times]0, T[\\ \vec{q} \cdot \vec{n}|_{\Gamma_1} = -q_0; \quad \vec{q} \cdot \vec{n}|_{\Gamma_2} = 0; \quad p|_{\Gamma_3} = p_0 & \text{sur }]0, T[\end{array} \right. \quad (4.1)$$

Equation en concentration :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Phi(x) \frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div} (D(x, \vec{q}) \nabla c - c \vec{q}) + R(x)c = f(x, t) & \text{dans } \Omega \times]0, T[\\ c|_{\Gamma_1} = c_1; \quad D \nabla c \cdot \vec{n}|_{\Gamma_2} = 0; \quad (D \nabla c - c \vec{q}) \cdot \vec{n}|_{\Gamma_3} = c_3 & \text{sur }]0, T[\\ c(x, 0) = c_0(x) & \text{sur } \Omega \end{array} \right. \quad (4.2)$$

où la frontière Γ est composée de trois parties telles que $\Gamma = \bar{\Gamma}_1 \cup \bar{\Gamma}_2 \cup \bar{\Gamma}_3$, p et \vec{q} sont la pression et la vitesse de Darcy du fluide, Φ et K sont la porosité cinématique et la

4.2. Résolution numérique

perméabilité absolue du milieu poreux. La viscosité du fluide μ est une fonction non linéaire de la concentration c de la phase, et f est le terme source. R est le terme de réaction. Dans le cas des déchets radioactifs, il est donné par $R(x) = r\Phi(x)$, où r est le coefficient de décroissance radioactive qui dépend de la demi-vie temps $T_{1/2}$ des radionucléides par la relation $r = \frac{\ln 2}{T_{1/2}}$. q_0 est le flux imposé sur Γ_1 et p_0 est la pression donnée sur Γ_3 . c_1 est la concentration donnée sur Γ_1 , c_3 est le flux total donné sur Γ_3 . c_0 est la concentration initiale.

Le tenseur de diffusion-dispersion D est donné par :

$$D(x, \vec{q}) = d_e I + |\vec{q}| [\alpha_l E(\vec{q}) + \alpha_t (I - E(\vec{q}))]$$

avec $E_{ij}(\vec{q}) = \frac{q_i q_j}{|\vec{q}|^2}$, d_e est le coefficient de la diffusion moléculaire effective, α_l et α_t sont les dispersivités intrinsèques longitudinale et transversale respectivement.

4.2 Résolution numérique

Le schéma numérique utilisé pour résoudre le système d'équations formé par (4.1) et (4.2) est basé sur une combinaison entre une méthode des éléments finis mixtes hybrides et une méthode des volumes finis. La première méthode est appliquée pour approcher la vitesse de Darcy et la pression dans l'équation (4.1). La deuxième méthode est utilisée pour approcher la concentration dans l'équation (4.2). Ces méthodes permettent d'avoir des propriétés physiques intéressantes : conservation de la masse, principe du maximum discret, prise en compte de l'anisotropie etc.

4.2.1 Schéma EFM hybrides

La discrétisation de l'équation elliptique (4.1) par une méthode d'éléments finis mixtes mène à la résolution d'un système linéaire dont la matrice associée n'est pas définie positive. Numériquement cette méthode coûte trop chère au niveau du stockage de la matrice. L'une des approches utilisées pour ramener la résolution à celle d'un problème à matrice symétrique définie positive, consiste à dualiser les conditions de raccord des flux. Il s'agit d'introduire des multiplicateurs de Lagrange sur les arêtes pour obtenir la continuité des flux à travers les interfaces. On obtient

4.2. Résolution numérique

ainsi les méthodes mixtes hybrides (cf. [27]). La méthode des éléments finis mixtes hybrides utilisée dans notre code de calcul est définie par les fonctions de bases de l'espace de Raviart-Thomas de plus bas degré (ordre 0) (voir [101] et [107]). Nous désignons par L_g^h l'espace des fonctions constantes sur $L^2(\mathcal{E}_h)$, où \mathcal{E}_h est l'ensemble des arêtes de $(\Lambda_h)_{h>0}$. Il est défini par :

$$L_g^h = \{\mu_h \in L^2(\mathcal{E}_h); \mu_h|_L = Cte; \forall L \in \mathcal{E}_h; \mu_h|_{\Gamma_1} = g\} \quad (4.3)$$

L'approximation élément fini mixte hybrid $(\vec{q}_h(t), p_h(t), \lambda_h) \in X_0^h \times M^h \times L_{p_0}^h$ de $(\vec{q}(t), p(t), \lambda)$ est la solution du problème :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\mathcal{T}} \mu K^{-1} \vec{q}_h \cdot \vec{s}_h \, d\mathcal{T} - \int_{\mathcal{T}} p_h \operatorname{div} \vec{s}_h \, d\mathcal{T} + \sum_{L \in \mathcal{T}} \int_L \lambda_h \vec{s}_h \cdot \vec{n} \, dL = 0 \quad \forall \vec{s}_h \in RT_0 \\ \int_{\mathcal{T}} w_h \operatorname{div} \vec{q}_h \, d\mathcal{T} = 0 \quad \forall w_h \in M^h \\ \sum_{\mathcal{T} \in \Lambda_h} \sum_{L \in \mathcal{T}} \int_L \mu_h \vec{q}_h \cdot \vec{n} \, dL = \sum_{L \in \Gamma_1} \int_L q_0 \mu_h \, dL \quad \forall \mu_h \in L_0^h \end{array} \right. \quad (4.4)$$

où les espaces de dimension finie RT_0 et M^h ont été définis dans le chapitre 3.

Il est possible (voir, p.e., [27] et [20]) de ramener la solution du système (4.4) à une solution d'un autre système linéaire dont la seule inconnue est le vecteur des multiplicateurs de Lagrange λ_h , avec une matrice creuse, symétrique et définie positive. \vec{q}_h et p_h sont obtenues localement en résolvant un système linéaire sur chaque élément. Ces dernières années, la popularité de la méthode des éléments finis mixtes hybrides a fait des progrès considérables dans le cadre de développement des algorithmes efficaces pour résoudre ce système (voir, p.e., [35]).

4.2.2 Schéma VF semi-implicite "vertex centred"

Le schéma volumes finis utilisé dans **MFlow**, pour approcher l'équation en concentration, est de type "vertex centred" semi-implicite en temps. Il consiste à approcher le terme convectif par un schéma de Godunov et le terme diffusif par une approximation éléments finis P_1 . Le schéma considéré est semi-implicite : explicite pour la convection et implicite pour la diffusion. Il est à noter que le pas du temps est calculé automatiquement en respectant la condition CFL. Ainsi notre schéma

4.3. Test 1 : domaine homogène et isotrope

est donné par :

$$\begin{aligned} c_j^{n+1} - \frac{\Delta t^n}{|M_j|\Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j \setminus \Gamma} (c_l^{n+1} - c_j^{n+1}) \frac{D_{jl}^n}{\delta_{jl}} |l| + \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} R_j c_j^{n+1} \\ = c_j^n + \frac{\Delta t^n}{|M_j|\Phi_j} \sum_{l \in \partial M_j} (c_l^n - c_j^n) (-\vec{q}_l^n \cdot \vec{n}_{jl})^+ |l| + \frac{\Delta t^n}{\Phi_j} f_j^n \end{aligned} \quad (4.5)$$

où

$$D_{jl}^n = -\frac{|\mathcal{T}|}{|l|} \delta_{jl} \nabla N_{M_l, \mathcal{T}} \cdot D_{\mathcal{T}}^n \nabla N_{M_j, \mathcal{T}} \quad (4.6)$$

avec $N_{M_l, \mathcal{T}}$ sont les éléments finis P_1 standards et

$$D_{\mathcal{T}}^n = \frac{1}{|\mathcal{T}| \Delta t^n} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\mathcal{T}} D(x, \vec{q}_h^n) dx dt \quad (4.7)$$

Maintenant, supposons connu c_h^n à l'instant t_n , l'implémentation numérique du schéma combiné (4.4)-(4.5) se fait en plusieurs étapes. La première consiste à résoudre, grâce au schéma éléments finis mixtes hybrides (4.4), un système linéaire avec une matrice symétrique définie positive dont la seule inconnue est λ_h^n . Dans la deuxième étape on récupère la vitesse q_h^n et la pression p_h^n en résolvant un système linéaire 3×3 sur chaque élément. La dernière étape est consacrée (à l'aide du schéma volumes finis 4.5) au calcul de la concentration c_h^{n+1} à l'instant t_{n+1} en résolvant un système linéaire avec une matrice creuse.

4.3 Test 1 : domaine homogène et isotrope

Dans cet exemple, on valide notre schéma combiné pour un milieu homogène et isotrope Ω (voir la Figure 4.1), avec une perméabilité absolue égale à 1. Les conditions aux bords sont illustrées dans la Figure 4.2. Sur Γ_1 , le débit est fixé à $\vec{q} \cdot \vec{n} = -2.5$ et sur Γ_3 la pression est donnée par $p = 1$. Γ_2 est la partie imperméable du domaine. Les autres paramètres choisis pour cette simulation sont :

$$d_e = 10^{-05},$$

$$\mu = 1, \quad \alpha_l = 0, \quad \alpha_t = 0$$

$$\Phi = 1, \quad f(., t) = 1 \text{ sur } \Gamma_1 \text{ et } = 0 \text{ ailleurs}$$

Nous résumons dans le tableau 4.1, les données de maillage pour la simulation et le temps de calcul obtenu.

4.3. Test 1 : domaine homogène et isotrope

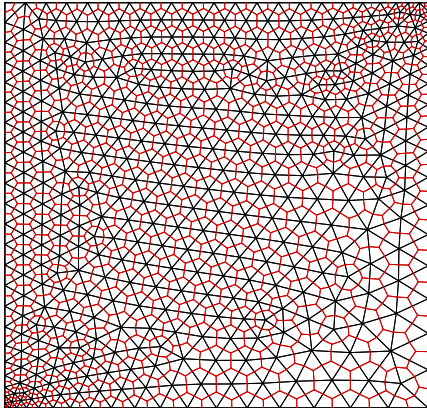


FIG. 4.1 – Test 1 : Maillage primal et dual .

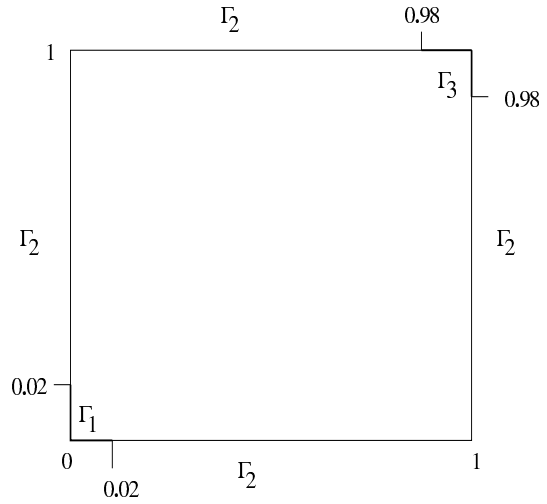


FIG. 4.2 – Test 1 : Conditions aux bords et géométrie.

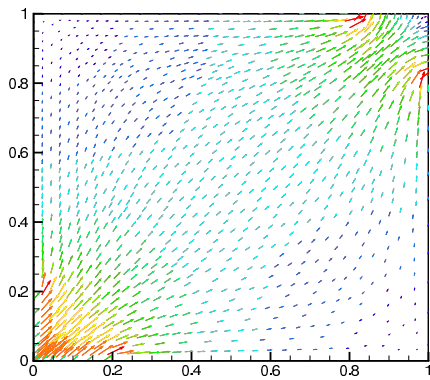


FIG. 4.3 – Test 1 : Vitesse de Darcy.

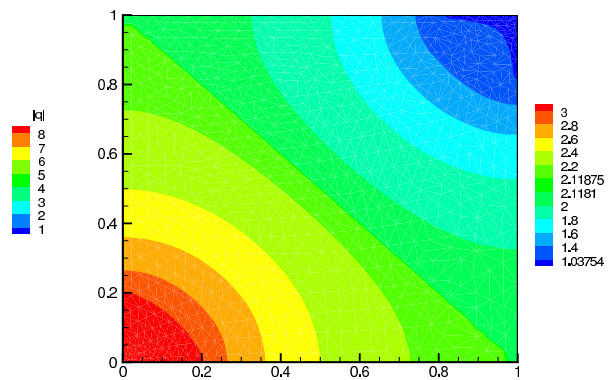


FIG. 4.4 – Test 1 : Pression.

4.3. Test 1 : domaine homogène et isotrope

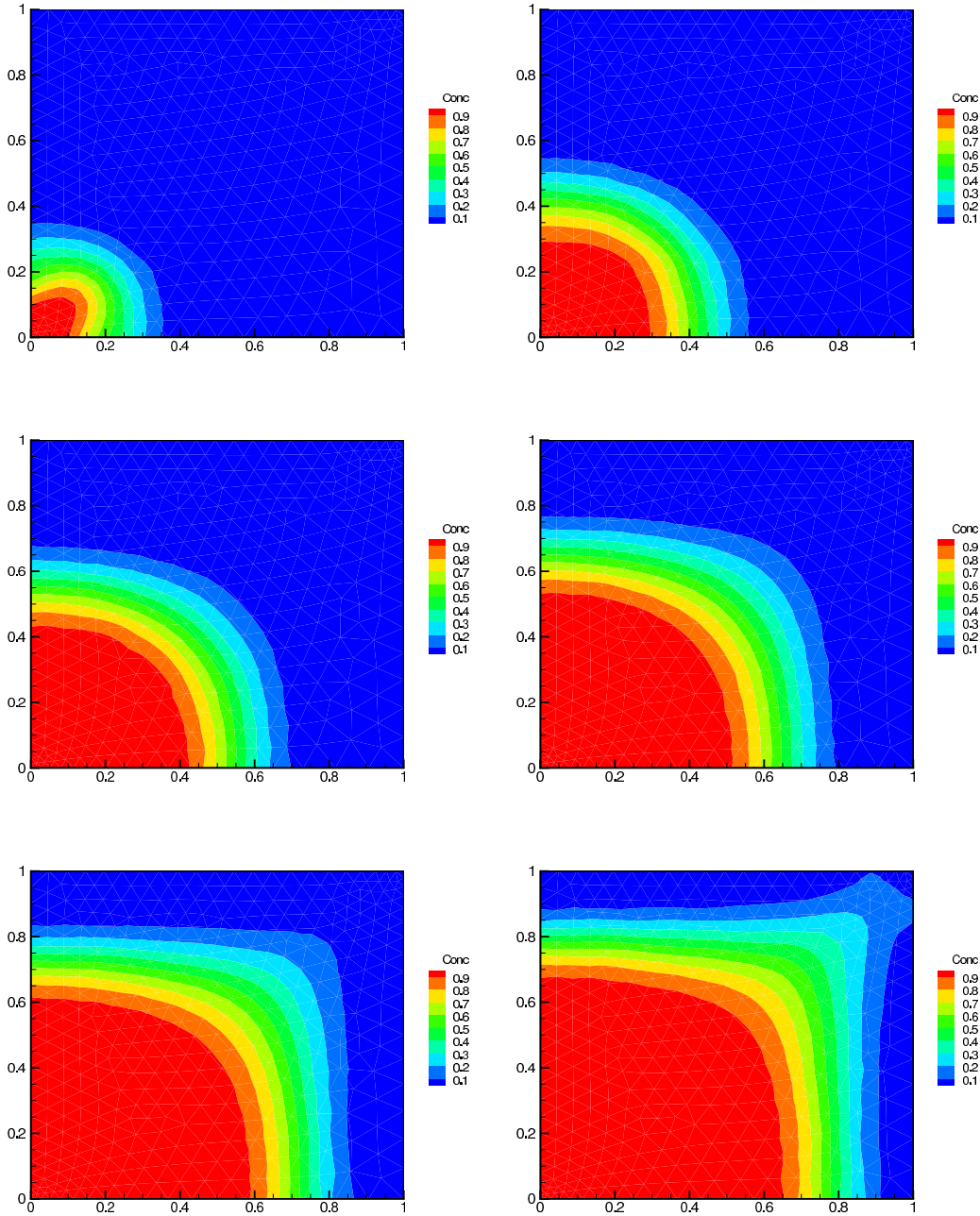


FIG. 4.5 – Test 1 : Profil de la concentration au cours du temps.

4.4. Test 2 : "Labyrinthe"

	nb de triangles	temps CPU	temps final
Maillage	656	0mn8.15s	1

TAB. 4.1 – Caractéristiques du maillage triangulaire et temps de calcul.

On présente dans les Figures 4.3 et 4.4 la vitesse de Darcy et la pression respectivement. Les différents profils de la concentration au cours du temps sont représentés dans la Figure 4.5.

4.4 Test 2 : "Labyrinthe"

Dans ce paragraphe, nous présentons les résultats obtenus pour la simulation du cas test "Labyrinthe" [106]. C'est un exercice de référence pour examiner la performance de notre schéma numérique EFM-VF dont le cas où la convection domine la diffusion dans l'équation en concentration.

Le domain du calcul est le carré $[0, 1] \times [0, 1]$ en mètre de côté un. Les perméabilités varient fortement (voir la Figure 4.6), le chemin dans la couleur rouge a une perméabilité élevée ($K = 1m/s$) tandis que la partie restante a une perméabilité très faible ($K = 10^{-6}m/s$). Les conditions aux bords utilisées sont une pression ($p = 1m$) imposée sur le côté droit de la frontière $\{1\} \times [0, 1]$ et une pression ($p = 0m$) imposée sur le côté gauche de la frontière $\{0\} \times [0, 1]$. Les parties inférieure et supérieure de la frontière sont supposées imperméables (flux nuls). Une source $f(x, t) = 1g/m^3s$ est placée sur $\{1\} \times [0.05, 0.1]$. Par simplicité, la porosité et la viscosité sont prises égales à 1. Dans le but de tester notre schéma dans le cas d'un modèle d'écoulement où la convection domine la diffusion dans l'équation (4.2), nous avons supposé que les coefficients de la dispersion/diffusion sont petits mais non négligeables ($de = 3.15e^{-4}m^2/s$, $\alpha_l = 5m$ et $\alpha_t = 0.5m$).

Le champ des vitesses et le profil de la pression associés au cas test "Labyrinthe" sont présentés respectivement dans les Figures 4.7 et 4.8. La vitesse de Darcy est bien approchée par la méthode EFMH et respecte très exactement la variation de la perméabilité. Les profils de la concentration sont illustrés dans les Figures 4.9-4.11. Le fluide injecté commence à se déplacer uniformément à partir de la partie d'injection par convection qui domine la diffusion. Ensuite le comportement du fluide

4.4. Test 2 : "Labyrinthe"

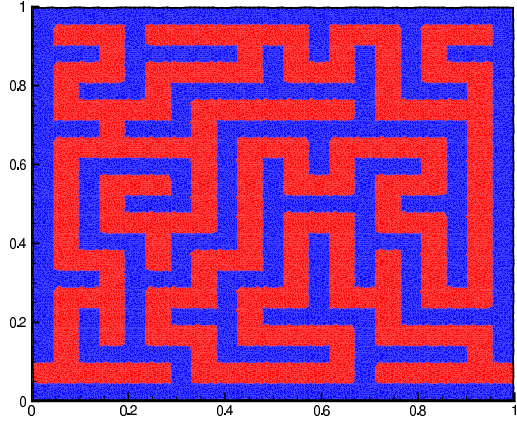


FIG. 4.6 – Test 2 : Distribution des perméabilités.

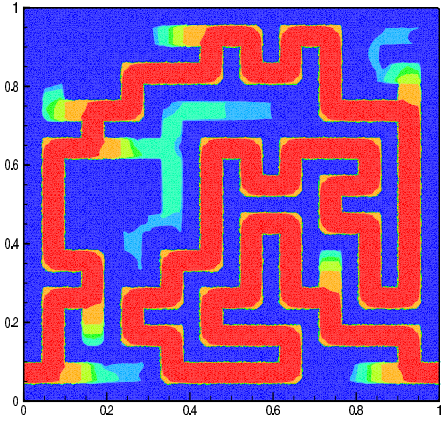


FIG. 4.7 – Test 2 : Vitesse de Darcy.

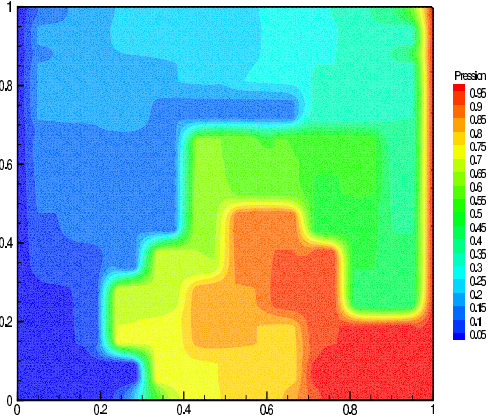


FIG. 4.8 – Test 2 : Pression.

4.4. Test 2 : "Labyrinthe"

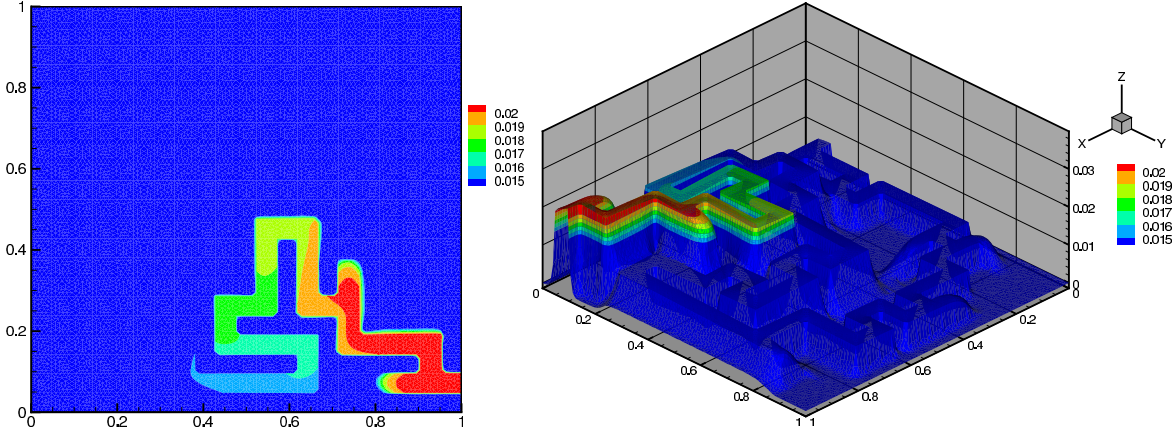


FIG. 4.9 – Test 2 : Concentrations à T=20 ans.

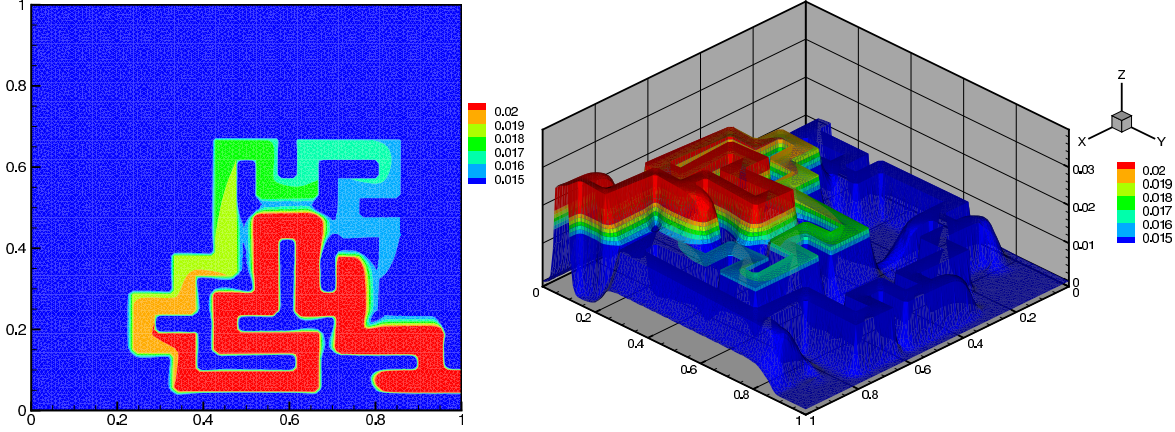


FIG. 4.10 – Test 2 : Concentrations à T=30 ans.

4.5. Test 3 : Exercice Couplex1

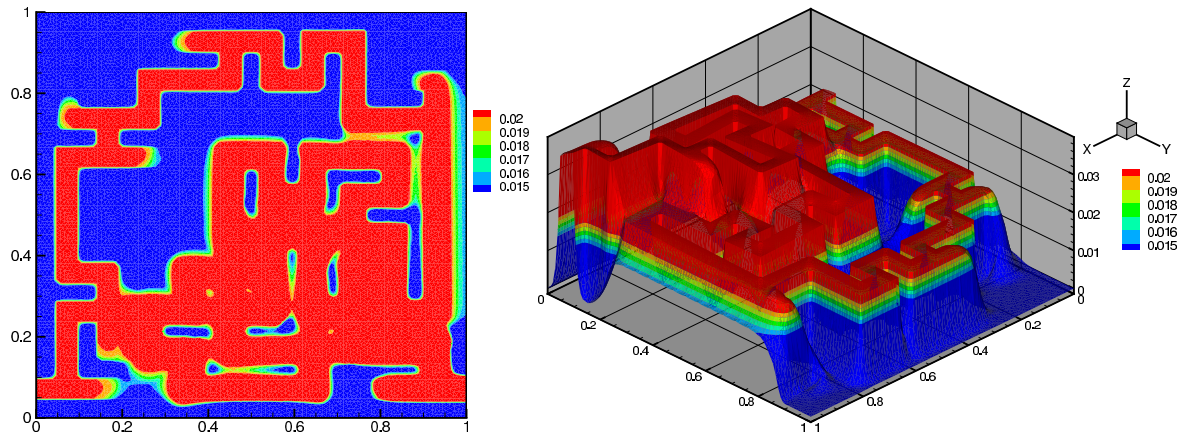


FIG. 4.11 – Test 2 : Concentrations à T=50 ans.

est régi par l'influence de la variation de la perméabilité et commence à se disperser aussi par diffusion au cours du temps. Ceci montre l'efficacité de notre schéma combiné qui a bien pris en considération le terme de diffusion qui est trop petit mais non négligeable. Le front de la concentration est très raide ceci est dû à la forte discontinuité de la perméabilité.

4.5 Test 3 : Exercice Couplex1

Dans le cadre de la gestion à long term des déchets radioactifs, l'ANDRA (Agence National pour la gestion des Déchets Radioactifs) a proposé une série d'exercices de Couplex au monde de la recherche (cf. page web <http://momas.univ-lyon1.fr>) pour tester les différentes approches numériques. Ici, on applique notre schéma EFM-FV au cas Couplex1 [26]. C'est un test de référence pour valider la performance des méthodes numériques. Il est destiné à simuler le transport des contaminants depuis un stockage en formation géologique profonde jusqu'aux exutoires de la biosphère. Le modèle mathématique décrivant la migration des contaminant est donné par une modélisation du comportement du fluid par une équation de Darcy (4.1) et une modélisation du transport des contaminants par une équation en concentration de type (4.2).

4.5. Test 3 : Exercice Couplex1

Couplex1	Marne	Calcaire	Argile	Dogger
$K(m/an)$	$3.1536e^{-5}$	6.3072	$3.1536e^{-6}$	25.2288

TAB. 4.2 – Test 3 : Perméabilité K dans les quatres couches géologiques.

Couplex1	$d_e(m^2/an)$	α_l	α_t	Φ	R
Dogger	$5.0e^{-4}$	50	1	0.1	$Log(2)/1.57e^{-7}$
Argile	$9.48e^{-7}$	0	0	0.001	$Log(2)/1.57e^{-7}$
Calcaire	$5.0e^{-4}$	50	1	0.1	$Log(2)/1.57e^{-7}$
Marne	$5.0e^{-4}$	0	0	0.1	$Log(2)/1.57e^{-7}$

TAB. 4.3 – Test 3 : Paramètres de diffusion/dispersion.

4.5.1 Description du modèle physique

Le domaine de calcul pour Couplex1 est un rectangle aplati de dimensions $[0, 25000] \times [0, 695]$ en mètres. Il est composé de quatre couches différentes, le dogger, l'argile, le calcaire et la marne (voir Figure 4.12). Pour ce domain, le calcul devrait être fait pour $t \in [0, T]$ avec $T = 10^7$ ans. On présente les différentes valeurs de la perméabilité K de Couplex1 dans la Table 4.2. Il faut noter que la très forte variation de la perméabilité entre les différentes roches géologiques, produit un écoulement très lent dans l'argile (milieu très imperméable) et beaucoup plus rapide dans le calcaire. Le dépôt se trouve à une profondeur de 450(mètres) à l'intérieur de la couche d'argile sous forme d'un rectangle uniforme $[18440, 21680] \times [244, 250]$ en mètres. Les conditions aux bords pour l'écoulement sont :

$$\left\{ \begin{array}{ll} p = 289 & \text{sur } \{25000\} \times [0, 200] \\ p = 310 & \text{sur } \{25000\} \times [350, 595] \\ p = 180 + 160x/25000 & \text{sur } [0, 25000] \times \{695\} \\ p = 200 & \text{sur } \{0\} \times [295, 595] \\ p = 286 & \text{sur } \{0\} \times [0, 200] \\ \frac{\partial p}{\partial n} = 0 & \text{sur le rest de la frontière.} \end{array} \right.$$

La table 4.3 contient les paramètres physiques pour l'Iode 129 dans l'équation de convection-diffusion-réaction.

Les valeurs du term source dans le dépôt sont données dans un fichier sous forme

4.5. Test 3 : Exercice Couplex1

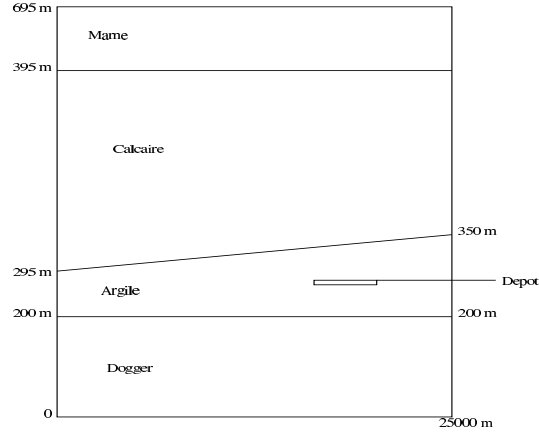


FIG. 4.12 – Test 3 : Domaine de calcul Ω .

d'un tableau dans [26]. Il est supposé qu'il n'y a pas de source en dehors du dépôt. La condition initiale de la concentration est $c_0(x) = 0$.

Les conditions aux bords pour le transport sont :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial c}{\partial n} = 0 & \text{sur } \{0\} \times [0, 200] \\ \frac{\partial c}{\partial n} = 0 & \text{sur } \{0\} \times [350, 595] \\ (D(x, \vec{q}) \nabla c - c \vec{q}) \cdot \vec{n} = 0 & \text{sur } [0, 25000] \times \{0\} \\ c = 0 & \text{sur le rest de la frontière.} \end{array} \right.$$

4.5.2 Résultats numériques

Plusieurs auteurs ont testé l'exercice Couplex1 en utilisant différents schémas numériques [25] et [26], (voir, p.e., [39], [80], [108]). Nous présentons ici les principaux résultats au sujet concernant les champs de la charge hydraulique et le transport d'Iode 129. La Figure 4.13 représente la distribution de la norme de la vitesse de Darcy. On remarque que la vitesse est faible dans la couche Marne, et assez faible dans la couche d'argile, ce qui signifie que cette dernière est moins perméable à l'eau et ralentit efficacement les éléments radioactifs à temps de demi-vie long. La zone colorée en bleu, où la vitesse de l'écoulement est très faible, montre le bon choix du site de stockage des déchets radioactifs à ce niveau. Les contours de la charge hydraulique sont présentés dans la Figure 4.14. Dans les Figures 4.15, 4.16, 4.17, 4.18 et 4.19, nous montrons les profils de la concentration pour cinq temps différents. Après 50110 années, la concentration de l'Iode 129 reste toujours très importante au niveau

4.5. Test 3 : Exercice Couplex1

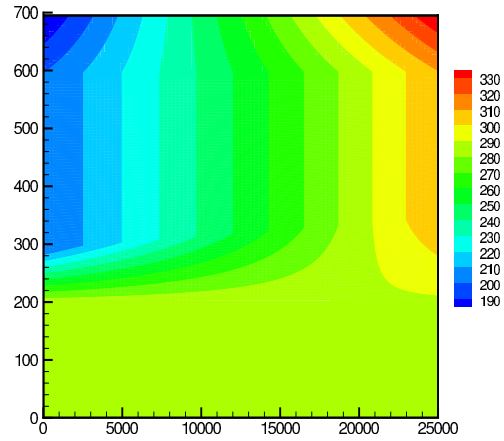
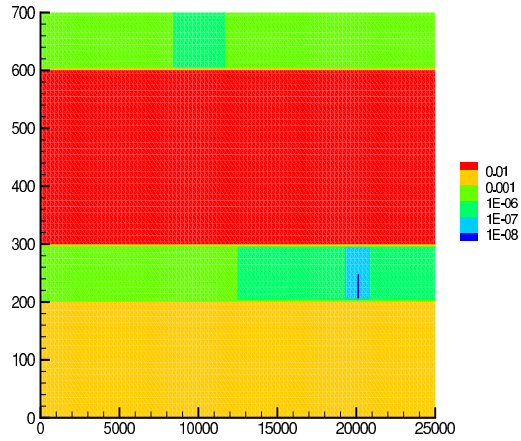


FIG. 4.13 – Test 3 : Vitesse de Darcy. FIG. 4.14 – Test 3 : Charge hydraulique.

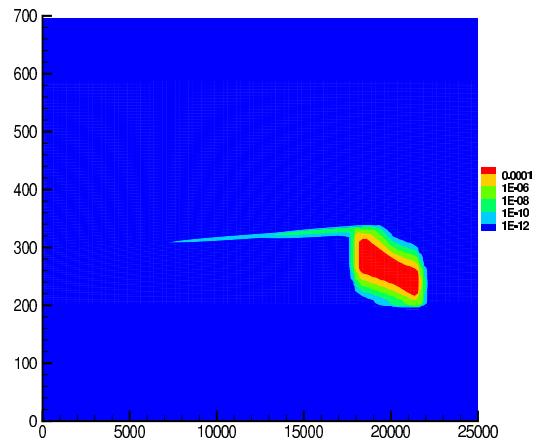
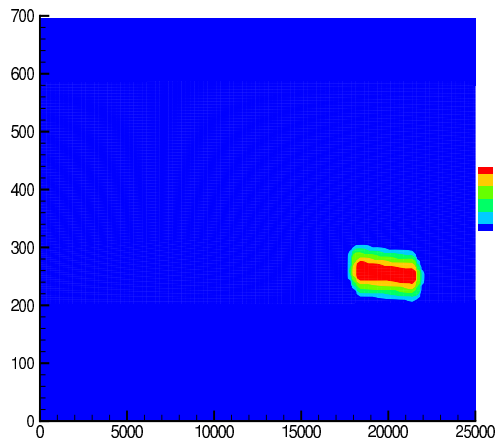


FIG. 4.15 – Test 3 : Concentration à T=50110 ans. FIG. 4.16 – Test 3 : Concentration à T=200440 ans.

4.5. Test 3 : Exercice Couplex1

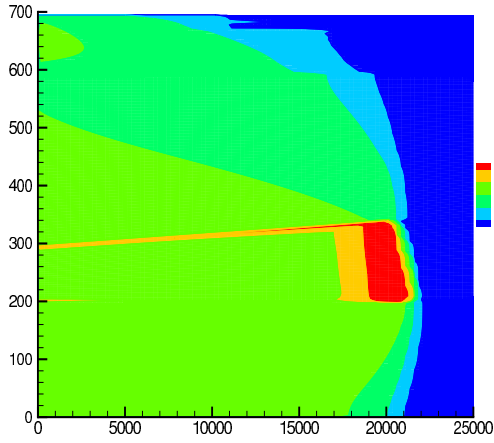


FIG. 4.17 – Test 3 : Concentration à T= 1503300 ans.

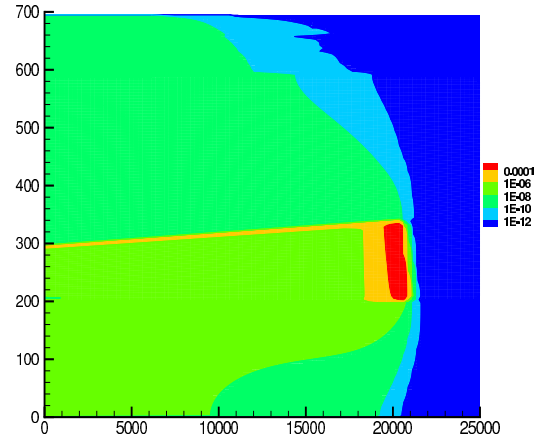


FIG. 4.18 – Test 3 : Concentration à T=4008800 ans.

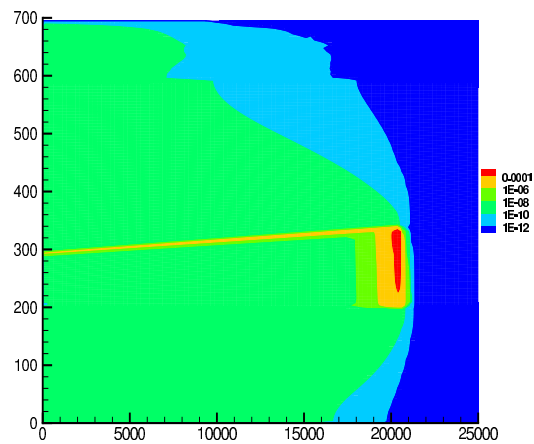


FIG. 4.19 – Test 3 : Concentration à T=10⁷ ans.

4.6. Test 4 : Exercice REGIME

du stockage, mais pas de dispersion dans les régions voisines. Après environ 200000 années, l'Iode 129 commence à se disperser en suivant le sens de l'écoulement vers la gauche, les isovaleurs de la concentration sont presque uniformes suivant l'axe verticale entre 10^{-12} et 10^{-2} . Ceci signifie que la diffusion est dominante par rapport à la convection. Après 10^6 années, il apparaît qu'une grande quantité de l'Iode 129 reste encore dans la couche argileuse, mais faible dans les autres couches. Par contre la dispersion dans la couche d'argile est très faible en comparant avec celles des autres couches. Ceci est dû principalement au fait que la convection est dominante dans l'équation en concentration dans les couches aquifères, par suite la migration de l'Iode 129 suit le mouvement de l'écoulement. Le résultat significatif qu'on peut maintenir est que la concentration d'Iode 129 atteint la frontière gauche du domaine. Après 10^7 années, l'Iode 129 atteint la surface, mais avec une concentration faible, alors l'impact des radionucléides est négligeable lorsqu'ils arriveront dans la biosphère. une grande quantité de l'Iode 129 reste toujours dans la région de stockage. Donc le temps de transfert des radionucléides est très important autour du site de stockage.

Les résultats obtenus, ici, sont très comparables à ceux qui sont obtenus par [39], [108]. Ceci démontre la performance du schéma combiné éléments finis mixtes hybrides-volumes finis.

4.6 Test 4 : Exercice REGIME

Ce test numérique rentre dans le cadre d'un exercice franco-allemand (EURO-SAFE 2002, Berlin), destiné à simuler le transport des déchets radioactifs autour d'un stockage en formations géologiques profondes. L'objectif essentiel de cet exercice est d'évaluer les avantages et les inconvénients de divers emplacements de stockages possibles au regard des diverses configurations hydrogéologiques associées à ces emplacements.

Dans ce cadre, un modèle géologique (dimension, couches alternatives moins perméables comme l'argile, couches aquifères de forte perméabilité et présence de failles) a été conçu afin de couvrir toutes les possibilités de transfert et les processus associés à l'intérieur de ces formations sédimentaires. Les difficultés principales rencontrées pour la simulation d'écoulement et du transport à travers le domaine de

4.6. Test 4 : Exercice REGIME

l'exercice REGIME, sont les variations de la perméabilité et l'épaisseur des couches argileuses. Ceci peut produire dans le même modèle, différents type de transport en se déplaçant d'une couche à une autre, par exemple dans les milieux argileux, il n'y a presque aucune convection, tandis que, dans les autres couches aquifères, la diffusion et la convection sont toutes les deux importantes. La perméabilité varie de 10^{-10} à $10^{-5} m/s$. Afin de tester les capacités de confinement des formations géologiques, quatre termes sources de radionucléides ont été placés dans des endroits distincts du domaine (voir la Figure 4.21) présentant des caractéristiques hydrogéologique a priori différentes.

4.6.1 Description physique du modèle

Le domaine Ω de REGIME est une coupe $2D$ d'un bassin sédimentaire fracturé composé de six couches hydrogéologiques intersectées par une fracture sub-verticale. La coupe verticale $2D$, a une profondeur d'environ $2km$ et une longueur de $10km$. Le milieu argileux est une formation géologique potentielle pour le stockage profond des déchets radioactifs en raison de sa très faible perméabilité et de sa grande capacité de rétention des radionucléides. Dans l'exercice REGIME, la formation argileuse est constituée d'une épaisse couche argileuse située entre deux aquifères calcaires, et intersectés par une fracture. Les quatres sources de radionucléides sont placées dans cette couche. Deux sources sont situées dans la couche la plus mince ($100m$) dans la partie gauche du domaine et les deux autres sont situées dans la grande couche plus épaisse ($450m$) dans la partie droite du domaine. La perméabilité associée à l'argile est d'ordre $10^{-10}m/s$. Tandis que les perméabilités associées aux couches aquifères qui sont en contact avec la couche argileuse varient de $10^{-8}m/s$ à $10^{-5}m/s$. Dans la fracture, la perméabilité est d'ordre $10^{-5}m/s$ (voir Figure 4.20). Les conditions aux bords pour l'écoulement sont des charges hydrauliques constantes (de type Dirichlet) selon la surface topographique parce que la nappe hydraulique est confondue avec la surface du sol à l'échelle de la modélisation (voir Figure 4.21). Pour ce qui concerne les deux côtés verticaux du domaine, des charges hydrauliques constantes sont imposées. Sur la partie en bas de la frontière, une condition de flux convectif nul est appliquée. On suppose que les quatre sources injectent instantanément dans la couche de l'argile à $t = 0$. La condition initiale $c = c(x, 0)$ est donnée sous forme

4.6. Test 4 : Exercice REGIME

REGIME	$K(m/an)$	$d_e(m^2/s)$	$\alpha_l(m)$	$\alpha_t(m)$	Φ
lower cretaceous (Valangin/Hauterive)	$1e^{-10}$	$3.15e^{-4}$	5	0.5	$2e^{-2}$
Bückeberg layers (Wealden)	$1e^{-08}$	$3.15e^{-4}$	5	0.5	$5e^{-2}$
Münder Marl (upper Tithon)	$1e^{-10}$	$3.15e^{-4}$	5	0.5	$5e^{-3}$
Malme (upper Jurassic)	$1e^{-05}$	$3.15e^{-4}$	5	0.5	$1e^{-2}$
Dogger (middle Jurassic)	$1e^{-08}$	$3.15e^{-4}$	5	0.5	$3e^{-2}$
Lias (Lower Jurassic)	$1e^{-10}$	$3.15e^{-4}$	5	0.5	$1e^{-2}$
Faults	$1e^{-05}$	$3.15e^{-4}$	5	0.5	$5e^{-2}$

TAB. 4.4 – Test 4 : Paramètres de perméabilité et de diffusion/dispersion.

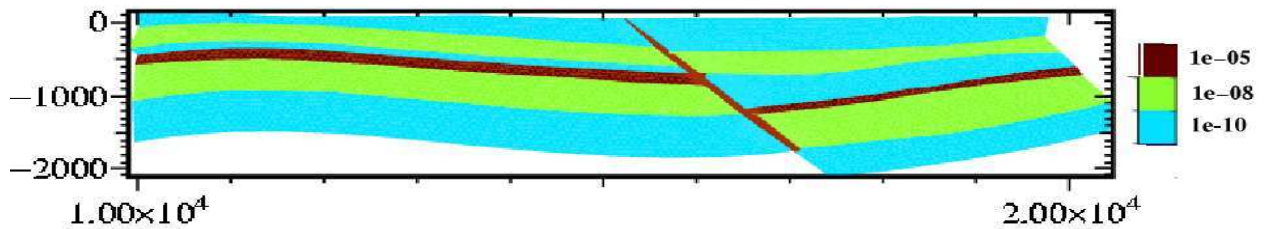


FIG. 4.20 – Test 4 : Distribution de la perméabilité K .

d'une fonction de Dirac exprimée sur une cellule duale M_l . Les différents paramètres physiques, utilisés pour cette simulation, sont donnés dans la Table 4.4.

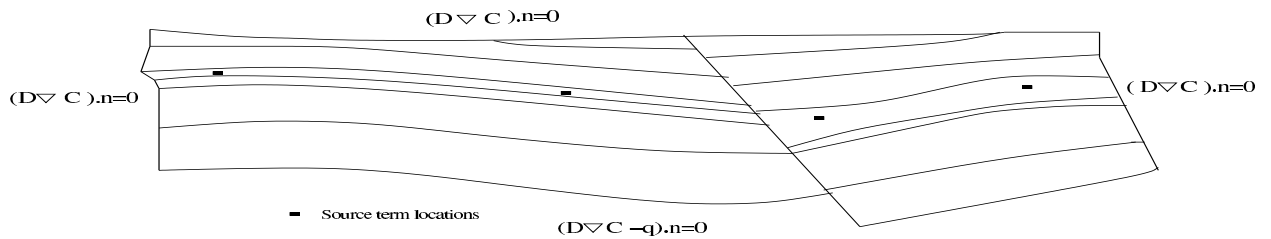


FIG. 4.21 – Test 4 : Conditions aux bords.

4.6. Test 4 : Exercice REGIME

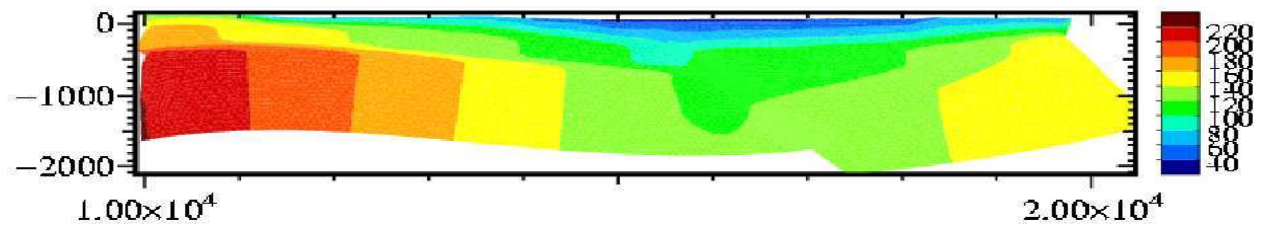


FIG. 4.22 – Test 4 : Charge hydraulique.

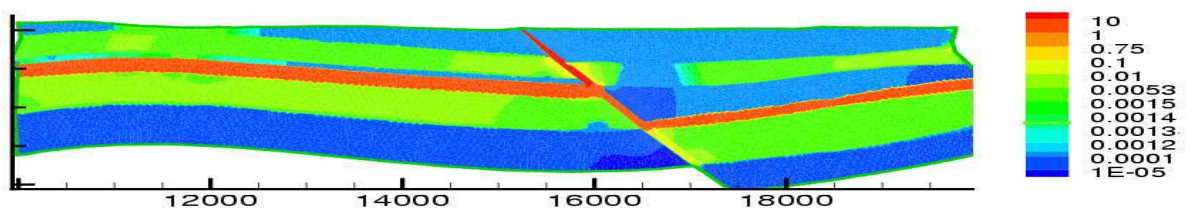


FIG. 4.23 – Test 4 : Vitesse de Darcy.

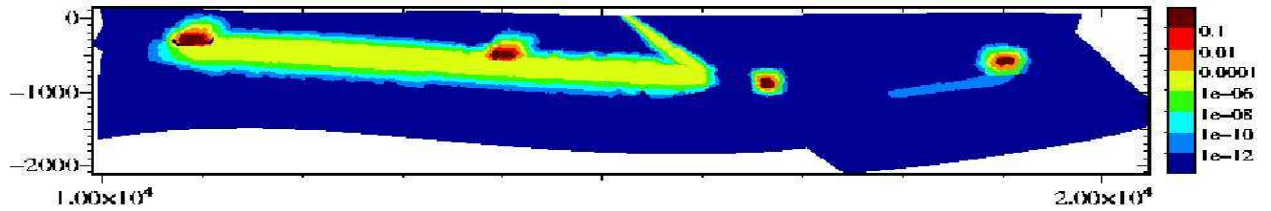


FIG. 4.24 – Test 4 : Concentration après environ 30 années.

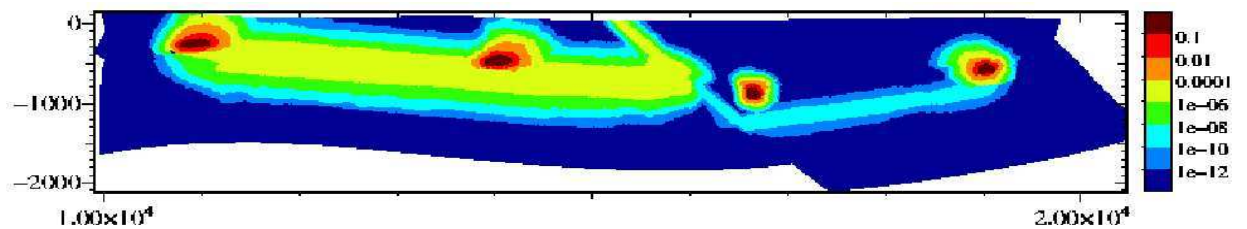


FIG. 4.25 – Test 4 : Concentration après environ 500 années.

4.6. Test 4 : Exercice REGIME

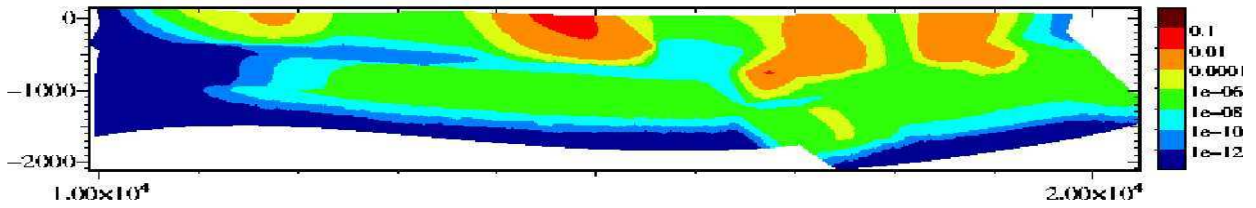


FIG. 4.26 – Test 4 : Concentration après environ 20000 années.

4.6.2 Résultats numériques

4.6.3 Résultats d'écoulement

Les contours de la pression sont présentés dans la Figure 4.22. Les conditions aux bords utilisées sur les deux côtés verticaux du domaine produisent un modèle d'écoulement orienté des deux côtés du domaine vers la fracture. En raison des caractéristiques hydrauliques de la fracture, des charges hydrauliques basses sont transmises de la surface topographique vers le fond du domaine à travers la fracture. Dans la Figure 4.23 nous présentons les vitesses de Darcy. Le front raide entre les vitesses élevées dans les couches aquifères de forte perméabilités et la fracture et les faibles vitesses dans les autres couches, et en particulier la couche argileuse, est conforme aux modèles des écoulements hétérogènes dûs à la variation de la perméabilité.

4.6.4 Résultats du Transport

Comme prévu, le panache des contaminants est très raide à cause des caractéristiques diffusives des lieux d'injection (Les concentrations élevées indiquent les endroits où on a injecté les radionucléides). Aux premiers temps de la simulation (30 ans), les concentrations dans la partie droite du domaine sont caractérisées par une propagation diffusive des contaminants grâce à la grande épaisseur de la couche argileuse et les gradients hydrauliques peu élevés qui retardent la migration de radionucléides vers les couches aquifères. Par contre, dans la partie gauche du domaine, dûe à la couche mince de la région argileuse, les radionucléides s'échappent rapidement par

4.7. Test 5 : domaine fracturé & homogénéisation

diffusion de la couche argileuse vers les couches voisines. Des concentrations significatives sont alors transportées par un écoulement sub-horizontale convectif dans la couche aquifère (voir la Figure 4.24). La forme avale du panache traduit le fait que la partie convective de l'écoulement dans la couche peu perméable n'est pas négligeable. Le soluté est transporté de la zone de stockage vers les exutoires de surface selon un schéma hydraulique en "U" depuis le secteur de recharge qui se trouve dans le côté gauche du domaine vers la fracture par l'intermédiaire de la couche aquifère. Après 500 années (voir la Figure 4.25), le drain vertical au droit termes sources déplace le panache vers le haut par diffusion et convection. La présence de la fracture accélère ce drainage vertical en capturant une part significative de l'activité relâchée via la couche aquifère. Les concentrations dans la partie droite du domaine sont beaucoup moins influencées par la fracture et la couche aquifère du fait de la grande épaisseur de la couche de stockage (Argile) qui préserve un régime de transport diffusif isotrope. Après 20 000 années (voir la Figure 4.26), le panache continue à se disperser vers le haut au-dessus du domaine entier et atteint progressivement les exutoires de la surface topographique. L'échelle reportée des concentrations sur les figures 4.24–4.26 est comprise entre 1 et 10^{-12} kg/m^3 et il est remarquable de constater que l'on n'observe pas d'oscillations négatives.

4.7 Test 5 : domaine fracturé & homogénéisation

Dans cet exemple, on considère un réservoir Ω hétérogène avec la présence d'une fracture. La fracture se trouve au milieu et elle traverse verticalement le domaine en le divisant en deux parties. Le domaine entier est composé de 52×50 blocs et chaque bloc a une perméabilité différente comme indiqué dans la Figure 4.27. Ce test nous a été fourni par A. Bourgeat (<http://momas.univ-lyon1.fr>). Les régions à gauche et à droite de la fracture ont des perméabilités d'ordre un, tandis que, les valeurs dans la zone de la fracture sont d'ordre 10^3 . De plus les valeurs de la perméabilité dans les trois régions sont hétérogènes. La fracture représente environ 4% du domaine entier. Pour savoir le comportement d'un soluté transporté par un fluide, sous l'influence de la fracture et le contraste du milieu hétérogène, nous avons placé une source au point (3,3) du domaine. Les conditions aux bords utilisées sont, un débit constant $q_0 = 2$ sur Γ_1 , une pression constante à la sortie $p_0 = 10$ sur Γ_3 et un flux nul sur Γ_2

4.7. Test 5 : domaine fracturé & homogénéisation

(voir Figure 4.28). Pour l'équation du transport, nous avons pris un flux total nul sur toute la frontière.

Nous allons examiner les performances d'une méthode d'homogénéisation sur cet exemple et illustrer l'importance du choix de la cellule grossière pour calculer les paramètres effectifs. L'approximation des perméabilités effectives a été obtenue par la plate forme *JHomogenizer*. Ici on considère deux choix pour homogénéiser ; le premier choix consiste à mettre à l'échelle tout le domaine (qu'on appelle homogène 1 lors des simulations), dans ce cas on trouve un tenseur effectif :

$$K^* = \begin{pmatrix} 2.4707 & 0.0134 \\ 0.0134 & 40.8541 \end{pmatrix}.$$

Le deuxième choix consiste à mettre à l'échelle le domaine en trois parties (qu'on appelle homogène 2 lors des simulations) : pour la partie à gauche de la fracture, on trouve

$$K^* = \begin{pmatrix} 2.5898 & 0.0089 \\ 0.0089 & 2.4213 \end{pmatrix},$$

pour la fracture on trouve

$$K^* = \begin{pmatrix} 1001.18 & 0.0000 \\ 0.0000 & 1001.18 \end{pmatrix}$$

et pour la partie à droite de la fracture, on trouve

$$K^* = \begin{pmatrix} 2.3185 & -0.0109 \\ -0.0109 & 2.1502 \end{pmatrix}$$

Pour valider les résultats d'homogénéisation, nous avons effectué plusieurs simulations pour l'écoulement et le transport dans le cas hétérogène et dans les deux cas homogènes.

On présente dans les Figures 4.29, 4.30 et 4.31, la pression et la vitesse pour les milieux homogène 1, hétérogène et homogène 2 respectivement. Il apparaît que les champs de pression et de vitesse dans le cas hétérogène et la cas homogène 2 sont quasiment identiques. On voit clairement l'influence de la fracture et des hétérogénéités des deux régions autour, sur le trajectoire de l'écoulement dans le cas hétérogène.

4.7. Test 5 : domaine fracturé & homogénéisation

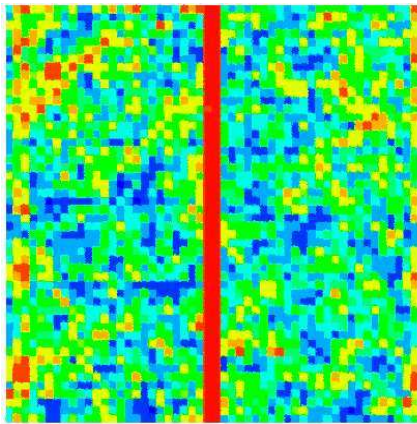


FIG. 4.27 – Test 5 : Perméabilité hétérogène.

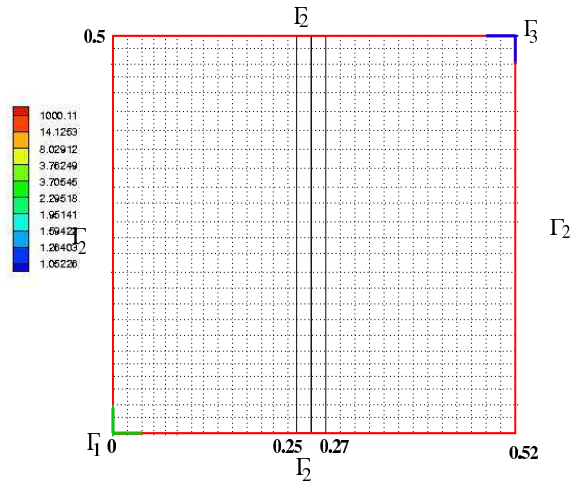


FIG. 4.28 – Test 5 : Domaine de calcul Ω .

Les profils de la concentration sont illustrés dans les Figures 4.32-4.34 pour deux pas de temps différents. Il apparaît encore que les concentrations hétérogènes et homogènes 2 se rapprochent mieux que celles dans le cas homogène 1. Ceci est illustrée de manière claire dans la Figure 4.35. Dans cette Figure, on présente l'activité du fluide injecté à l'exutoire au cours du temps. Dans le cas hétérogène et homogène 2, le fluide injecté commence à se déplacer uniformément à partir de la partie d'injection par convection et diffusion jusqu'à la fracture. Ensuite le comportement du fluide est régi par convection qui domine la diffusion dans la fracture. Après il continue à se disperser par convection et diffusion vers l'exutoire. Le front de la concentration est très raid ceci est dû à la variation de la perméabilité dans les trois régions. En conclusion le milieu homogénéisé 2 restitue de manière satisfaisante les caractéristiques de l'écoulement.

4.7. Test 5 : domaine fracturé & homogénéisation

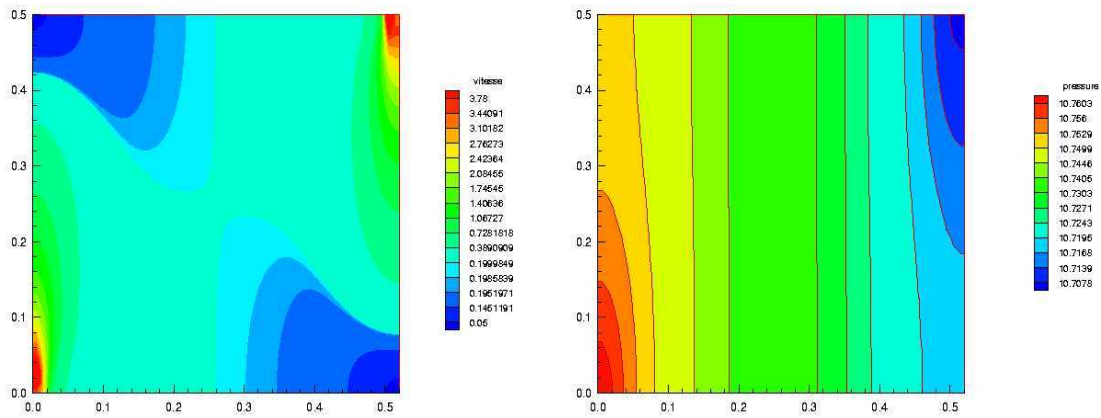


FIG. 4.29 – Test 5 : Vitesse & Pression dans le cas homogène 1.

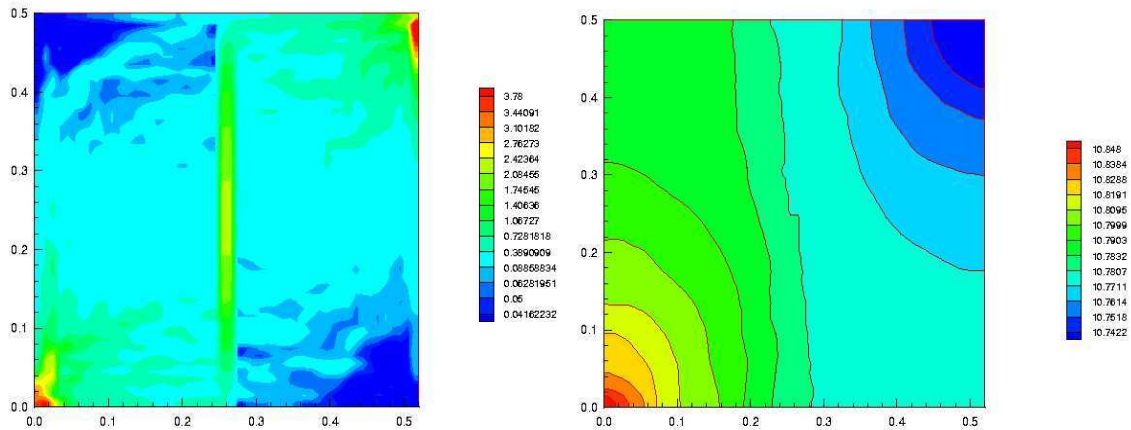


FIG. 4.30 – Test 5 : Vitesse & Pression dans le cas hétérogène.

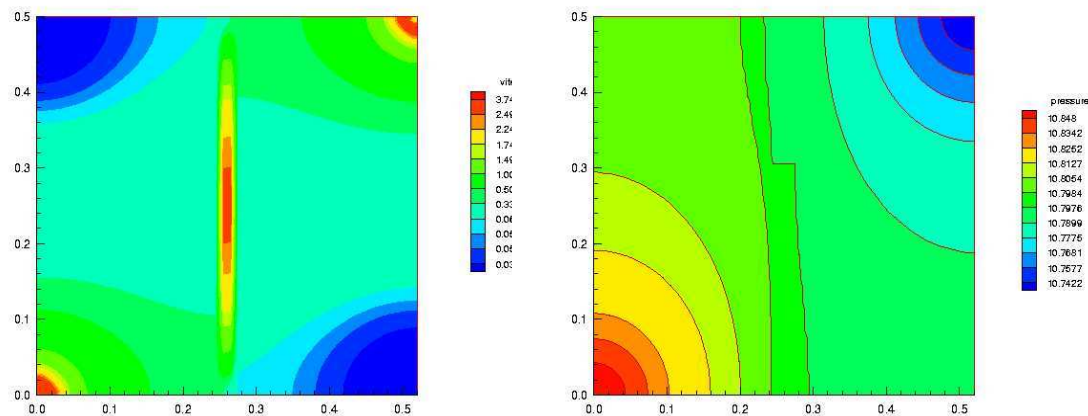


FIG. 4.31 – Test 5 : Vitesse & Pression dans le cas homogène 2.

4.7. Test 5 : domaine fracturé & homogénéisation

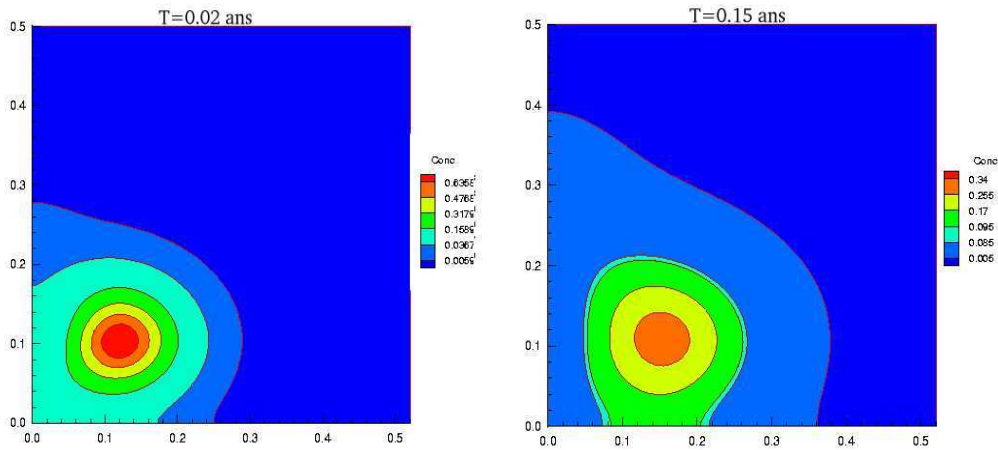


FIG. 4.32 – Test 5 : Concentrations dans le cas homogène 1

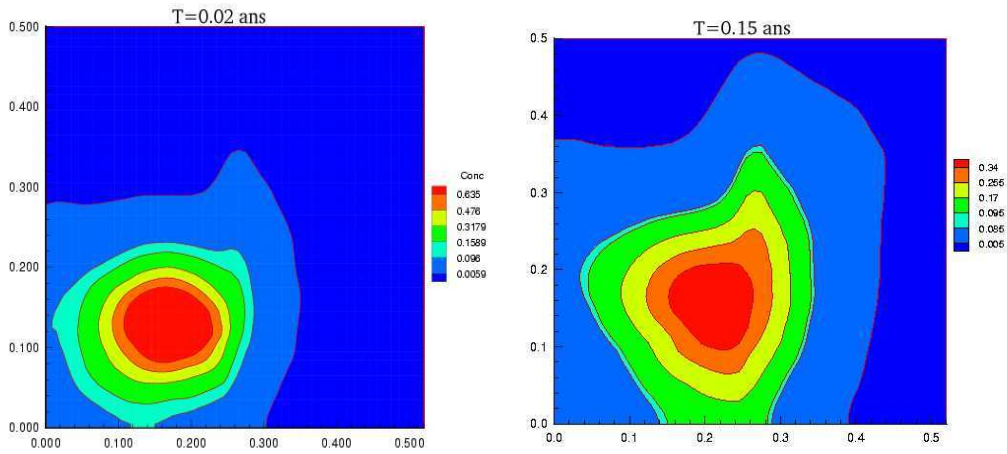


FIG. 4.33 – Test 5 : Concentrations dans le cas hétérogène

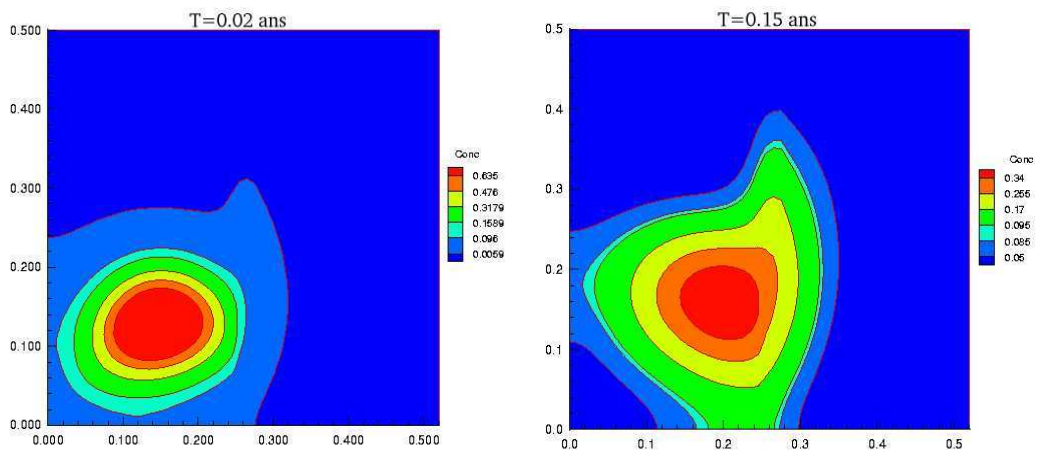


FIG. 4.34 – Test 5 : Concentrations dans le cas homogène 2

4.7. Test 5 : domaine fracturé & homogénéisation

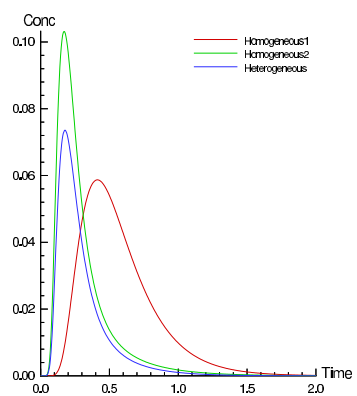


FIG. 4.35 – Test 5 : Concentrations à l'exutoire Γ_3 .

4.7. Test 5 : domaine fracturé & homogénéisation

Chapitre 5

Estimation d'Erreur a posteriori pour un Schéma VF d'une Équation de type Convection-Diffusion-Réaction

On reprend ici le texte intégral d'un article en préparation, dont le titre est
by B. Amaziane, A. Bergam, M. El Ossmani and Z. Mghazli.

Nous étudions des estimateurs d'erreur a posteriori de type résiduel pour une équation de convection-diffusion-réaction pour le schéma VF développé dans le Chapitre 3. Nous introduisons deux sortes d'indicateurs. Le premier est local en temps et en espace et constitue un excellent outil pour l'adaptation du maillage à chaque pas de temps. Le second est global en espace mais local en temps et peut être utilisé pour l'adaptation en temps. Nous montrons que l'erreur entre la solution exacte et la solution discrète en temps et en espace est bornée supérieurement par ces indicateurs d'erreurs et les données du problème. Nous obtenons ainsi des estimations a posteriori optimales. Des essais numériques d'adaptations de maillages sont présentés et montrent l'efficacité de la méthode.

A Posteriori Estimators for Vertex Centred Finite Volume Discretization of a Convection-Diffusion-Reaction Equation Arising in Flow in Porous Media

B. Amaziane⁽¹⁾, A. Bergam⁽²⁾, M. El Ossmani⁽¹⁾, Z. Mghazli⁽²⁾

4th July 2005

⁽¹⁾ *Université de Pau, Laboratoire de Mathématiques Appliquées, CNRS-UMR 5142, Avenue de l'Université, 64000 Pau, France. E-mail: brahim.amaziane@univ-pau.fr, mustapha.elossmani@univ-pau.fr*

⁽²⁾ *Université Ibn Tofaïl, Faculté des Sciences, Laboratoire SIANO, B.133 Kénitra, Maroc. E-mail: mghazli_zoubida@yahoo.com*

Abstract

We analyse a residual error estimator for a semi-implicit finite volume discretization of a time-dependent convection-diffusion-reaction boundary value problem, modeling the transport of contaminant in porous media. The error estimators with respect to both time and space yield global upper and local lower bounds on the error measured in the energy norm. Computational results of various model simulations of fluid flow and transport of contaminant in heterogeneous aquifers are presented and discussed.

Keywords: Finite volume, a posteriori error estimation, adaptive method, convection-diffusion-reaction equation.

AMS subject classification: 76M12; 35J15; 65L70

Contents

1	Introduction	103
2	Problem Formulation	105
3	Discretization of the Problem	107
4	A Posteriori Error Estimates	111
4.1	An upper bound for the error	111
4.2	A lower bound for the error	117
5	Numerical Simulations	121
5.1	Test problem 1: isotropic case	122
5.2	Test problem 2: heterogeneous case	123
5.3	Test problem 3: Saltdome	127

1 Introduction

Convection–diffusion equations are an important class of partial differential equations (PDEs) that arise in many problems in science and engineering, and present serious numerical difficulties. It is known that standard finite difference and finite element methods generate solutions that exhibit non-physical oscillations and/or artificial numerical diffusion and grid orientation which smears out sharp fronts of the solution where important chemistry and physics take place. The application of the classical conforming finite element method to fluid flow in porous media, in general, does not locally conserve mass (see, e.g., [15]) due to its global continuity requirement. Many specialized methods have been developed to resolve these difficulties. Eulerian methods use fixed spatial grids and incorporate some form of upstream weighting or other dissipation techniques in their formulations (see, e.g., [13], [42] and the references therein). Hence, they can eliminate the nonphysical oscillations present in the standard finite difference and finite element methods. Some of the Eulerian methods, such as the Godunov scheme, the total variation diminishing (TVD) schemes, and the ENO/WENO schemes, can resolve shock discontinuities from the nonlinear hyperbolic conservation laws. Characteristic methods take advantage of the hyperbolic nature of the convection-diffusion equations by utilizing a characteristic tracking to treat the advective component of the governing equation [19], [39]. These methods symmetrize the governing equations and significantly reduce the temporal truncation errors. Thus, they allow large time steps to be used in numerical simulations without loss of accuracy, and lead to a greatly improved efficiency. However, most characteristic methods have difficulties in treating flux boundary conditions when a characteristic is tracked to the boundary of the domain, and fail to conserve mass.

The Eulerian-Lagrangian localized adjoint method (ELLAM) was introduced in [13] for solving convection-diffusion PDEs. The ELLAM formalism provides a general characteristic solution procedure for convection-dominated PDEs and a consistent framework for conserving mass and treating general boundary conditions. The ELLAM techniques symmetrize these PDEs, generate accurate numerical solutions even if large time steps are used, and eliminate nonphysical oscillations, numerical dispersion, and grid orientation artifacts. Thus, the ELLAM framework overcomes the principal shortcomings of the previous characteristics methods while maintaining their numerical advantages (for more details, see, e.g., [42] and [50]).

Finite volume (FV) methods are a class of discretization schemes that have proven highly successful in approximating the solution of a wide variety of conservation laws systems. There is an extensive literature on this subject. We will not attempt a literature review here, but merely mention a few references. They are extensively used in fluid mechanics, meteorology, electromagnetics, semi-conductor device simulation, models of biological processes and many other engineering areas governed by conservative systems that can be written in integral control volume form (see, e.g., [6], [21], [25], [28], [29], [32], [33]). The primary advantages of these methods are numerical robustness through

the obtention of discrete maximum principles, applicability on very general unstructured meshes, and the intrinsic local conservation properties of the resulting schemes.

The literature associated with the foundation and analysis of the finite volume methods for hyperbolic problems is extensive (see, e.g., [21], [32] and the references therein). FV methods for elliptic problems have been proposed and analyzed under a variety of different names: box methods, covolume methods, diamond cell methods, integral finite difference methods and finite volume element methods (see, e.g., [33] for a review).

More recently, FV methods were developed and analyzed for convection-diffusion problems (see, for instance, [12], [17], [20], [21], [25], [26], [27], [30], [31], [34], [35], [36], [38], [51]). There are various approaches in deriving FV approximations of convection-diffusion equations. The most general classification is obtained depending on the choice of: (1) the finite volumes and (2) the discrete space to which the approximate solution belongs. The domain is meshed and depending on whether the finite volumes are the elements from the original splitting or volumes around the vertices of the original splitting, we have correspondingly cell-centered and vertex-centered finite volume methods. For the vertex-centered finite volumes, depending on whether the discrete space is piecewise constant over the finite volumes or piecewise linear over the original mesh, we have correspondingly vertex-centered finite volume difference methods or vertex-centered finite volume element methods. The cell-centered finite volumes can lead to cell-centered finite volume difference methods or mixed methods.

The stability of the FV methods often depends on the way the flux surface integrals are approximated. The most important example is for fluxes with strong convection part. For such cases a straightforward approximation of the flux integrals often yields oscillating solutions. Therefore, it is not surprising that different flux approximations also serve as benchmarks in the classification of the FV methods. The most popular and efficient way approach is to use various upwind schemes (see, e.g., [21], [25], [33]). For such problems we are interested in approximation methods which produce solutions satisfying the maximum principle and are locally conservative. Such schemes are also known as monotone schemes (see, e.g., [41], [43]). The interest of these methods stems from their compactness in terms of numerical stencil, their effectiveness on unstructured multidimensional meshes and their efficiency in insuring robust, stable and convergent schemes thanks to the upwind strategy. However, the discretization of second-order terms, especially for anisotropic problems, is problematic in the sense of the efficiency (cf., e.g., [22]). The stencil has to be enlarged and it generally implies constraints on the mesh. On the opposite side, finite element approximations based on energy methods are naturally suited for diffusive problems. However these methods may involve some numerical instability in case of problems with convection dominating diffusion and in order to cure these drawbacks, some extra-stabilization terms have to be added to the equations. Then an attractive alternative for solving convection dominated diffusion equations consists in sharing the advantage of these two numerical techniques. One is led to combine a finite volume discretization for the convective terms with a finite element discretization for the

diffusive part (see, e.g., [1], [2], [23], [25]). This approach is considered here.

Subsurface phenomena can involve multiple time and spatial scales, long simulation time periods, and many coupled components which are convection dominated. The latter requires steep gradients to be preserved with minimal oscillation and numerical diffusion. Thus, dynamic time and spatial adaptivity based on a posteriori error estimates is essential for accuracy and efficiency.

In this paper we construct, theoretically justify, and test a computational method that yields reliable error control of the FV discretization of a convection-diffusion-reaction equation, arising from the modeling of flow and transport in porous media, in 2-D on unstructured grids. A detailed description of the model is given by e.g. [7]. We achieve balance between obtaining reliable control of the error and efficient use of the available computational resources by an adaptive process of local grid refinement based on a posteriori error analysis. In our a posteriori error analysis we exploit the ideas known from the finite element method. Namely, we use estimators based on local residuals type estimators. We have constructed such estimators for vertex centred FV approximations and have therotically justified them by proving, under appropriate assumptions, that they provide both lower and upper bounds for the error.

There is an extensive literature on adaptive methods for finite element approximations with emphasis on both theoretical and computational aspects of the methods. Among the vast literature we refer, e.g., to [3] and [44]. There are few works related to a posteriori error estimates for FV methods of convection-diffusion problems. Earlier results related to this topic in the context of flow and transport in porous media were published in [12], [28], [31], [37], [38] and the references therein.

The paper is organized as follows. In section 2 all necessary mathematical notations are defined, the problem is formulated and the general assumptions are stated. In section 3, the numerical scheme for the model problem is presented with emphasis on the finite volume method employed for the solution of the convection-diffusion-reaction equation. The construction of error indicators for this approximation and the proof of upper and lower bounds for the error as a function of the indicators are established in section 4. A series of numerical examples demonstrates the effectiveness of the methodology for 2-D miscible flow problems through heterogeneous porous media where large permeability variations are allowed.

2 Problem Formulation

We consider the following convection-diffusion-reaction problem: Find $u = u(x, t)$ such that

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div} \left(D(x, t) \nabla u - \vec{q}u \right) + au = f & \text{in } \Omega \times]0, T[, \\ u = 0 & \text{on } \Gamma \times]0, T[, \\ u(\cdot, 0) = u_0 & \text{in } \Omega. \end{cases}$$

Here Ω is a bounded polygonal domain in \mathbb{R}^2 , with Lipschitz boundary Γ and $]0, T[$ a time interval, D is a uniformly positive function in $\bar{\Omega} \times]0, T[$, \vec{q} is a given vector function (velocity), a is the given absorption/reaction coefficient, and f is a given source term.

Let us state the following assumptions.

(A1) D is a positive and continuously time-differentiable function such that

$$\forall x \in \bar{\Omega}, \forall t \in]0, T[, \quad 0 < D_{min} \leq D(x, t) \leq D_{max} < +\infty.$$

(A2) $f \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$.

(A3) $\vec{q} \in C(0, T; (W^{1,\infty}(\Omega))^2)$

(A4) $a \in C(0, T; L^\infty(\Omega))$.

(A5) There are two constant $\beta \geq 0$ and $\mathcal{A} \geq 0$ such that

$$\frac{1}{2} \operatorname{div} \vec{q} + a \geq \beta \quad \text{and} \quad \|a\|_{L^\infty(\Omega)} \leq \mathcal{A}\beta \quad \text{in } [0, T].$$

(A6) $u_0 \in H^1(\Omega)$.

For $m \in \mathbb{N}$, we use the usual Sobolev space

$$H^m(\Omega) := \{v \in L^2(\Omega) : D^i v \in L^2(\Omega) \quad i = 1, \dots, m\},$$

and we denote

$$H_0^1(\Omega) := \{v \in H^1(\Omega) : v|_\Gamma = 0\},$$

equipped with the energy norm

$$\|v\| = \left(\|D^{1/2} \nabla v\|_{0,\Omega}^2 + \beta \|v\|_{0,\Omega}^2 \right)^{1/2}. \quad (2.1)$$

The dual space of $H_0^1(\Omega)$ is denoted $H^{-1}(\Omega)$, and for any numbers $a < b$ we denote by $L^2(a, b; H_0^1(\Omega))$ and $L^2(a, b; H^{-1}(\Omega))$, the spaces of measurable functions u defined on (a, b) with values in $H_0^1(\Omega)$ and $H^{-1}(\Omega)$ respectively, such that the function $t \rightarrow \|u(\cdot, t)\|_{1,\Omega}$ and $t \rightarrow \|u(\cdot, t)\|_{-1,\Omega}$ are square integrable. We denote the dual norm associated to (2.1) by

$$\|\phi\|_* = \sup_{v \in H_0^1(\Omega), v \neq 0} \frac{\langle \phi, v \rangle}{\|v\|}, \quad \forall \phi \in H^{-1}(\Omega) \quad (2.2)$$

For $v \in L^2(0, t; H_0^1(\Omega))$ we introduce the norm

$$[[v]](t) = \left(\|v(t)\|_{0,\Omega}^2 + \int_0^t \|v(s)\|^2 ds \right)^{1/2}. \quad (2.3)$$

where $\|\cdot\|$ is defined by (2.1).

Assumptions **(A1)**-**(A6)** imply that the weak form of problem (2.1):

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Find } u \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega)) \text{ such that } \frac{\partial u}{\partial t} \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega)) \text{ and} \\ \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} v dx + \int_{\Omega} D \nabla u \cdot \nabla v dx + \int_{\Omega} \operatorname{div}(\vec{q}u) v dx \\ \quad + \int_{\Omega} a u v dx = \int_{\Omega} f v dx \quad \forall v \in H_0^1(\Omega), \text{ for a.e. } t \in]0, T[\\ u(\cdot, 0) = u_0 \end{array} \right. \quad (2.4)$$

admits a unique solution (cf. [18]), and by taking v equal $u(t)$ in (2.4) and integrating on the interval $]0, t[$, we derive the following estimate, for all t in $[0, T[$:

$$[[u]](t) \leq \left(\|u_0\|_{0,\Omega}^2 + \frac{1}{D_{\min}} \|f\|_{L^2(0,t;H^{-1}(\Omega))}^2 \right)^{1/2}, \quad (2.5)$$

or

$$[[u]](t) \leq \left(\|u_0\|_{0,\Omega}^2 + \frac{1}{\beta} \|f\|_{L^2(0,t;L^2(\Omega))}^2 \right)^{1/2}. \quad (2.6)$$

In the case where $a \equiv 0$, i.e. no reaction term in the equation, we take $\mathcal{A} = 0$ and keep β in the definition of the energy norm.

3 Discretization of the Problem

In order to describe the time discretization of the problem (2.1), we introduce a partition of the interval $[0, T]$ into subintervals $[t_{n-1}, t_n]$, $1 \leq n \leq N$ such that $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$. We denote by τ_n the length $t_n - t_{n-1}$, by τ the N -uplet (τ_1, \dots, τ_N) and by $|\tau|$ the maximum of the τ_n , $1 \leq n \leq N$. Since our aim is mesh adaptivity, for each n , $0 \leq n \leq N$, we consider $(\mathcal{T}_h^n)_h$ a regular triangulation of Ω by closed triangles. Each triangulation \mathcal{T}_h^n is derived from \mathcal{T}_h^{n-1} by cutting some elements of \mathcal{T}_h^{n-1} into a few number of subelements or, in opposit, gluing together some elements of \mathcal{T}_h^{n-1} into a new triangle. We denote also by \mathcal{V}_h^n the dual decomposition associated to \mathcal{T}_h^n . Note that at the same time t_n , several triangulations can be employed for mesh adaptivity and we use the notation \mathcal{T}_h^n only for the last one. We introduce the notation $u^n = u(t_n)$, $D^n = D(t_n)$, $a^n = a(t_n)$ and $f^n = f(t_n)$.

The semi-implicite semi-discret problem is given by

$$\frac{u^n - u^{n-1}}{\tau_n} - \operatorname{div} \left(D^n \nabla u^n - \vec{q}^{n-1} u^{n-1} \right) + a^n u^n = f^n \quad \text{in } \Omega. \quad (3.7)$$

We now describe the space discretization with a finite volume scheme wich is obtained by integrating the equation on a given control volume of a discretization mesh and

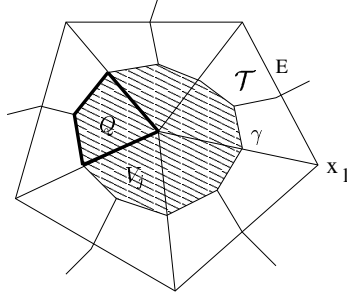


Figure 1: A vertex-centred cell in 2D

taking an approximation of the flux on the control volume boundary in terms of discrete unknowns. Let us give the assumptions which are needed on the mesh.

Assume that we have a family of triangulations \mathcal{T}_h^n , which is regular (see [16]). The partition \mathcal{V}_h^n is chosen as the set of N_n volumes V_i that constitute the dual of the triangulation \mathcal{T}_h^n known as the Voronoi mesh (cf. [49]) and such that $\bar{\Omega} = \cup_{i=1, \dots, N_n} V_i$. This mesh is constructed by connecting the middle points of edges and circumcenters of each neighboring pair of triangles having a common edge with a straight line segment (See Figure 1).

We denote by \mathcal{E}_h^n the set of edges E of triangulation \mathcal{T}_h^n , $h > 0$ and Γ_h^n the set of edges γ of the dual decomposition \mathcal{V}_h^n . We denote by γ_{ij} the intersection of boundary ∂V_i and ∂V_j of two control volumes.

We may construct another partition of Ω , denoted by \mathcal{Q}_h^n and formed by Quadrilaterals Q defined by $Q = V \cap \mathcal{T}$. We also need to define the set $\mathcal{K}_h^i = \cup K$, formed by the triangles K having x_{V_i} (the center of the control volume V_i) as a vertex and γ as an edge. Next we define the spaces $\mathcal{P}_1(\mathcal{T}_h^n)$ and $\mathcal{P}_0(\mathcal{V}_h^n)$ by

$$\mathcal{P}_1(\mathcal{T}_h^n) = \{v_h \in C^0(\bar{\Omega}) : v_h|_{\mathcal{T}} \in \mathcal{P}_1; \forall \mathcal{T} \in \mathcal{T}_h^n\},$$

and

$$\mathcal{P}_0(\mathcal{V}_h^n) = \{w_h \in L^2(\bar{\Omega}) : w_h|_{V_i} \in \mathcal{P}_0; i = 1, \dots, N_n\},$$

where \mathcal{P}_l is the set of polynomial functions of degree $\leq l$.

Denote by $I_m : L^2(\Omega) \rightarrow \mathcal{P}_0(\mathcal{V}_h^n)$ the global \mathcal{V}_h^n -piecewise constant interpolation operator which is defined by

$$I_m v := \begin{cases} \frac{1}{|V|} \int_V v dx & \text{for interior volume } V \\ 0 & \text{for boundary volume } V (\text{i.e. } \partial V \cap \Gamma \neq \emptyset). \end{cases} \quad (3.8)$$

Note that the operator I_m satisfies homogeneous Dirichlet boundary conditions i.e. $I_m v = 0$ on Γ .

Let $(\psi_i)_{i=1,\dots,N_n}$ be the set of basic functions of $\mathcal{P}_1(\mathcal{T}_h^n)$. We integrate the semi-discrete problem (3.7), over any control volume V_i :

$$\int_{V_i} \frac{u^n - u^{n-1}}{\tau_n} - \int_{V_i} \operatorname{div} (D^n \nabla u^n) + \int_{V_i} \operatorname{div} (\bar{q}^{n-1} u^{n-1}) dx + \int_{V_i} a^n u^n dx = \int_{V_i} f^n dx.$$

By an integration by parts, we obtain

$$\int_{V_i} \frac{u^n - u^{n-1}}{\tau_n} - \int_{\partial V_i} D^n \nabla u^n \cdot \vec{n}_i ds + \int_{\partial V_i} \bar{q}^{n-1} u^{n-1} \cdot \vec{n}_i ds + \int_{V_i} a^n u^n dx = \int_{V_i} f^n dx,$$

where \vec{n}_i is the unit outward normal vector on ∂V_i .

By writing $\partial V_i = \bigcup_{\gamma \subset \partial V_i} \gamma$, we obtain

$$\int_{V_i} \frac{u^n - u^{n-1}}{\tau_n} - \sum_{\gamma \subset \partial V_i} \left\{ \int_{\gamma} D^n \nabla u^n \cdot \vec{n}_\gamma ds - \int_{\gamma} \bar{q}^{n-1} u^{n-1} \cdot \vec{n}_\gamma ds \right\} + \int_{V_i} a^n u^n dx = \int_{V_i} f^n dx, \quad (3.9)$$

where \vec{n}_γ is the unit outward normal vector on γ .

If we denote

$$\mathcal{F}(v, \gamma) := \int_{\gamma} D \nabla v \cdot \vec{n}_\gamma ds,$$

and

$$\mathcal{G}(v, \gamma) := \int_{\gamma} \bar{q} v \cdot \vec{n}_\gamma ds,$$

the equation (3.9) could be written in the following form:

$$\int_{V_i} \frac{u^n - u^{n-1}}{\tau_n} - \sum_{\gamma \subset \partial V_i} (\mathcal{F}(u^n, \gamma) - \mathcal{G}(u^{n-1}, \gamma)) + \int_{V_i} a^n u^n dx = \int_{V_i} f^n dx.$$

The finite volume discretization is ended by defining a numerical flux functions $\mathcal{F}_h(v_h^n, \gamma)$ and $\mathcal{G}_h(v_h^{n-1}, \gamma)$. For this, we will consider V_h the space of all continuous, piecewise linear finite element functions corresponding to \mathcal{T}_h^n and vanishing on Γ :

$$V_h := \{v_h \in \mathcal{P}_1(\mathcal{T}_h^n) \text{ and } v_h|_{\Gamma} = 0\}. \quad (3.10)$$

Let M_n be the number of interior vertex. For $u_h = \sum_{i=1}^{M_n} u_i \psi_i$, the numerical flux functions

$\mathcal{F}_h(u_h^n, \gamma)$ and $\mathcal{G}_h^{n-1}(u_h, \gamma)$ are defined by

$$\mathcal{F}_h(u_h^n, \gamma) = \sum_{j \in \mathcal{J}(i), \gamma = \gamma_{ij}} \int_{\gamma_{ij}} D_h^n \nabla u_h^n \cdot \vec{n}_\gamma ds,$$

and

$$\mathcal{G}_h(u_h^{n-1}, \gamma) = \sum_{j \in \mathcal{J}(i), \gamma = \gamma_{ij}} \int_{\gamma_{ij}} ((\vec{q}^{n-1} \cdot \vec{n}_{\gamma_{ij}})^+ u_h^{n-1}(x_i) + (\vec{q}^{n-1} \cdot \vec{n}_{\gamma_{ij}})^- u_h^{n-1}(x_j)) ds,$$

where

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(i) &= \{j \in \{1, \dots, M_n\} : \text{supp } \psi_i \cap \text{supp } \psi_j \neq \emptyset\}, \\ (\vec{q}^{n-1} \cdot \vec{n})^+ &= \max(0, \vec{q}^{n-1} \cdot \vec{n}), \quad (\vec{q}^{n-1} \cdot \vec{n})^- = \min(0, \vec{q}^{n-1} \cdot \vec{n}), \end{aligned}$$

and D_h^n is an approximation of $D(t_n)$ which is a piecewise polynomial of degree smaller than a fixed integer ℓ and such that there exists a constant $c(D)$ only depending on D satisfying

$$\|D(t_n) - D_h^n\|_{L^\infty(\Omega)} \leq c(D)h^{\ell+1} \quad 1 \leq n \leq N. \quad (3.11)$$

We assume that a_h^n is also an approximation of $a(t_n)$ which is piecewise polynomial of degree smaller than a fixed integer ℓ and such that there exists a constant $c(a)$ only depending on a satisfying

$$\|a(t_n) - a_h^n\|_{L^\infty(\Omega)} \leq c(a)h^{\ell+1} \quad 1 \leq n \leq N. \quad (3.12)$$

The fully discrete problem is given by

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Find } (u_h^n)_{0 \leq n \leq N} \in (V_h)^{N+1} \text{ satisfying} \\ u_h^0 = \Pi_h u_0 \text{ in } \Omega, \\ \int_{V_i^n} \frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{\tau_n} - \sum_{j \in \mathcal{I}(i)} \left(\int_{\gamma_{ij}} D_h^n \nabla u_h^n \cdot \vec{n}_{\gamma_{ij}} \right. \\ \quad \left. - \left[(\vec{q}^{n-1} \cdot \vec{n}_{\gamma_{ij}})^+ u_h^{n-1}(x_i) + (\vec{q}^{n-1} \cdot \vec{n}_{\gamma_{ij}})^- u_h^{n-1}(x_j) \right] \right) ds \\ \quad + \int_{V_i^n} a_h^n u_h^n dx = \int_{V_i^n} f^n dx \\ \text{for } i = 1, 2, \dots, M_n, n = 1, \dots, N, \end{array} \right. \quad (3.13)$$

where V_i^n for $1 \leq i \leq M_n$, are the interior control volumes in $\mathcal{V}_{h,n}$, a_h^n is a piecewise linear approximation of a^n and Π_h is the L^2 -projection on V_h .

The analysis and numerical results of this scheme applied to immiscible and miscible flow in porous media could be find in [1]–[2] and [4]–[5].

With the family $(u_h^n)_{0 \leq n \leq N}$ we associate the function $u_{h\tau}$ on $[0, T]$ which is affine on each interval $[t_{n-1}, t_n]$, $1 \leq n \leq N$, and equal to u_h^n at t_n , for $0 \leq n \leq N$. This function writes, for $1 \leq n \leq N$

$$u_{h\tau}(t) = u_h^n - \frac{t_n - t}{\tau_n} (u_h^n - u_h^{n-1}), \quad \forall t \in [t_{n-1}, t_n]. \quad (3.14)$$

$$u_{h\tau}(t) = u_h^{n-1} + \frac{t - t_{n-1}}{\tau_n}(u_h^n - u_h^{n-1}), \quad \forall t \in [t_{n-1}, t_n]. \quad (3.15)$$

Remark 1 The terms $\int_{V_i} (\frac{u^n - u^{n-1}}{\tau_n}) dx$ and $\int_{V_i} a^n u^n dx$ can be approximated by $|V_i|(\frac{u_i^n - u_i^{n-1}}{\tau_n})$ and $|V_i|a_i^n u_i^n$ respectively where $u_i^n = u_h^n(x_i)$ and $a_i^n = a_h^n(x_i)$.

4 A Posteriori Error Estimates

With the notation (2.3), we intend to bound the norms of $[[u - u_{h\tau}]](t_n)$, for $1 \leq n \leq N$, as a function of indicators.

4.1 An upper bound for the error

For all $v \in H_0^1(\Omega)$ we have

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t}(u - u_{h\tau})v + \int_{\Omega} D \nabla(u - u_{h\tau}) \cdot \nabla v + \int_{\Omega} \operatorname{div}(\bar{q}(u - u_{h\tau}))v + \int_{\Omega} a(u - u_{h\tau})v = \int_{\Omega} (f - f_h^n)v \\ & + \int_{\Omega} f_h^n v - \int_{\Omega} \frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{\tau_n} v - \int_{\Omega} D_h^n \nabla u_h^n \cdot \nabla v + \int_{\Omega} D_h^n \nabla(u_h^n - u_{h\tau}) \cdot \nabla v + \int_{\Omega} (D_h^n - D) \nabla u_{h\tau} \cdot \nabla v \\ & - \int_{\Omega} \operatorname{div}(\bar{q}^{n-1} u_h^{n-1})v + \int_{\Omega} \operatorname{div}(\bar{q}^{n-1}(u_h^{n-1} - u_{h\tau}))v + \int_{\Omega} \operatorname{div}((\bar{q}^{n-1} - \bar{q})u_{h\tau})v \\ & - \int_{\Omega} a_h^n u_h^n v + \int_{\Omega} a_h^n (u_h^n - u_{h\tau})v + \int_{\Omega} (a_h^n - a)u_{h\tau}v. \end{aligned} \quad (4.16)$$

For all $v \in H_0^1(\Omega)$ we denote by

$$\left\{ \begin{aligned} A(v) &:= \int_{\Omega} f_h^n v - \int_{\Omega} \frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{\tau_n} v - \int_{\Omega} D_h^n \nabla u_h^n \cdot \nabla v - \int_{\Omega} \operatorname{div}(\bar{q}^{n-1} u_h^{n-1})v - \int_{\Omega} a_h^n u_h^n v, \\ B(v) &:= \int_{\Omega} D_h^n \nabla(u_h^n - u_{h\tau}) \cdot \nabla v + \int_{\Omega} \operatorname{div}(\bar{q}^{n-1}(u_h^{n-1} - u_{h\tau}))v + \int_{\Omega} a_h^n (u_h^n - u_{h\tau})v, \\ C(v) &:= \int_{\Omega} (f - f_h^n)v + \int_{\Omega} (D_h^n - D) \nabla u_{h\tau} \cdot \nabla v + \int_{\Omega} \operatorname{div}((\bar{q}^{n-1} - \bar{q})u_{h\tau})v \\ &\quad + \int_{\Omega} (a_h^n - a)u_{h\tau}v, \end{aligned} \right. \quad (4.17)$$

and evaluate separately each term $A(v)$, $B(v)$ and $C(v)$.

Evaluation of the term A:

Since $I_m v$ is piecewise constant we can write A as

$$A(v) = \sum_{V \in \mathcal{V}_h^n} \int_V \left(f_h^n v - \frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{\tau_n} v - D_h^n \nabla u_h^n \cdot \nabla (v - I_m v) - \operatorname{div} (\bar{q}^{n-1} u_h^{n-1}) v - a_h^n u_h^n v \right).$$

An integration by part gives

$$\begin{aligned} A(v) &= \sum_{V \in \mathcal{V}_h^n} \left\{ \sum_{Q \subset V} \int_Q \left(f_h^n v - \frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{\tau_n} v + \operatorname{div} (D_h^n \nabla u_h^n (v - I_m v)) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \operatorname{div} (\bar{q}^{n-1} u_h^{n-1}) v - a_h^n u_h^n v \right) + \int_{\partial V} D_h^n \nabla u_h^n \cdot \vec{n} I_m v \right\} \\ &\quad + \sum_{E \in \mathcal{E}_h^n} \int_E [D_h^n \nabla u_h^n \cdot \vec{n}_E] (v - I_m v) \\ &= \sum_{V \in \mathcal{T}_h^n} \left\{ \sum_{Q \subset V} \int_Q \left(f_h^n - \frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{\tau_n} + \operatorname{div} (D_h^n \nabla u_h^n) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \operatorname{div} (\bar{q}^{n-1} u_h^{n-1}) - a_h^n u_h^n \right) (v - I_m v) \right. \\ &\quad \left. + \int_{\partial V} D_h^n \nabla u_h^n \cdot \vec{n} I_m v \right\} + \sum_{E \in \mathcal{E}_h^n} \int_E [D_h^n \nabla u_h^n \cdot \vec{n}_E] (v - I_m v) \\ &\quad + \sum_{V \in \mathcal{T}_h^n} \int_V \left(f_h^n - \frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{\tau_n} - \operatorname{div} (\bar{q}^{n-1} u_h^{n-1}) - a_h^n u_h^n \right) I_m v. \end{aligned}$$

For interior volumes V the finite volume discretization (3.13) implies that the last term is equal to

$$\begin{aligned} & - \sum_{V_i \in \mathcal{T}_h^n} (I_m v)_i \left(\sum_{\gamma_{ij} \subset \partial V_i} \int_{\gamma_{ij}} \left(\bar{q}^{n-1} \cdot \vec{n}_{\gamma_{ij}} u_h^{n-1}(x) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - (\bar{q}^{n-1} \cdot \vec{n}_{\gamma_{ij}})^+ u_h^{n-1}(x_i) - (\bar{q}^{n-1} \cdot \vec{n}_{\gamma_{ij}})^- u_h^{n-1}(x_j) \right) ds \right), \end{aligned}$$

where $(I_m v)_i = (I_m v)|_{V_i}$, and if we take \vec{n} to be the normal to γ_{ij} such that $\bar{q}^{n-1} \cdot \vec{n} \geq 0$ and the indices (ij) are such that $(x_i - x_j) \cdot \vec{n} \leq 0$ the last term is equal to

$$- \sum_{\mathcal{T} \in \mathcal{T}_h^n} \sum_{\gamma_{ij} \in \Gamma_h^n, \gamma_{ij} \subset \mathcal{T}} ((I_m v)_i - (I_m v)_j) \int_{\gamma_{ij}} \bar{q}^{n-1} \cdot \vec{n} (u_h^{n-1}(x_i) - u_h^{n-1}(x_j)) ds.$$

Let

$$\mathbf{R}_h^n|_Q := \left(f_h^n - \frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{\tau_n} + \operatorname{div} (D_h^n \nabla u_h^n) - \operatorname{div} (\bar{q}^{n-1} u_h^{n-1}) - a_h^n u_h^n \right) \quad (4.18)$$

$$\mathbf{r}_h^n|_E := [D_h^n \nabla u_h^n \cdot \vec{n}_E] \quad (4.19)$$

$$\mathbf{z}_h^n|_\gamma := \bar{q}^{n-1} \cdot \vec{n}_\gamma (u_h^{n-1}(x_i) - u_h^{n-1}(x)). \quad (4.20)$$

The expression $A(v)$ writes

$$\begin{aligned} A(v) = & \sum_{V \in \mathcal{V}_h^n} \sum_{Q \subset V} \int_Q \mathbf{R}_h^n(v - I_m v) + \sum_{E \in \mathcal{E}_h^n} \int_E \mathbf{r}_h^n(v - I_m v) \\ & - \sum_{\mathcal{T} \in \mathcal{T}_h^n} \sum_{\gamma_{ij} \in \Gamma_h^n, \gamma_{ij} \subset \mathcal{T}} ((I_m v)_i - (I_m v)_j) \int_{\gamma_{ij}} \mathbf{z}_h^n. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Lemma 4.1 (*Interpolation error bounds for I_m*)

Let $v \in H_0^1(\Omega)$ and I_m defined by (3.8), then we have

$$1) \quad \|v - I_m v\|_{0,K} \leq c_1 \alpha_K \|v\|_{\omega_K} \quad \forall K \in \mathcal{K}, K \subset Q \quad (4.22)$$

$$2) \quad \|v - I_m v\|_{0,E} \leq c_2 D_{\min}^{-1/4} \alpha_E^{1/2} \|v\|_{\omega_E} \quad \forall E \in \mathcal{E}_h^n \quad (4.23)$$

$$3) \quad \|(I_m v)_i - (I_m v)_j\|_{0,\gamma_{ij}} \leq c_3 D_{\min}^{-1/4} \alpha_{\gamma_{ij}}^{1/2} \|v\|_{\omega_{\gamma_{ij}}} \quad \forall \gamma_{ij} \in \Gamma_h^n \quad (4.24)$$

where $\alpha_S := \min(h_S D_{\min}^{-1/2}, \beta^{-1/2})$ for $S = K, E, \gamma_{ij}$, and the constants c_1, c_2 and c_3 are independent of h .

Proof.

1) Consider an arbitrary $v \in H^1(\Omega)$, an arbitrary $V \in \mathcal{V}_h^n$, $K \in \mathcal{K}$, $K \subset Q$ and an arbitrary $E \in \mathcal{E}_h^n$. We have the standard estimations

$$\|v - I_m v\|_{0,K} \leq ch_K \|\nabla v\|_{\omega_K},$$

$$\|v - I_m v\|_{0,K} \leq c' \|v\|_K.$$

Hence we get the bound (4.22)

$$\|v - I_m v\|_{0,K} \leq c_1 \min\{h_K D_{\min}^{-1/2}, \beta^{-1/2}\} \|v\|_{\omega_K}.$$

2) In order to show the interpolation bound (4.23) we consider the well-known trace inequality (cf. [45]) for $w \in H^1(\mathcal{T})$, for an arbitrary $\mathcal{T} \in \mathcal{T}_h^n$

$$\|w\|_{0,E} \leq c \left(h_{\mathcal{T}}^{-1/2} \|w\|_{0,\mathcal{T}} + \|w\|_{0,\mathcal{T}}^{1/2} \|\nabla w\|_{0,\mathcal{T}}^{1/2} \right).$$

We take $w = v - I_m v$ and restrict ourselves to the small triangle $K \subset \mathcal{T}$ where we have $w \in H^1(K)$, and use the bound (4.22)

$$\begin{aligned}
\|v - I_m v\|_{0,E}^2 &= \sum_{K \subset \omega_T} \|v - I_m v\|_{0,E \cap K}^2 \\
&\leq c \sum_{K \subset \omega_T} \left(h_K^{-1} \alpha_K^2 \|v\|_{\omega_T}^2 + \alpha_K \|v\|_{\omega_T} D_{min}^{-1/2} \|v\|_{\omega_T} \right) \\
&\leq c \sum_{K \subset \omega_T} \left(h_K^{-1} \alpha_K^2 + D_{min}^{-1/2} \alpha_K \right) \|v\|_{\omega_T}^2 \\
&\leq 2c \sum_{K \subset \omega_T} D_{min}^{-1/2} \alpha_K \|v\|_{\omega_T}^2 \\
&\leq c_2 D_{min}^{-1/2} \alpha_E \|v\|_{\omega_T}^2.
\end{aligned}$$

3) For the bound (4.24), we remark that

$$\|(I_m v)_i - (I_m v)_j\|_{0,\gamma_{ij}} \leq \|(I_m v)_i - v\|_{0,\gamma_{ij}} + \|v - (I_m v)_j\|_{0,\gamma_{ij}}.$$

and use the same argument as in 2). This completes the proof of Lemma 4.1 ■

One concludes from Lemma 4.1 and (4.21) that

$$\begin{aligned}
A(v) &\leq \sum_{V \in \mathcal{V}_h^n} \sum_{Q \subset V} \alpha_Q \|\mathbf{R}_h^n\|_{0,Q} \|v\|_{\omega_Q} + \sum_{E \in \mathcal{E}_h^n} D_{min}^{-1/4} \alpha_E^{1/2} \|\mathbf{r}_h^n\|_{0,E} \|v\|_{\omega_E} \\
&\quad + \sum_{\gamma \in \Gamma_h^n} D_{min}^{-1/4} \alpha_\gamma^{1/2} \|\mathbf{z}_h^n\|_{0,\gamma} \|v\|_{\omega_\gamma}. \tag{4.25}
\end{aligned}$$

We define the spatial error indicator by

$$(\eta_{\mathbf{R}}^n)^2 := \sum_{V \in \mathcal{T}^*} \sum_{Q \subset V} \alpha_Q^2 \|\mathbf{R}_h^n\|_{0,Q}^2 \tag{4.26}$$

$$(\eta_{\mathbf{r}}^n)^2 := D_{min}^{-1/2} \sum_{E \in \mathcal{E}} \alpha_E \|\mathbf{r}_h^n\|_{0,E}^2 \tag{4.27}$$

$$(\eta_{\mathbf{z}}^n)^2 := D_{min}^{-1/2} \sum_{\gamma \in \Gamma_h^n} \alpha_\gamma \|\mathbf{z}_h^n\|_{0,\gamma}^2 \tag{4.28}$$

$$(\eta_h^n)^2 := (\eta_{\mathbf{R}}^n)^2 + (\eta_{\mathbf{r}}^n)^2 + (\eta_{\mathbf{z}}^n)^2 \tag{4.29}$$

By using the fact that the domains ω_Q , ω_E and $\omega_{\gamma_{ij}}$ only consist of a finite number of elements that is bounded by the minimal ratio of the diameter of any element to the diameter of its largest inscribed ball, we conclude that

$$A(v) \leq \eta_h^n \|v\|,$$

and

$$\sum_{m=1}^n \int_{t_{m-1}}^{t_m} A(v) \leq \sum_{m=1}^n \int_{t_{m-1}}^{t_m} \eta_h^m \|v\| \leq \sum_{m=1}^n \eta_h^m \tau_m^{1/2} \left(\int_0^{t_n} \|v\|^2 \right)^{1/2}. \quad (4.30)$$

If we use the definition of η_r^n and η_z^n without the term $D_{min}^{-1/2}$ we obtain

$$\sum_{m=1}^n \int_{t_{m-1}}^{t_m} A(v) \leq C_1 \sum_{m=1}^n \int_{t_{m-1}}^{t_m} \eta_h^m \|v\| \leq C_1 \sum_{m=1}^n \eta_h^m \tau_m^{1/2} \left(\int_0^{t_n} \|v\|^2 \right)^{1/2} \quad (4.31)$$

where $C_1 = \sup(1, D_{min}^{-1/2})$.

Evaluation of the term B:

By (3.14), (3.15), (3.11) and (3.12) we have for $0 \leq t \leq t_n$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} D_h^n \nabla(u_h^n - u_{h\tau}) \cdot \nabla v &= \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right) \int_{\Omega} D_h^n \nabla(u_h^n - u_h^{n-1}) \cdot \nabla v \\ &\leq \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right) C_2(D) \| (D_h^n)^{1/2} \nabla(u_h^n - u_h^{n-1}) \| \|v\|; \end{aligned}$$

where $C_2(D) = (1 + \frac{c(D)h^{\ell+1}}{D_{min}^{1/2}})$.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} a_h^n (u_h^n - u_{h\tau}) v &= \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right) \int_{\Omega} a_h^n (u_h^n - u_h^{n-1}) v \\ &\leq \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right) c(a) \| (a_h^n)^{1/2} (u_h^n - u_h^{n-1}) \| \|v\|, \end{aligned}$$

where $C_2(a) = (1 + \frac{c(a)h^{\ell+1}}{\beta^{1/2}})$, and

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \operatorname{div}(\bar{q}^{n-1}(u_h^{n-1} - u_{h\tau})) v &= \left(\frac{t - t_{n-1}}{\tau_n} \right) \int_{\Omega} \operatorname{div}(\bar{q}^{n-1}(u_h^{n-1} - u_h^n)) v \\ &\leq \left(\frac{t - t_{n-1}}{\tau_n} \right) \beta^{-1/2} \| \operatorname{div}(\bar{q}^{n-1}(u_h^{n-1} - u_h^n)) \| \|v\|. \end{aligned}$$

Let

$$\xi_{\mathbf{h}}^{\mathbf{n}} := \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right) \| (D_h^n)^{1/2} \nabla(u_h^n - u_h^{n-1}) \| \quad (4.32)$$

$$\zeta_{\mathbf{h}}^{\mathbf{n}} := \left(\frac{t - t_{n-1}}{\tau_n} \right) \| \operatorname{div}(\bar{q}^{n-1}(u_h^{n-1} - u_h^n)) \| \quad (4.33)$$

$$\delta_{\mathbf{h}}^{\mathbf{n}} := \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right) \| (a_h^n)^{1/2} (u_h^n - u_h^{n-1}) \|. \quad (4.34)$$

One conclude that

$$B(v) \leq C_4(D, a, \beta) (\xi_{\mathbf{h}}^n + \zeta_{\mathbf{h}}^n + \delta_{\mathbf{h}}^n) \|v\|.$$

where $C_4(D, a, \beta) = \max(C_2(D), C_3(a), \beta^{-1/2})$.

We define the temporel error indicator as

$$\begin{aligned} \Theta_{\mathbf{h}}^n := & \left[\frac{\tau_n}{3} \left(\|(D_h^n)^{1/2} \nabla(u_h^n - u_h^{n-1})\|^2 \right. \right. \\ & + \|\operatorname{div}(\vec{q}^{n-1}(u_h^{n-1} - u_h^n))\|^2 \\ & \left. \left. + \|(a_h^n)^{1/2}(u_h^n - u_h^{n-1})\|^2 \right) \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (4.35)$$

So we have

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^n \int_{t_{m-1}}^{t_m} B(v) & \leq C_4(D, a, \beta) \sum_{m=1}^n \Theta_{\mathbf{h}}^m \left(\int_{t_{m-1}}^{t_m} \|v\|^2 \right)^{1/2} \\ & \leq C_4(D, a, \beta) \sum_{m=1}^n \Theta_{\mathbf{h}}^m \left(\int_0^{t_n} \|v\|^2 \right)^{1/2} \end{aligned}$$

Evaluation of the term C :

$$\begin{aligned} C(v) & := \int_{\Omega} (f - f_h^n + \operatorname{div}((\vec{q}^{n-1} - \vec{q})u_{h\tau}) + (a_h^n - a)u_{h\tau})v \\ & \quad + \int_{\Omega} (D_h^n - D)\nabla u_{h\tau} \cdot \nabla v \\ & \leq \left(\beta^{-1/2} \|f - f_h^n + \operatorname{div}((\vec{q}^{n-1} - \vec{q})u_{h\tau}) + (a_h^n - a)u_{h\tau}\|_0 \right. \\ & \quad \left. + D_{\min}^{-1/2} \|(D_h^n - D)\nabla u_{h\tau}\|_0 \right) \|v\|. \end{aligned}$$

Let

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{\mathbf{h}}^n(t) & := \left(\beta^{-1/2} \|f - f_h^n + \operatorname{div}((\vec{q}^{n-1} - \vec{q})u_{h\tau}) + (a_h^n - a)u_{h\tau}\|_0 \right. \\ & \quad \left. + D_{\min}^{-1/2} \|(D_h^n - D)\nabla u_{h\tau}\|_0 \right). \end{aligned} \quad (4.36)$$

One conclude that

$$\sum_{m=1}^n \int_{t_{m-1}}^{t_m} C(v) \leq \sum_{m=1}^n \left(\int_{t_{m-1}}^{t_m} |\mathbf{G}_{\mathbf{h}}^n(t)|^2 \right)^{1/2} \left(\int_0^{t_n} \|v\|^2 \right)^{1/2}.$$

Now we take $v = (u - u_{h\tau})(\cdot, t)$ for $0 \leq t \leq t_n$ and we use the fact that for all $v \in H_0^1(\Omega)$ we have

$$\int_{\Omega} |D^{1/2} \nabla v|^2 + \int_{\Omega} \operatorname{div}(\vec{q}v)v + \int_{\Omega} a|v|^2 = \int_{\Omega} |D^{1/2} \nabla v|^2 + \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} \operatorname{div} \vec{q} + a\right) |v|^2 \geq \|v\|^2$$

to obtain the following theorem.

Theorem 1 *Let u be the unique solution of problem (2.4) and $(u_h^n)_{n \geq 1}$ the solution of problem (3.13), then there exists a constant C independent of h , \vec{q} , a , D and β such that*

$$[[u - u_{h\tau}]](t_n) \leq C \left[\|u^0 - \Pi_0 u^0\|_0^2 + \sum_{m=1}^n ((\eta_h^m)^2 \tau_m + (\Theta_h^m)^2 + \int_{t_{m-1}}^{t_m} |\mathbf{G}_h^n(t)|^2) \right]^{1/2}$$

where η_h^m , Θ_h^m and \mathbf{G}_h^n are defined by (4.29), (4.35) and (4.36) respectively and $C = \max(C_1, C_4(D, a, \beta))$.

4.2 A lower bound for the error

In order to derive lower bound for the error, we prove separate bound for each indicator η_h^m and Θ_h^m . We begin with the later.

Proposition 4.2 *There exists constante $\mathcal{C}_1 = \mathcal{C}_1(D, \beta, \vec{q})$ such that*

$$\begin{aligned} \Theta_h^n \leq \mathcal{C}_1 & \left[\left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \left\| \frac{\partial}{\partial t} (u - u_{h\tau}) \right\|_{-1, \Omega}^2 \right)^{1/2} + \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \|u - u_{h\tau}\|^2 \right)^{1/2} \right. \\ & \left. + \tau_n^{1/2} \eta_h^n + \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} |\mathbf{G}_h^n(\mathbf{t})|^2 \right)^{1/2} \right] \end{aligned}$$

for all $1 \leq n \leq N$.

Proof. First of all we remark that

$$\begin{aligned} \left(\frac{\tau_n}{3} \right)^{1/2} \|u_h^n - u_h^{n-1}\| &= \left(\frac{\tau_n}{3} \right)^{1/2} \left[\|(D^n)^{1/2} \nabla (u_h^n - u_h^{n-1})\|^2 + \beta \|u_h^n - u_h^{n-1}\|^2 \right]^{1/2} \\ &\leq \left(\frac{\tau_n}{3} \right)^{1/2} \left[c(D) h^{\ell+1} \|(D_h^n)^{1/2} \nabla (u_h^n - u_h^{n-1})\|^2 \right. \\ &\quad \left. + c(a) h^{\ell+1} \|(a_h^n)^{1/2} (u_h^n - u_h^{n-1})\|^2 \right]^{1/2} \end{aligned}$$

So we have

$$\left(\frac{\tau_n}{3} \right)^{1/2} \|u_h^n - u_h^{n-1}\| \leq C_5 \Theta_h^n, \quad (4.37)$$

where $C_5 = h^{\ell+1} \max(c(D), c(a))$.

By (4.16) and (4.17) we have with $v = u_h^n - u_h^{n-1}$

$$\begin{aligned}
(\Theta_{\mathbf{h}}^n)^2 &= \int_{t_{n-1}}^{t_n} \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} (u - u_{h\tau}) v + \int_{\Omega} D \nabla (u - u_{h\tau}) \cdot \nabla v + \int_{\Omega} \operatorname{div} (\vec{q}(u - u_{h\tau})) v \\
&\quad + \int_{\Omega} a(u - u_{h\tau}) v - \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(A(u_h^n - u_h^{n-1}) + C(u_h^n - u_h^{n-1}) \right) \\
&\leq \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\frac{1}{D_{\min}^{1/2}} \left\| \frac{\partial}{\partial t} (u - u_{h\tau}) \right\|_* \right. \\
&\quad \left. + (1 + \|\vec{q}\|_{(L^\infty(\Omega))^2} (\beta D_{\min})^{-1/2}) \|u - u_{h\tau}\| \right) \|u_h^n - u_h^{n-1}\| \\
&\quad + \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(C_1 \eta_h^n + \mathbf{G}_{\mathbf{h}}^n(\mathbf{t}) \right) \|u_h^n - u_h^{n-1}\| \\
&\leq \left[\left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \frac{1}{D_{\min}} \left\| \frac{\partial}{\partial t} (u - u_{h\tau}) \right\|_*^2 \right)^{1/2} + C_6 \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \|u - u_{h\tau}\|^2 \right)^{1/2} \right. \\
&\quad \left. + C_1 \tau_n^{1/2} \eta_h^n + \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} |\mathbf{G}_{\mathbf{h}}^n(\mathbf{t})|^2 \right)^{1/2} \right] \tau_h^{1/2} \|u_h^n - u_h^{n-1}\|
\end{aligned}$$

where $C_6 = 1 + \|\vec{q}\|_{(L^\infty(\Omega))^2} (\beta D_{\min})^{-1/2}$. We conclude by using (4.37)

$$\begin{aligned}
\Theta_{\mathbf{h}}^n &\leq C_1 \left[\left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \frac{1}{D_{\min}} \left\| \frac{\partial}{\partial t} (u - u_{h\tau}) \right\|_*^2 \right)^{1/2} + \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \|u - u_{h\tau}\|^2 \right)^{1/2} \right. \\
&\quad \left. + \tau_n^{1/2} \eta_h^n + \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} |\mathbf{G}_{\mathbf{h}}^n(\mathbf{t})|^2 \right)^{1/2} \right],
\end{aligned}$$

where $C_1 = \sqrt{3} C_5 \max(1, C_6, C_1)$. This completes the proof of Proposition 4.2 ■

Proposition 4.3 *There exists a constant $C_2 = C_2(a, D, \beta, \vec{q})$ such that*

$$\begin{aligned}
\tau_n^{1/2} \eta_h^n &\leq C_2 \left[\left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \left\| \frac{\partial}{\partial t} (u - u_{h\tau}) \right\|_*^2 \right)^{1/2} + \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \|u - u_{h\tau}\|^2 \right)^{1/2} \right. \\
&\quad + \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \|\operatorname{div} (\vec{q}(u - u_{h\tau}))\|^2 \right)^{1/2} + \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} |\mathbf{G}_{\mathbf{h}}^n(\mathbf{t})|^2 \right)^{1/2} \\
&\quad \left. + \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} (\|u_h^{n-1} - u\|^2) \right)^{1/2} + \|u_0\|_{0,\Omega} + \beta^{-1/2} \|f\|_{L^2(0,t_n;L^2(\Omega))} \right]
\end{aligned}$$

for all $1 \leq n \leq N$.

Proof. Recall that for all $v \in H_0^1(\Omega)$ the term $A(v)$ is given by

$$\begin{aligned} A(v) = & \sum_{V \in \mathcal{V}_h^n} \sum_{Q \subset V} \int_Q \mathbf{R}_h^n(v - I_m v) + \sum_{E \in \mathcal{E}_h^n} \int_E \mathbf{r}_h^n(v - I_m v) \\ & - \sum_{\mathcal{T} \in \mathcal{T}_h^n} \sum_{\gamma_{ij} \in \Gamma_h^n, \gamma_{ij} \subset \mathcal{T}} ((I_m v)_i - (I_m v)_j) \int_{\gamma_{ij}} \mathbf{z}_h^n, \end{aligned} \quad (4.38)$$

and has also the expression

$$A(v) = \sum_{\mathcal{T} \in \mathcal{T}_h^n} \int_{\mathcal{T}} \mathbf{R}_h^n v + \sum_{E \in \mathcal{E}_h^n} \int_E \mathbf{r}_h^n v.$$

Following [46], we introduce for any element $\mathcal{T} \in \mathcal{T}_h^n$ and any edge $E \in \mathcal{E}_h^n$ the corresponding bubble functions ψ_K and ψ_E . We denote by ω_E the support of ψ_E which is the union of two elements of \mathcal{T}_h^n sharing E and set

$$w_n = \delta_1 \sum_{\mathcal{T} \in \mathcal{T}_h^n} \alpha_T^2 \psi_{\mathcal{T}} \mathbf{R}_h^n + \delta_2 D_{min}^{-1/2} \sum_{E \in \mathcal{E}_h^n} \alpha_E \psi_E \mathbf{r}_h^n.$$

Using the same arguments as in [46] we can choose the constants γ_1 and γ_2 such that

$$A(w_n) \geq (\eta_{\mathbf{R}}^n)^2 + (\eta_{\mathbf{r}}^n)^2, \quad (4.39)$$

$$\|w_n\| \leq C \left((\eta_{\mathbf{R}}^n)^2 + (\eta_{\mathbf{r}}^n)^2 \right)^{1/2}. \quad (4.40)$$

So we have

$$\begin{aligned} (\eta_{\mathbf{R}}^n)^2 + (\eta_{\mathbf{r}}^n)^2 + (\eta_z^n)^2 &= (\eta_h^n)^2 \leq A(w_n) + (\eta_z^n)^2 \\ \|w_n\| &\leq C^* \eta_h^n \end{aligned}$$

To bound the term η_h^n we use the last inequalities and (4.16). Let α be an arbitrary parameter such that $\alpha \geq 0$.

$$\begin{aligned} \tau_n (\eta_h^n)^2 &= \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\alpha + 1) \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right)^\alpha (\eta_h^n)^2 \\ &\leq \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\alpha + 1) \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right)^\alpha A(w_h) + \tau_n (\eta_z^n)^2 \\ &\leq \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\alpha + 1) \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right)^\alpha \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} (u - u_{h\tau}) w_n \\ &\quad + \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\alpha + 1) \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right)^\alpha \int_{\Omega} D \nabla (u - u_{h\tau}) \cdot \nabla w_n \\ &\quad + \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\alpha + 1) \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right)^\alpha \int_{\Omega} \operatorname{div} (\vec{q}(u - u_{h\tau})) w_n \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\alpha + 1) \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right)^\alpha \int_{\Omega} a(u - u_{h\tau}) w_n \\
& - \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\alpha + 1) \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right)^\alpha \left(B(w_n) + C(w_n) \right) + \tau_n (\eta_z^n)^2 \\
\leq & \int_{t_{n-1}}^{t_n} C^* \eta_h^n (\alpha + 1) \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right)^\alpha \left(\left\| \frac{\partial}{\partial t} (u - u_{h\tau}) \right\|_* + \|u - u_{h\tau}\| \right. \\
& \left. + \beta^{-1/2} \|\operatorname{div} (\vec{q}(u - u_{h\tau}))\| + \mathcal{A} \|u - u_{h\tau}\| + \mathbf{G}_h^n(t) \right) \\
& - \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\alpha + 1) \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right)^\alpha B(w_n) + \tau_n (\eta_z^n)^2
\end{aligned}$$

Since

$$\left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[(\alpha + 1) \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right)^\alpha \right]^2 \right)^{1/2} = \tau_n^{1/2} \frac{\alpha + 1}{\sqrt{2\alpha + 1}}$$

we conclude that

$$\begin{aligned}
\tau_n (\eta_h^n)^2 \leq & C^* \eta_h^n \tau_n^{1/2} \frac{\alpha + 1}{\sqrt{2\alpha + 1}} \left[\left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \left\| \frac{\partial}{\partial t} (u - u_{h\tau}) \right\|_*^2 \right)^{1/2} \right. \\
& \left. + (1 + \mathcal{A}) \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \|u - u_{h\tau}\|^2 \right)^{1/2} + \beta^{-1/2} \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \|\operatorname{div} (\vec{q}(u - u_{h\tau}))\|^2 \right)^{1/2} \right] \\
& - \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\alpha + 1) \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right)^\alpha B(w_n) + \tau_n (\eta_z^n)^2.
\end{aligned}$$

Let us now bound the last integral in term of η_h^n . We have

$$\begin{aligned}
\int_{t_{n-1}}^{t_n} (\alpha + 1) \left(\frac{t_n - t}{\tau_n} \right)^\alpha B(w_n) & = \tau_n \frac{\alpha + 1}{\alpha + 2} \int_{\Omega} (D_h^n \nabla (u_h^n - u_h^{n-1}) \nabla w_n + a_h^n (u_h^n - u_h^{n-1}) w_n) \\
& + \tau_n \frac{1}{\alpha + 2} \int_{\Omega} \operatorname{div} (\vec{q}^{n-1} (u_h^n - u_h^{n-1})) w_n \\
& \leq \tau_n^{1/2} \frac{\alpha + 1}{\alpha + 2} C_4(D, a, \beta) \sqrt{3} \Theta_h^n C^* \eta_h^n.
\end{aligned}$$

Using Proposition 4.2 we obtain

$$\begin{aligned}
\tau_n (\eta_h^n)^2 \leq & \mathcal{C}_3 \tau_n^{1/2} \eta_h^n \left[\left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \left\| \frac{\partial}{\partial t} (u - u_{h\tau}) \right\|_*^2 \right)^{1/2} + \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \|u - u_{h\tau}\|^2 \right)^{1/2} \right. \\
& \left. + \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \|\operatorname{div} (\vec{q}(u - u_{h\tau}))\|^2 \right)^{1/2} + \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} |\mathbf{G}_h^n(\mathbf{t})|^2 \right)^{1/2} \right] \\
& + \tau_n (\eta_h^n)^2 C^* \mathcal{C}_1 C_4 \frac{\alpha + 1}{\alpha + 2} + \tau_n (\eta_z^n) (\eta_h^n)
\end{aligned}$$

where $\mathcal{C}_3 = \max\left(\frac{\alpha+1}{\sqrt{2\alpha+1}} \max(1 + \mathcal{A}, \beta^{-1/2}), \frac{\alpha+1}{\alpha+2} \mathcal{C}_3 \sqrt{3} \mathcal{C}_1\right)$.

Let $m \geq 1$ be an integer. Since $\frac{\alpha+1}{\alpha+2} \leq \frac{\alpha+m}{\alpha+2}$, we can choose α and m such that $C^* \mathcal{C}_1 C_4 \frac{\alpha+1}{\alpha+2} = \frac{1}{2}$ and conclude that

$$\begin{aligned} \tau_n^{1/2} \eta_h^n &\leq 2\mathcal{C}_3 \left[\left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \left\| \frac{\partial}{\partial t} (u - u_{h\tau}) \right\|_*^2 \right)^{1/2} + \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \|u - u_{h\tau}\|^2 \right)^{1/2} \right. \\ &\quad \left. + \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \|\operatorname{div}(\vec{q}(u - u_{h\tau}))\|^2 \right)^{1/2} + \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} |\mathbf{G}_h^n(\mathbf{t})|^2 \right)^{1/2} \right] + 2\tau_n^{1/2} \eta_z^n. \end{aligned}$$

Let us now bound the term $\tau_n^{1/2} \eta_z^n$. By (4.20), Lemma (4.1) and (2.6) we have

$$\begin{aligned} (\tau_n^{1/2} \eta_z^n)^2 &= \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\eta_z^n)^2 \\ &= \int_{t_{n-1}}^{t_n} D_{\min}^{-1/2} \sum_{\gamma_{ij} \subset \Gamma_h^n} \alpha_{\gamma_{ij}} \|\vec{q}^{n-1} \cdot \vec{n}_{\gamma_{ij}} (u_h^{n-1}(x_i) - u_h^{n-1}(x))\|_{0,\gamma_{ij}}^2 \\ &\leq D_{\min}^{-1/2} \|\vec{q}\|_{(L^\infty(\Omega))^2}^2 \mathcal{C}_2 \int_{t_{n-1}}^{t_n} \sum_{\gamma_{ij} \subset \Gamma_h^n} \alpha_{\gamma_{ij}}^2 \|u_h^{n-1}\|_{\omega_{\gamma_{ij}}}^2 \\ &\leq D_{\min}^{-1/2} \|\vec{q}\|_{(L^\infty(\Omega))^2}^2 2\mathcal{C}_2 \max_{\gamma \in \Gamma_h^n} \alpha_\gamma \int_{t_{n-1}}^{t_n} \|u_h^{n-1}\|^2 \\ &\leq D_{\min}^{-1/2} \|\vec{q}\|_{(L^\infty(\Omega))^2}^2 4\mathcal{C}_2 \max_{\gamma \in \Gamma_h^n} \alpha_\gamma \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\|u_h^{n-1} - u\|^2 + \|u\|^2) \\ &\leq \mathcal{C}_3 \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} (\|u_h^{n-1} - u\|^2) + \|u_0\|_{0,\Omega}^2 + \beta^{-1} \|f\|_{L^2(0,t_n;L^2(\Omega))}^2 \right) \end{aligned}$$

where $\mathcal{C}_4 = D_{\min}^{-1/2} \|\vec{q}\|_{(L^\infty(\Omega))^2}^2 2\mathcal{C}_2 \max_{\gamma \in \Gamma_h^n} \alpha_\gamma$. The result of Proposition 4.2 is proved by taking $\mathcal{C}_2 = \max(\mathcal{C}_2, \mathcal{C}_3)$. ■

5 Numerical Simulations

In this section, we present some numericals results in 2-D based on the scheme presented in this paper for the concentration equation for miscible flow problems.

For the sake of completeness we recall the coupled system used for the simulations. The flow and transport of miscible displacement of one incompressible fluid by another through a porous medium Ω over a time period $]0, T[$ is governed by the following system (see, e.g., [7]):

Pressure equation:

$$\begin{cases} \vec{q} = -\frac{K(x)}{\mu(c)} \nabla p & \text{in } \Omega \times]0, T[\\ \operatorname{div} \vec{q} = 0 & \text{in } \Omega \times]0, T[\end{cases} \quad (5.41)$$

Concentration equation:

$$\Phi(x) \frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div} (D(x, \vec{q}) \nabla c - c \vec{q}) + R(x)c = f(x, t) \quad \text{in } \Omega \times]0, T[\quad (5.42)$$

subject to boundary and initial conditions, p and \vec{q} are the pressure and Darcy velocity of the fluid mixture, Φ and K are the porosity and the permeability of the medium, μ is the viscosity of the mixture, c is the concentration of the contaminant solute, and f is the external flow rate. R is the latency retardation factor.

The form of the diffusion–dispersion tensor D that we use in our simulator is given by:

$$D(x, \vec{q}) = d_e I + |\vec{q}| [\alpha_l E(\vec{q}) + \alpha_t (I - E(\vec{q}))] \quad (5.43)$$

with $E_{ij}(\vec{q}) = \frac{q_i q_j}{|\vec{q}|^2}$, d_e is the effective diffusion coefficient, and α_l and α_t are the magnitudes of longitudinal and transverse dispersion respectively.

Because the magnitude of the diffusion–dispersion tensor D is often much smaller than that of the Darcy velocity \vec{q} , the concentration equation (5.42) is a strongly convection–dominated PDE with small diffusion and dispersion terms indicated by the size of the coefficients d_e , α_l and α_t in (5.43). Moreover, (5.41)–(5.42) is a coupled system of PDEs which is typically defined on a very large physical domain.

One important issue in the simulation of porous medium flows is the manner in which the Darcy velocity \vec{q} is calculated. Since the convection and diffusion–dispersion terms in (5.42) are governed by the Darcy velocity, accurate approximation of the concentration c requires an accurate approximation to the Darcy velocity \vec{q} .

An IMPES simulator, MFlow (cf. [4], [5]), has been developed which applies a mixed hybrid finite element method [11] for computing an accurate approximation of the velocity \vec{q} and the FV described here for the concentration equation. Our implementation for the test problems uses the lowest Raviart-Thomas element that specify piecewise constant pressure and piecewise continuous flux for the velocity.

It should be mentioned that the theoretical analysis of the method described in this paper for the coupled system is far from complete. Nevertheless the numerical experiments show, that with the FV discretization, the upwind and the adaptive grid control based on the error indicators, we have a powerful tool for solving flow and transport of miscible flow problems.

The three example problems used to illustrate the methodology are (1) a homogeneous isotropic reservoir, (2) a heterogeneous reservoir with two different permeability distributions, with values ranging from 10^{-5} to 1 and (3) the saltdom problem (cf. [12]).

5.1 Test problem 1: isotropic case

In this example, we consider a homogeneous reservoir $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ with permeability $K = 10^{-05}$. The boundary conditions used are no-flow at the top and bottom, a constant pressure $p_0 = 1$ on the left and $p_0 = 0$ on the right. The test problem involves

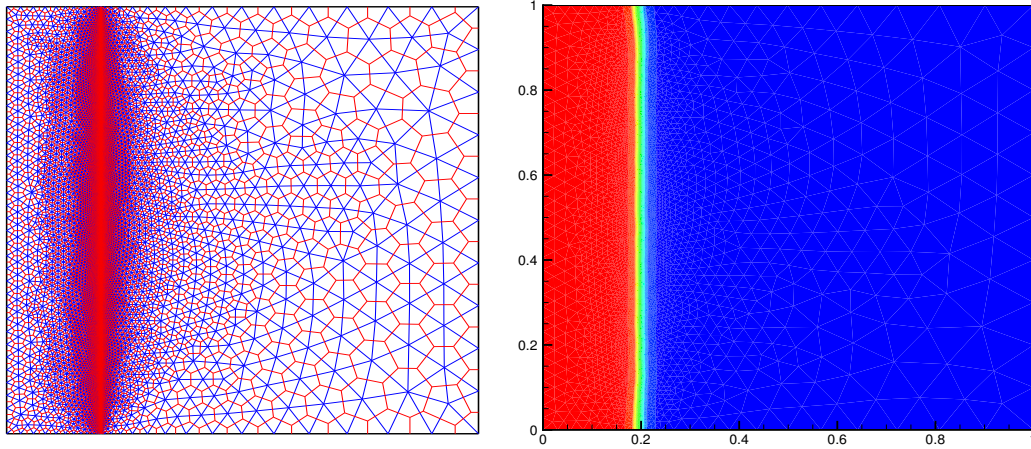


Figure 2: Adaptive grid and concentration contours at $t=0.042$ years.

simulation with $\Phi = 0.2$, $\mu = 1$, $R = 0$, $d_e = 10^{-6}$, $\alpha_l = 5$, $\alpha_t = 0.5$, and $c_0 = 0$. An injection source is placed at the left side $f = 1$.

The domain was discretized by three meshes, at each level we use the local indicators to detect the elements of large error and remesh the whole domain (see Table 1). The concentration front is very sharp due to the small diffusion-dispersion term. Figures 2–4 show the obtained mesh and the concentration contours for three time steps. From these figures, we can see that the local error estimators lead to local refinement around the expected concentration front.

	nb of triangles	CPU time	$\ \eta_{R_h}^n\ _{0,Q}$	$\ \eta_{r_h}^n\ _{0,E}$	$\ \eta_{z_h}^n\ _{0,\gamma}$	final time
Mesh0	24080	0mn32.41s	$1.577e^{-03}$	$3.47e^{-12}$	$1.044e^{-03}$	0.042 years
Mesh1	27746	1mn 26.67s	$1.56e^{-03}$	$1.25e^{-12}$	$9.75e^{-04}$	0.1 years
Mesh2	34030	2mn 52.85s	$1.41e^{-03}$	$1.09e^{-12}$	$1.42e^{-04}$	0.2 years

Table 1: Test problem 1.

5.2 Test problem 2: heterogeneous case

In this example, we consider a heterogeneous reservoir $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ with two different permeability distributions as shown in Figure 5: (blue, $K = 10^{-5}$) and (red, $K = 1$). A source term is placed at the lower left-hand corner of the reservoir, Γ_{in} , and an outlet, Γ_{out} , is placed at the top right-hand corner of the reservoir. The boundary conditions are illustrated in Figure 6: $\vec{q} \cdot \vec{n} = -0.1$ on Γ_{in} and $p = 1$ on Γ_{out} . All the Γ_{noflow} boundaries are no flow boundaries. The parameters were chosen as follows: $\Phi =$

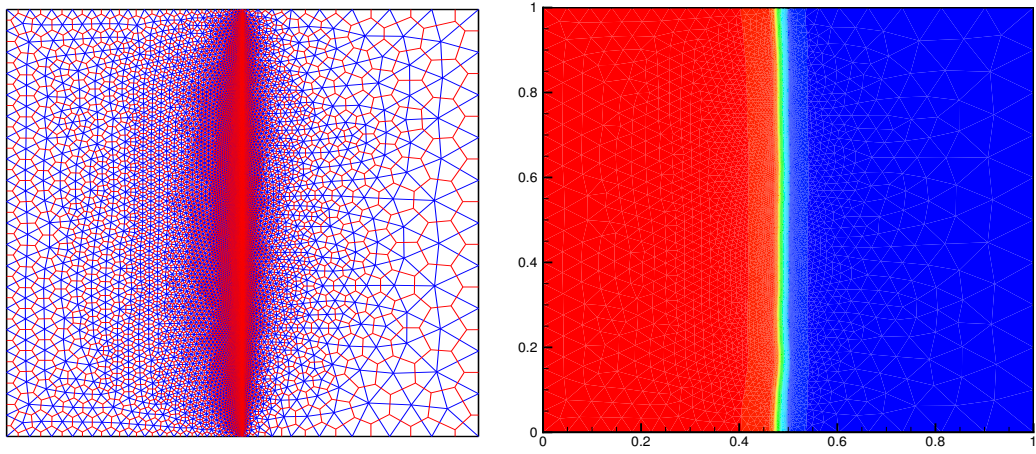


Figure 3: Adaptive grid and concentration contours at $t=0.1$ years.

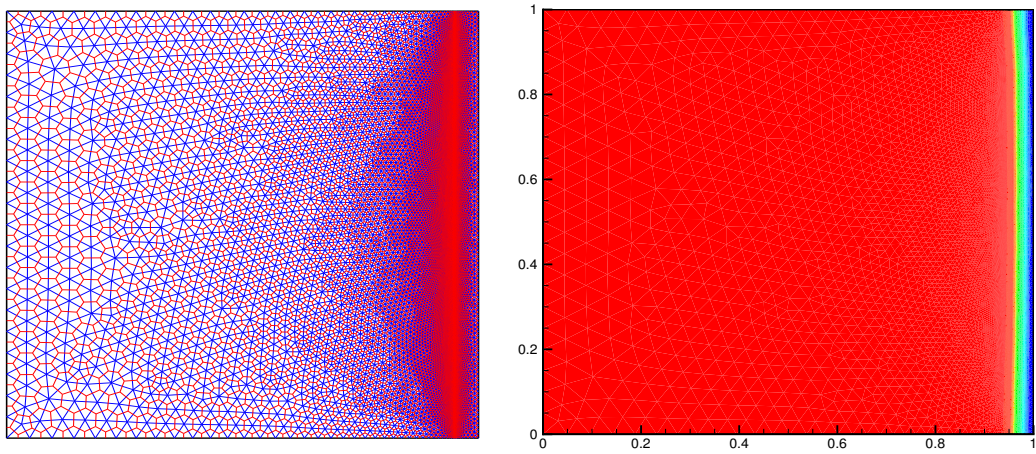


Figure 4: Adaptive grid and concentration contours at $t=0.2$ years.

0.2, $\mu = 1$, $R = 0$, $d_e = 10^{-5}$, $\alpha_t = 5$, $\alpha_t = 0.5$, $c_0 = 0$ and $f = 1$ on Γ_{in} and $= 0$ elsewhere.

In Figure 7 we present the primal grid and in Figure 8 the adaptive grid. From these figures, we can see that the local error estimators lead to local refinement around the expected regions where there are strong and sharp variation of the permeability. In order to compare these results with those when no local refinement is applied, we also include the computations obtained with a uniform grid (cf. Table 2). From concentration contours Figures 9–11 and Table 2, we can conclude that the accuracy of the solution obtained on a mesh with adaptive grid is comparable to the accuracy of the uniform grid, while the nombre of triangles are four times smaller.

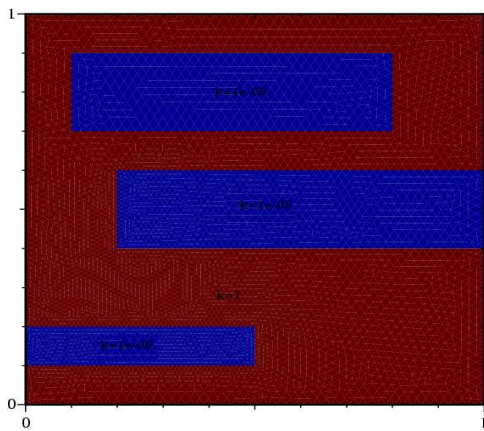


Figure 5: Permeability distribution.

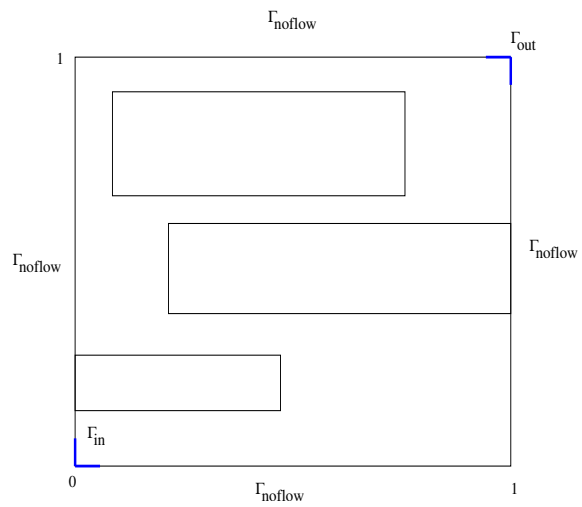


Figure 6: Boundary conditions.

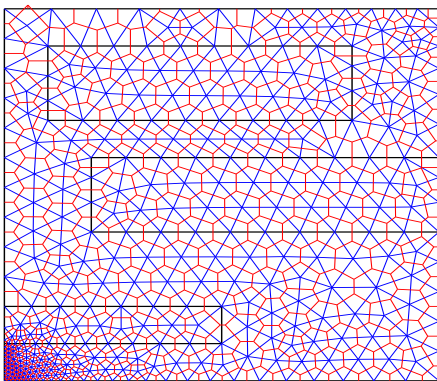


Figure 7: Primal grid.

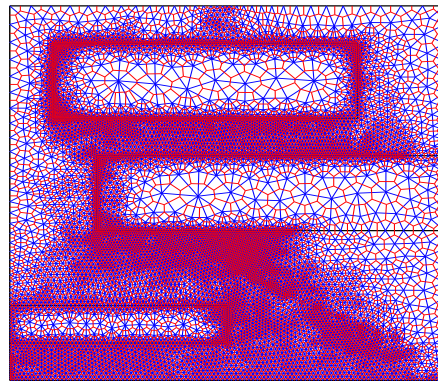


Figure 8: Adaptive grid.

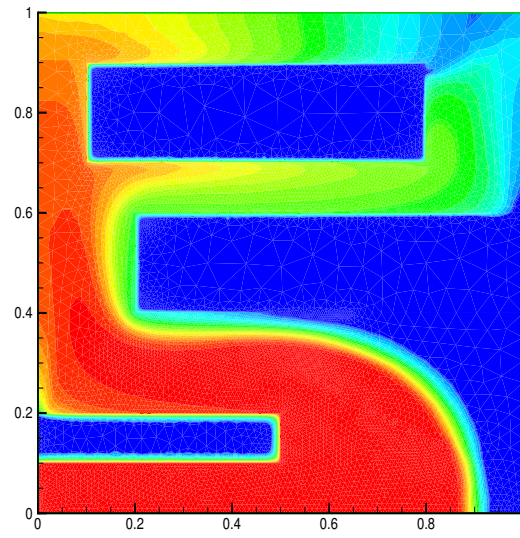
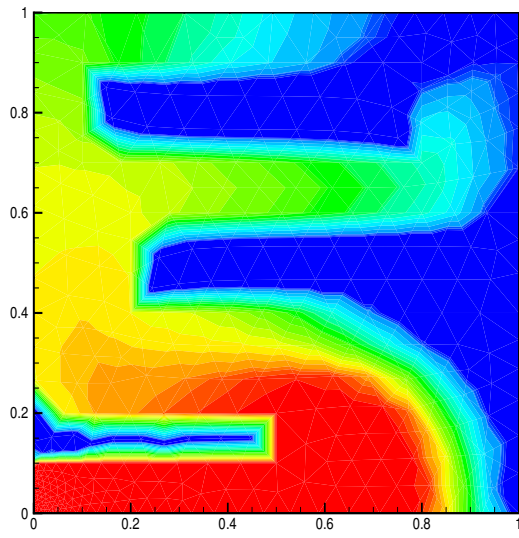


Figure 9: Concentration for primal grid. Figure 10: Concentration for adaptive grid.

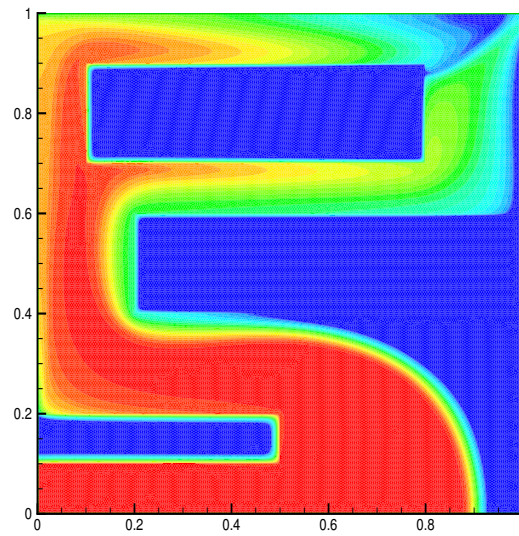


Figure 11: Concentration for uniform grid.

	nb of triangles	CPU time	$\ \eta_{R_b}^n\ _{0,Q}$	$\ \eta_{r_b}^n\ _{0,E}$	$\ \eta_{z_b}^n\ _{0,\gamma}$	final time
primal grid	656	0mn8.15s	$3.075e^{-02}$	$2.913e^{-09}$	$1.449e^{-02}$	10 years
adaptive grid	22499	7mn51.19s	$2.512e^{-02}$	$1.101e^{-10}$	$1.115e^{-02}$	10 years
uniform grid	93186	27mn3.51s	$2.494e^{-02}$	$3.755e^{-12}$	$7.464e^{-03}$	10 years

Table 2: Test problem 2.

5.3 Test problem 3: Saltdome

We consider the saltdome problem presented in [12] which describes the flow over a saltdome which is sitting at the bottom of an aquifer initially filled with pure water ($c_0 = 0$). The computational domain is defined as $\Omega = [0, 900] \times [0, 300]$. The boundary and initial conditions are illustrated in Figure 12. At the top of the domain Ω a pressure difference is prescribed. The saltdome is situated in the middle of the lower boundary (See Figure 12). All other boundaries are no flow boundaries. The parameters were chosen as follows: $K = 3.5 \cdot 10^{-2}$, $\Phi = 0.2$, $d_e = 0.86$, $\mu = 1$, $\alpha_l = 20$, $\alpha_t = 2$, and $p = -111x + 10^5$ at the top boundary.

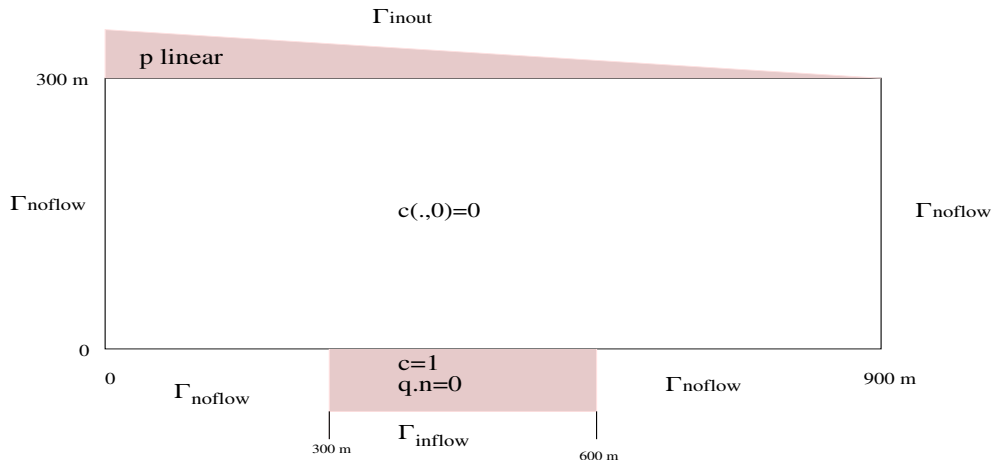


Figure 12: Geometry, initial and boundary conditions for the saltdome problem.

Figures 13–15 show the adaptive grid and the salt concentration at three time steps. Again we can see that the local error estimators lead to local refinement around the expected concentration front. The salt concentration show good agreement with those in [12].

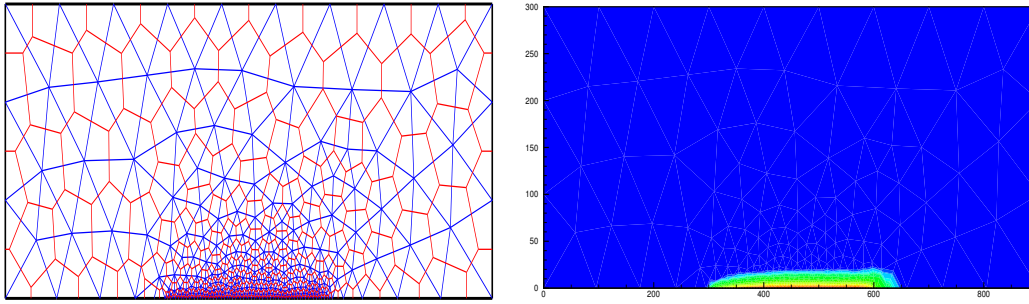


Figure 13: Adaptive grid and concentration contours at $t=5$ years.

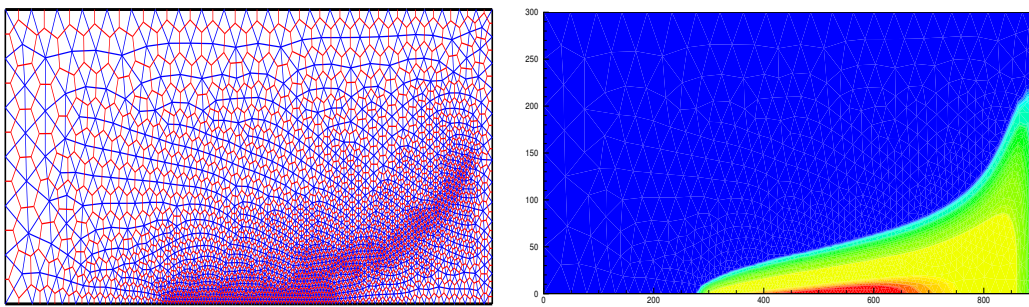


Figure 14: Adaptive grid and concentration contours at $t=40$ years.

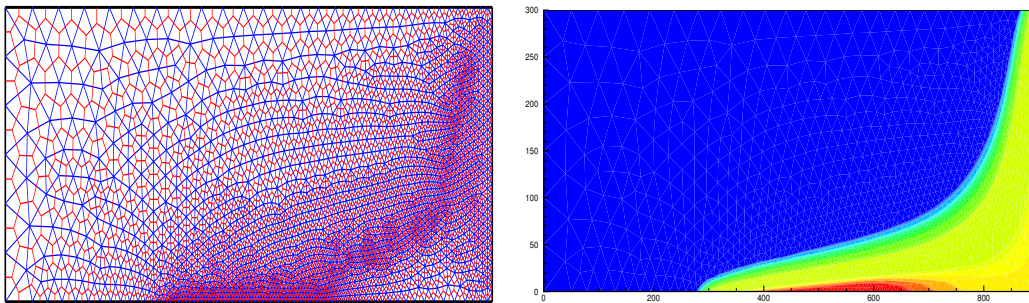


Figure 15: Adaptive grid and concentration contours at $t=240$ years.

	nb of triangles	CPU time	$\ \eta_{R_h}^n\ _{0,Q}$	$\ \eta_{r_h}^n\ _{0,E}$	$\ \eta_{z_h}^n\ _{0,\gamma}$	final time
Mesh0	505	0mn1.23s	$3.978e^{-02}$	$3.978e^{-02}$	$2.0002e^{-03}$	5 years
Mesh1	2710	0mn21.60s	$2.681e^{-03}$	$7.628e^{-03}$	$1.851e^{-03}$	40 years
Mesh2	3400	2mn16.72s	$3.102e^{-03}$	$6.744e^{-03}$	$1.97e^{-03}$	240 years

Table 3: Test problem 3.

Acknowledgment

This work has been partially supported from the CMIMF Actions Intégrées N^0 *MA/02/34* and *MA/04/94* whose support is gratefully acknowledged.

References

- [1] M. Afif M and B. Amaziane, Convergence of finite volume schemes for a degenerate convection-diffusion equation arising in flow in porous media, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **191** (2002) 5265–5286.
- [2] M. Afif and B. Amaziane, Numerical simulation of two-phase flow through heterogeneous porous media. *Numerical Algorithms* **34** (2003) 117–125.
- [3] M. Ainsworth and J. T. Oden, *A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis* (Wiley , Chichester, 2000).
- [4] B. Amaziane, M. El Ossmani and C. Serres, Numerical modeling of the flow and transport of radionuclides in heterogeneous porous media, Preprint (2004).
http://lma.univ-pau.fr/data/pub/pub_pdf2004/0423.pdf
- [5] B. Amaziane B and M. El Ossmani, Convergence analysis of an approximation to miscible fluid flows in porous media by combining mixed finite element and finite volume methods, Preprint (2005).
http://lma.univ-pau.fr/data/pub/pub_pdf2005/0505.pdf
- [6] T. Barth and M. Ohlberger, *Finite Volume Methods: Foundation and Analysis*. In: E. Stein, R. de Borst, T.J.R. Hughes (Eds.), *Encyclopedia of Computational Mechanics*. (John Wiley & Sons, Ltd, 2004).
- [7] J. Bear and Y. Bachmat, *Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media* (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1991).
- [8] A. Bergam, C. Bernardi and Z.Mghazli, A posteriori analysis of the finite element discretization of some parabolic equations, *Math. Comp.* **74**, No.251, (2005) 1117–1138.
- [9] A. Bergam, Z. Mghazli and R.Verfürth, Estimations a posteriori d’un schéma de volumes finis pour un problème non Linéaire, *Numer. Math.* **95**, (2003) 599-624.
- [10] A. Bourgeat and M. Kern, Guest Editors, *Simulation of Transport around a Nuclear Waste Disposal Site: the Couplex Test Cases*, *Computational Geosciences* **8**, (Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 2004).

- [11] F. Brezzi and M. Fortin, *Mixed and Hybrid Finite Element Methods* (Springer-Verlag, New York, 1991).
- [12] D. Bürkle and M. Ohlberger, Adaptive finite volume methods for displacement problems in porous media, *Comput. Vis. Sci.* **5**, No.2, (2002) 95-106.
- [13] M. A. Celia, T. F. Russell, I. Herrera, and R. E. Ewing, An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for the advection-diffusion equation, *Advances in Water Resources* **13** (2002) 187–206.
- [14] G. Chavent and J. Jaffré, *Mathematical Models and Finite Elements for Reservoir Simulation* (North-Holland, Amsterdam, 1986).
- [15] Z. Chen, R. E. Ewing and Z.-C. Shi, Editors, *Numerical Treatment of Multiphase Flows in Porous Media* (Springer–Verlag, Berlin, 2000).
- [16] P. G. Ciarlet, *The Finite Element Method for Elliptic problems* (North-Holland, Amsterdam, 1978).
- [17] Y. Coudière, T. Gallouët, and R. Herbin, Discrete Sobolev inequalities and L^p error estimates for finite volume solutions of convection diffusion equations, *M2AN, Math. Model. Numer. Anal.* **35**, No.4, (2001) 767-778.
- [18] R. Dautray and J. L. Lions, *Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology* (Springer, Berlin, 1992).
- [19] J. Douglas and T. F. Russell, Numerical methods for convection-dominated diffusion problems based on combining the method of characteristics with finite element or finite difference procedures, *SIAM J. Numer. Anal.* **19**, (1982) 871-885 .
- [20] J. Droniou, Error estimates for the convergence of a finite volume discretization of convection-diffusion equations, *J. Numer. Math.* **11**, No.1, (2003) 1-32.
- [21] R. Eymard, T. Gallouët and R. Herbin, The Finite Volume Method, in: *Handbook of Numerical Analysis*, eds P.G. Ciarlet and J.L. Lions. (North-Holland, Amsterdam, 2000) pp. 715–1022.
- [22] R. Eymard, T. Gallouët and R. Herbin, A finite volume scheme for anisotropic diffusion problems, *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I* **339** (2004) 299–302.
- [23] R. Eymard, D. Hilhorst, and M. Vohralik, Combined nonconforming/mixed-hybrid finite element-finite volume scheme for degenerate parabolic problems, Feistauer, M. (ed.) et al., *Numerical mathematics and advanced applications*. (Springer, Berlin, 2004) pp. 288-297.

- [24] R. E. Ewing, *The Mathematics of Reservoir Simulation* (SIAM, Philadelphia, 1983).
- [25] M. Feistauer, J. Felcman and I. Straskraba, *Mathematical and Computational Methods for Compressible Flow* (Oxford Sciences Publications, 2003).
- [26] T. Gallouët, R. Herbin, and M. H. Vignal, Error estimates on the approximate finite volume solution of convection diffusion equations with general boundary conditions, *SIAM J. Numer. Anal.* **37**, No.6, (2000) 1935-1972.
- [27] R. Herbin, An error estimate for a finite volume scheme for a diffusion-convection problem on a triangular mesh, *Numer. Methods Partial Differ. Equations* **11**, No.2, (1995) 165-173.
- [28] R. Herbin and D. Kröner, Editors, *Finite Volumes for Complex Applications III*. (Hermes Penton Science, London, 2002).
- [29] D. Kröner, *Numerical Schemes for Conservation Laws* (Wiley-Teubner, Stuttgart, 1997).
- [30] R. Lazarov, I. D. Mishev, and P. S. Vassilevski, Finite volume methods for convection-diffusion problems, *SIAM J. Numer. Anal.* **33**, No.1, (1996) 31-55.
- [31] R. Lazarov and S. Tomov, A posteriori error estimates for finite volume element approximations of convection-diffusion-reaction equations, *Comput. Geosci.* **6**, No.3-4, (2002) 483-503.
- [32] R. J. LeVeque, *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems* (Cambridge University Press, New York, 2002).
- [33] R. H. Li, Z. Y. Chen, and W. Wu, *Generalized Difference Methods for Differential Equations* (Marcel Dekker, New York, 2000).
- [34] A. Michel, A finite volume scheme for two-phase immiscible flow in porous media, *SIAM J. Numer. Anal.* **41**, No.4, (2003) 1301-1317.
- [35] K. W. Morton, *Numerical Solution of Convection-Diffusion Problems*, (Chapman & Hall, London, 1996).
- [36] K. W. Morton, M. Stynes, and E. Süli, Analysis of a cell-vertex finite volume method for convection-diffusion problems, *Math. Comput.* **66**, No.220, (1997) 1389-1406.
- [37] Ohlberger M. A posteriori error estimates for vertex centred finite volume approximations of convection-diffusion-reaction equation. *M2AN, Math. Model. Numer. Anal.* **35**, (2001) 355–387.

- [38] M. Ohlberger and C. Rohde, Adaptive finite volume approximations for weakly coupled convection dominated parabolic systems, *IMA J. Numer. Anal.* **22**, No.2, (2002) 253-280.
- [39] O. Pironneau, On the transport-diffusion algorithm and its application to the Navier-Stokes equations, *Numer. Math.* **38** (1982) 309–332.
- [40] J. E. Roberts and J.M. Thomas, Mixed and Hybrid Methods, in *Handbook of Numerical Analysis*, edited by P.G. Ciarlet and J.L. Lions. (North-Holland, Amsterdam, 2000) p. 523.
- [41] H. Roos, M. Stynes, and L. Tobiska, *Numerical Methods for Singularly Perturbed Differential Equations* (Springer-Verlag, Berlin, 1996).
- [42] T. F. Russell and M. A. Celia, An overview of research on Eulerian–Lagrangian localized adjoint methods (ELLAM), *Advances in Water Resources* **25** (2002) 1215–1231.
- [43] A. Samarskii, *The Theory of Difference Schemes* (Marcel Dekker, New York, 2001).
- [44] R. Verfürth, *A Review of a Posteriori Error Estimation and Adaptive Mesh-Refinement Techniques* (Teubner-Wiley, Stuttgart, 1996).
- [45] R. Verfürth, A posteriori error estimations for convection-diffusion equations, *Numer. Math.* **80** (1998) 641-663.
- [46] R. Verfürth, Robust a posteriori error estimation for singularly perturbed reaction-diffusion equations, *Numer. Math.* **78** (1998) 479-493.
- [47] R. Verfürth, A posteriori error estimates for finite element discretizations of the heat equation, *Calcolo* **40** (2003) 195-212.
- [48] R. Verfürth, Robust a posteriori error estimates for non-stationary convection-diffusion equations, Preprint (2004).
- [49] G. Voronoi, Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratures, *J. Reine Angew. Math.* **134** (1980) 198-287.
- [50] H. Wang, D. Liang, R. E. Ewing, S. L. Lyons, and G. Qin, An approximation to miscible fluid flows in porous media with point sources and sinks by an ELLAM method and mixed finite element methods, *SIAM J. Sci. Comput.* **22** (2000) 561–581.
- [51] S. Wang and S. Sun, The characteristic finite volume method for nonlinear convection-diffusion problems, *Northeast. Math. J.* **15**, No.4, (1999) 408-422.

Bibliographie

- [1] Recherches pour le stockage des déchets radioactifs. Technical report, Bilan des Etudes et Travaux, Andra, 2004.
- [2] I. Aavatsmark, T. Barkve, ø. Bøe, and TB. Mannseth. Discretization on unstructured grids for inhomogeneous, anisotropic media. part i : derivation of the methods. *SIAM J. Sci. Comput.*, pages 1700–1716, 1998.
- [3] I. Aavatsmark, T. Barkve, ø. Bøe, and TB. Mannseth. Discretization on unstructured grids for inhomogeneous, anisotropic media. part ii : discussion and numerical results,. *SIAM J. Sci. Comput.*, pages 1717–1736, 1998.
- [4] M. Afif. *Schémas Volumes Finis pour une Classe d'Equations de Types Convection-Diffusion Issue des Milieux Poreux*. PhD thesis, Université Cadi Ayyad Faculté des Sciences Semelalia, Marrakech, 2002.
- [5] M. Afif and B. Amaziane. Convergence of finite volume schemes for a degenerate convection-diffusion equation arising in flow in porous media. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 191 :5265–5286, 2002.
- [6] M. Afif and B. Amaziane. Numerical simulation of two-phase flow through heterogeneous porous media. *Numerical Algorithms*, 34 :117–125, 2003.
- [7] HW. Alt and S. Luckhaus. Quasilinear elliptic-parabolic differential equations. *Math. Z.*, 183 :311–341, 1983.
- [8] B. Amaziane, A. Bourgeat, and M. Jurak. Effective macrodiffusion in solute transport through heterogeneous porous media. *To appear*, 2005.
- [9] B. Amaziane and J. Koebbe. Jhomogenizer : a computational tool for upscaling permeability for flow in porous media. *reprint*, <http://lma.univ-pau.fr/data/pub/pub-pdf2004/0423.pdf>, 2004.

- [10] Y. Amirat, D. Bates, and A. Ziani. Convergence of a mixed finite element-finite volume scheme for a parabolic-hyperbolic system modeling a compressible miscible flow in porous media. *to appear in Numer. Math.*, 2004.
- [11] T. Arbogast. *User's Guide to Parssim1 : The Parallel Subsurface Simulator, Single Phase*. Texas Institut for Computational and Applied Mathematics the University of Texas at Austin, May 1998.
- [12] T. Arbogast and PT. Kennan. Mixed finite element methods as finite difference methods for solving elliptic equations on triangular elements. Technical report, Departement of Computational and Applied Mathematics, Rice University, 1984.
- [13] J. Baranger, JF. Maitre, and F. Oudin. Connection between finite volume and mixed finite element methods. *M2AN*, 30 :445–465, 1996.
- [14] P. Bastian, K. Birke, S. Lang, K. Johnnsen, N. Neuss, H. Rentz-Reichert, and C. Wieners. Ug : A flexible software toolbox for solving partial differential equations. *Computing Visualisation SCi*, 1 :27–40, 1997.
- [15] J. Bear. *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Dover, New-York, 1972.
- [16] J. Bear. *Hydraulic of Groundwater*. MC GrewHill Series. New-York, water resources and environmental engineering edition, 1979.
- [17] J. Bear and Y. Bachmat. *Introduction to Modeling of Transport Phenomenain Porous Media*, volume 4. Kluwer Academic Publisher, 1991.
- [18] J. Bear, AH.-D. Cheng, S. Sorek, D. Ouazar, and I. Herrera. *Seawater Intrusion in Coastal Aquifers-Concepts. Methods and Practices*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1999.
- [19] J. Bear and A. Verruijt. *Modeling Groundwater Flow and Pollution*. D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, New York, USA, elsevier edition, 1994.
- [20] A. Bendali, N. Raynaud, and JM. Thomas. New decomposition of shape functions spaces of mixed finite element methods. *Appl. Math. Lett.*, 9 :33–38, 1996.
- [21] L. Bergamaschi, S. Mantica, and G. Manzini. A mixed finite element-finite volume formulation of the black-oil model. *SIAM J. Sci. Comput.*, 20(3) :970–997.

- [22] M. Bonneau and B. Souche. *Constituants et Propriétés du Sol*. Paris, masson, 2nd edition, 1994.
- [23] A. Bourgeat, M. Jurak, and A. Piatnitski. Averaging a transport equation with small diffusion and oscillating velocity. *Math. Meth. Appl. Sci.*, 26 :95–117, 2003.
- [24] A. Bourgeat, M. Jurak, and P. Terpolilli. Changement d'échelle pour les caractéristiques physiques de gisement (pression capillaire, perméabilités relatives et absolues et porosité). Technical report, Rapport Interne ElfAquitaine, 1998.
- [25] A. Bourgeat and M. Kern. Simulation of transport around a nuclear waste disposal site : the couplex test cases. Kluwer Academic, Netherlands, 2004.
- [26] A. Bourgeat, M. Kern, S. Schumacher, and J. Talandier. The couplex test cases : Nuclear waste disposal simulation. [http ://www.andra.fr/couplex/](http://www.andra.fr/couplex/), 2002.
- [27] F. Brezzi and M. Fortin. *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*. New York, springer-verlag edition, 1991.
- [28] D. Burkle and M. Ohlberger. Adaptative finite volume methods for displacement problems in porous media. *Comput. Visual. Sci.*, 5 :95–106, 2002.
- [29] Z. Cai, J. Douglas, and M. Park. Numerical simulation of immiscible flow in porous media based on combining the method of characteristics with mixed finite element procedures. In *Numerical simulation in oil recovery*, volume 11, pages 119–131. Symp., Minneapolis/MN (USA), IMA Vol. Math. Appl., 1988.
- [30] Z. Cai, J. Mandel, and S. McCormick. The finite volume element method for diffusion en general triangulations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 28(2) :392–403, 1991.
- [31] Z. Cai and S. McCormick. On the accuracy of the finite volume element method for diffusion equations on composite grids. *SIAM J. Numer. Anal.*, 27(3) :636–656, 1990.
- [32] G. Chavent and J. Jaffré. *Mathematical Models and Finite Elements for Reservoir Simulation*. North-Holland, Amsterdam, elsevier edition, 1986.
- [33] G. Chavent, J. Jaffré, and JE. Roberts. Mixed-hybrid finite elements and cell-centred finite volumes for two-phase flow in porous media. In A. Bourgeat

- et al., editor, *Mathematical Modeling of Flow Through Porous Media*, pages 100–114, Saint-Etienne, France, May 1995.
- [34] G. Chavent and J.E. Roberts. A unified physical presentation of mixed, mixed-hybrid finite elements and standard finite difference approximations for the determination of velocities in water flow problems. *Elsevier Applied Science*, 14(6), 1991.
- [35] Z. Chen and R.E. Ewing. From single-phase to compositional flow : Applicability of mixed finite elements. *Transport in Porous Media*, 57(2) :225–242, 1999.
- [36] Z. Chen and R.E. Ewing. Mathematical analysis for reservoir models. *SIAM J. Math Anal*, 30(2) :431–453, 1999.
- [37] A.H.-D. Cheng. *Multilayered Aquifer Systems. Fundamentals and Applications*. Marcel Dekker, New York, 2000.
- [38] A.H.-D. Cheng and D. Ouazar. *Coastal Aquifer Management : Monitoring, Modeling, and Case Studies*. Lewis Publishers, New York, 2004.
- [39] E. Chénier, R. Eymard, and X. Nicolas. A finite volume scheme for the transport of radionuclides in porous media. *Computational Geosciences*, 2004.
- [40] T. Chernogorova, R. Ewing, V. Iliev, and R. Lazarov. Convergence of a finite volume scheme for a diffusion convection problem. In F. Benkhaldoun and R. Vilsmeie, editors, *Finite Volumes for Complex Applications III - Problems and Perspectives*, pages 301–308, Hermès, Paris, 2002.
- [41] S.H. Chou and Q. Li. Error estimates in l^2 , h^1 and l^∞ in covolume methods for elliptic and parabolic problems : unified approach. *Math. Comput.*, 69(229) :103–120, 2000.
- [42] Y. Coudiere. *Analyse de Schémas Volumes Finis sur Maillages non Structurés pour des Problèmes linéaires Hyperboliques et Elliptiques*. PhD thesis, Université de Paul Sabatier de Toulouse, 1999.
- [43] Y. Coudiere, T. Gallouët, and R. Herbin. Discrete sobolev inequalities and l^p error estimates for finite volume solutions of convection diffusion equations. *Preprint of LATEP, University of Marseille 1*, 1998.
- [44] Y. Coudiere, J.P. Vila, and P. Villedieu. Convergence of a finite volume scheme for a diffusion convection problem. In F. Benkhaldoun and R. Vilsmeie, editors,

Finite Volumes for Complex Applications I - Problems and Perspectives, pages 161–168, Hermès, Paris, 1996.

- [45] C. Dawson. Godunov-mixed methods for advection-diffusion equations in multidimensions. *SIAM J. Numer. Anal.*, 30 :1315–1332, 1993.
- [46] C. Dawson. Analysis of upwind-mixed finite element method for nonlinear contaminant transport equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 35(5) :1709–1724, 1998.
- [47] C. Dawson and V. Aizinger. Upwind-mixed methods for transport equations. *Comput. Geosci.*, 3 :93–110, 1999.
- [48] C. Dawson, TF. Russell, and MF. Wheeler. Some improved error estimates for the modified of characteristics. *SIAM J. Numer. Anal.*, 26(6) :1487–1512, 1989.
- [49] J.W. Delleur. *The Handbook of Groundwater Engineering*. CRC Press, London–New York, 1998.
- [50] JH. Destribats, E. Prez, and B. Soyez. La dépollution des sols en place-techniques et exemples. In *Etudes et recherches des LCPC. Série Environnement-Génie Urbain*, number EG10, page 120, 1994.
- [51] V. Dolejsi, M. Feistauer, and C. Schwab. A finite volume discontinuous galerkin scheme for nonlinear convection-diffusion problems. *CALCOLO*, 39 :1–40, 2002.
- [52] J. Douglas, BL. Darlow, MF. Wheeler, and RP. Kendall. Self-adaptive finite element and finite difference methods for one-dimensional two-phase immiscible flow. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 47 :119–130, 1984.
- [53] J. Douglas, RE. Ewing, and MF. Wheeler. The approximation of the pressure by a mixed method in the simulation of miscible displacement. *R.A.I.R.O. Numer. Anal.*, 17 :17–33, 1983.
- [54] J. Douglas, RE. Ewing, and MF. Wheeler. A time-discretization procedure for a mixed finite element approximation of miscible displacement in porous media. *RAIRO Anal. Numér.*, 17 :249–265, 1983.
- [55] J. Douglas and JE. Roberts. Global estimates for mixed methods for second order elliptic equations. *Math. Comp.*, 44 :39–52, 1985.

- [56] F. Dubois. Finite volumes and mixed petrov-galerkin finite element : the unidimensional problem. *Inc. Numer. Meth. Partial Differential Eq.*, 16 :335–360, 2000.
- [57] L.J. Durlofsk. A triangle based mixed mixed finite element-finite volume technique for modelling two phase flow trough porous media. *Journal of Computational Physics*, 105 :252–266, 1993.
- [58] RE. Ewing. The mathematics of reservoir simulation. *SIAM, Philadelphia*, 1983.
- [59] R. Eymard and T. Gallouët. Convergence d’un schéma de type éléments finis-volumes finis pour un système formé d’une équation elliptique et d’une équation hyperbolique. *Mod. Num. Anal.*, 27 :843–861, 1993.
- [60] R. Eymard, T. Gallouët, M. Ghilani, and R. Herbin. Error estimates for the approximate solutions of a nonlinear hyperbolic equation given by finite volume schemes. *IMA, J. Num., Anal.*, 18 :563–594, 1998.
- [61] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. *The Finite Volume Method*, volume 7. Handbook of numerical analysis edition, 2000.
- [62] R. Eymard, T. Gallouët, R. Herbin, and A. Michel. Convergence of a finite volume scheme for nonlinear degenerate parabolic equations. *Math. Mod. Num. Anal.*, 92 :41–82, 2002.
- [63] R. Eymard, T. Gallouët, D. Hilhorst, and Y. Nait Sliman. Finite volumes and nonlinear diffusion equations. *Math. Mod. Num. Anal.*, 32 :747–761, 1998.
- [64] R. Eymard, D. Hilhorst, and M. Vohralik. A combined finite volume-nonconforming/mixed-hybrid finite element scheme for degenerate parabolic problems. *Preprint*, 2004.
- [65] P. Fabrie and T. Gallouët. Modelling wells in porous media flows. *Math. Mod. and Meth. in Appl. Sci.*, 10(5) :673–709, 2000.
- [66] P. Fabrie and M. Langlais. Mathematical analysis of miscible displacement in porous medium. *SIAM J. Math. Anal.*, 23(6) :1375–1392, 1992.
- [67] I. Faille. A control volume method to solve an elliptic equation on a two-dimensional irregular mesh. *Comp Meth in Appl Mech and Engi.*, 100 :275–290, 1992.

- [68] M. Feistauer. Discontinuous galerkin method : compromise between fv and fe schemes. In F. Benkhaldoun and R. Vilsmeie, editors, *Finite Volumes for Complex Applications III - Problems and Perspectives*, pages 81–95, Hermès, Paris, 2002.
- [69] M. Feistauer, J. Felcman, and I. Straskraba. *Mathematical and Computational Methods for Compressible Flow*. Oxford sciences publications edition, 2003.
- [70] X. Feng. On existence and uniqueness for a coupled system modeling miscible displacement in porous media. *J. math. Anal. Appl.*, 194 :441–469, 1995.
- [71] PA. Forsyth and PH. Sammon. Quadratic convergence for cell-centred grids. *Applied and Numerical Mathematics*, 4 :377–394, 1988.
- [72] G. Gagneux and M. Madaune-Tort. *Analyse Mathématique de Modèles non Linéaires de l'Ingénierie Pétrolière*. Springer-Verlag, Paris, 1995.
- [73] E. Godlewski. *Hyperbolic systems of conservation laws*. SMAI Num 3/4 90-91 ISSN : 1154-483 x.
- [74] S. K. Godunov. *Résolution Numérique des Problèmes Multidimensionnels de la Dynamique des Gaz*. Moscou, mir edition, 1976.
- [75] C. Hebrard-Labit. *Influence du compartiment bactérien sur le transfert du zinc en milieu poreux non saturé- Expériences et modélisation*. PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, Lyon, 1998.
- [76] R. Helmig. *Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface*. Springer-Verlag, Berlin, 1997.
- [77] R. Herbin and D. Kröner. Finite volume for complex applications iii. Hermes Penton Science, London, 2002.
- [78] T. Hontans. *Homogénéisation numérique de paramètres pétro-physique pour des maillages déstructurés en simulation de réservoir*. PhD thesis, Université de Pau et Pays de L'Adour.
- [79] U. Hornung. *Homogenization and Porous Media*. Interdisciplinary Applied Mathematics, New York, springer-verlag edition, 1997.
- [80] H. Hoteit. *Simulation d'Écoulements et de Transports de Polluants en Milieux Poreux : Application à la Modélisation de la Sûreté des Dépôts de Déchets Radioactifs*. PhD thesis, Université de Rennes 1, Rennes, 2002.

- [81] H. Hoteit, J. Erhel, R. Mosé, B. Philipe, and Ph. Ackerer. Numerical reliability and time requirements for the mixed methods applied to flow problems in porous media. In *Sixth SIAM Conference on Mathematical and Computational Issues in the Geosciences*, Boulder, USA.
- [82] B. Koren and CB. Vreugdenhil. *Numerical Methods for Adevection-Diffusion Problems*, volume 45. Notes numerical fluid mechanics edition, 2000.
- [83] RD. Lazarov, ID. Mishev, and PS. Vassilevski. Finite volume methods for convection-diffusion problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 33(1) :31–55, 1996.
- [84] RD. Lazarov, JE. Pasciak, and PS. Vassilevski. Coupling mixed and finite volume discretizations of convection-diffusion-reaction equations on non-matching grids. In R. Vilsmeier, F. Benkhaldoun, and D. Hanel, editors, *FVCA II*, pages 51–68,, Paris, 1995. Hermes Science Publications.
- [85] C. LePotier and A. Beccantini. Finite volume scheme for a parabolic equation on an unstructured mesh. In F. Benkhaldoun and R. Vilsmeie, editors, *Finite Volumes for Complex Applications III - Problems and Perspectives*, pages 381–389, Hermès, Paris, 2002.
- [86] CM. Marle. *Multiphase Flow in Porous Media*. Paris, editions technip edition, 1981.
- [87] G. De Marsily. *Hydrologie Quatitative*. Paris, masson edition, 1981.
- [88] U. Meissner. A mixed finite element model for use in potential flow problems. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 6 :467–473, 1973.
- [89] A. Mikelić. Mathematical theory of stationary miscible filtration. *J. Diff. Equations*, 90 :186–202, 1991.
- [90] D. Mishev. Finite volume methods on voronoi meshes. *Inc. Numer. Meth. P.D.E.*, 14 :193–21, 1998.
- [91] KW. Morton. *Numerical Solution of Convection-Diffusion Problems*. New York, 1996.
- [92] J. Nedelec. A new family for mixed finite element in \mathbb{R}^3 . *Numer. Math.*, 35 :315–341, 1980.
- [93] J. Nedelec. Mixed finite element in \mathbb{R}^3 . *Numer. Math.*, 50 :57–82, 1986.

- [94] M. Ohlberger. Convergence of a mixed finite element-finite volume methods for two phase flow in porous media. *East-West J. Numer. Math.*, 5(3) :183–210, 1997.
- [95] M. Ohlberger. Mixed finite element - finite volume methods for two phase flow in porous media. In O.P Iliev, M.S. Kaschiev, and et al., editors, *Proceedings of the 4th International Conference on NUMERICAL METHODS and APPLICATIONS, Sofia (1998)*, pages 461–469. World Scientific Publishing Co.Pte. Ltd., Signapore, New Jersey, London, Hong Kong, 1999.
- [96] M. Ohlberger. A posteriori error estimates for vertex centred finite volume approximations of convection-diffusion-reaction equation. *Math. Mod. and Num. Anal., M2AN*, 35 :355–387, 2001.
- [97] M. Ohlberger. A posteriori error for vertex centered finite volume approximations of convection-diffusion-reaction equations. *ESAIM : M2AN*, 35(2) :355–387, 2001.
- [98] M. Ohlberger and C. Rohde. Adaptive finite volume approximations for weakly coupled convection dominated parabolic systems. *Institut für Angewandte Mathematik Universität Freiburg, Hermann-Herder-Str. 10, D-79104 Freiburg, Germany*, 2001.
- [99] M. Putti, WW-G. Yeh, and WA. Mulder. A triangular finite volume approach with high-resolution upwind terms for the solution of groundwater transport equation. *Water Resources Research*, 26 :2865–2880, 1990.
- [100] PA. Raviart and JM. Thomas. A mixed finite element method for 2-nd order elliptic problems. In *Mathematical Aspects of Finite Element Method, Lecture Notes in Mathematics*, volume 606, pages 292–315, New York, 1977.
- [101] JE. Roberts and JM. Thomas. *Mixed and Hybrid Methods*, volume 2. in Handbook of Numerical Analysis, North Holland, Amsterdam, 2000.
- [102] H. Rui and M. Tabata. A second order characteristic finite element scheme for convection-diffusion problems. *Numer. Math.*, 92 :161–177, 2002.
- [103] T. Russel and M. Wheeler. Finite element and finite difference methods for continuous flows in porous media. *SIAM, R. Ewing, The Mathematics of Reservoir Simulation*, pages 35–106, 1983.

- [104] PH. Sammon. Numerical approximation for a miscible displacement in porous media. *SIAM J. Numer. Anal.*, 23 :505–542, 1986.
- [105] M. Sardella. On a coupled element-finite volume method for convection-diffusion problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 20 :281–301, 2000.
- [106] S. Sun. *Discontinuous Galerkin Methods for Reactive transport in porous media*. PhD thesis, Dissertation, University of Texas at Austin, 2003.
- [107] JM. Thomas. *Sur l'Analyse Numérique des Méthodes d'Eléments Finis Hybrides et Mixtes*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, France, 1977.
- [108] D. Trujillo. Mixed primal-dual method for nuclear waste disposal far field simulation. *Computational Geosciences*, 2004.
- [109] S. Verdière and MH. Vignal. Numerical and theoretical study of a dual mesh method using finite volume schemes for two phase flow problems in porous media. *Numer. Math.*, 80 :601–639, 1998.
- [110] A. Weiser and MF. Wheeler. On convergence of block-centred finite differences for elliptic problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 25 :351–375, 1988.
- [111] A. Younes, R. Mose, Ph. Ackerer, and G. Chavent. A new formulation of the mixed finite element method for solving elliptic and parabolic pde with triangularelements. *Journal of Comp. Phys.*, 149 :148–167, 1999.
- [112] C. Zhangxin. Characteristic mixed discontinuous finite element methods for advection-dominated diffusion problems. *Comp. Meth. App. Mech. Eng.*, 191 :Issue 23–24, 2002.

Résumé

Dans cette thèse, nous nous intéressons à des méthodes numériques pour un modèle d'écoulements incompressibles et miscibles ayant des applications dans l'hydrogéologie et l'ingénierie pétrolière. Nous étudions et analysons un schéma numérique combinant une méthode d'éléments finis mixtes (EFM) et une méthode des volumes finis (VF) pour approcher le système couplé entre une équation elliptique (pression-vitesse) et une équation de convection-diffusion-réaction (concentration). Le schéma VF considéré est de type "vertex centred" semi-implicite en temps : explicite pour la convection et implicite pour la diffusion. On utilise un schéma de Godunov pour approcher le terme convectif et une approximation élément fini P_1 pour le terme de diffusion. Nous montrons des résultats de stabilité L^∞ , des estimations BV et le principe du maximum discret sous une condition CFL appropriée. Ensuite, nous montrons la convergence de la solution approchée obtenue par le schéma combiné EFM-VF vers la solution du problème couplé. La démonstration de la convergence se fait en plusieurs étapes : premièrement, on déduit la convergence forte de la solution approchée de la concentration dans $L^2(Q)$, en utilisant la stabilité L^∞ , les estimations BV et des arguments de compacité. Dans l'étape suivante, on étudie le schéma découplé EFM, en donnant des résultats de convergence pour la pression et la vitesse. Enfin, le processus de convergence de la solution approchée du schéma combiné EFM-VF vers la solution exacte est obtenu par passage à la limite et par unicité de solution pour le problème continu. Des simulations numériques académiques et réalistes pour des problèmes bidimensionnels confirment la stabilité et l'efficacité du schéma combiné. Enfin, nous étudions des estimateurs d'erreur *a posteriori* de type résiduel pour une équation de convection-diffusion-réaction discrétisée par un schéma VF "vertex centred" semi-implicite en temps. Nous introduisons deux sortes d'indicateurs. Le premier est local en temps et en espace et constitue un outil efficace pour l'adaptation du maillage à chaque pas de temps. Le second est global en espace mais local en temps et peut être utilisé pour l'adaptation en temps. Nous montrons que l'estimateur est une borne supérieure de l'erreur. Des résultats numériques d'adaptations de maillage sont présentés et montrent l'efficacité de la méthode.

La partie logiciels de ce travail porte sur deux volets. Le premier a permis de réaliser un code de calcul 2D, MFlow, écrit en C++, pour la résolution du système des écoulements miscibles considérés dans cette thèse. Le second volet concerne la collaboration avec un groupe de chercheurs pour l'élaboration de la plate-forme Homogenizer++ réalisée dans le cadre du GDR MoMaS (<http://mommas.univ-lyon1.fr/>).

Abstract

In this thesis, we are interested in numerical methods for a model of incompressible and miscible flows having application in hydrogeology and oil engineering. We study and analyze a numerical scheme combining a mixed finite element method (MFE) and a finite volumes method (FV) to discretize the coupled system between an elliptic equation (pressure-velocity) and a convection-diffusion-reaction equation (concentration). The FV scheme considered is "vertex centred" type semi-implicit in time : explicit for the convection and implicit for the diffusion. We use a Godunov scheme to approach the convective term and a P_1 finite element approximation for the diffusion term. We prove that the FV scheme is L^∞ and BV stable and satisfies the discrete maximum principle under a suitable CFL condition. Then, we show the convergence of the approximate solution obtained by the combined scheme MFE-FV towards the solution of the coupled problem. The proof of convergence is done in several steps : first we deduce strong convergence of the approximate solution in $L^2(Q)$, using L^∞ stability, BV estimates and a compactness argument. In the second step we study the decoupled MFE scheme, by giving a convergence result for the pressure and velocity. In the final step, the process of convergence of the approximate solution of the combined scheme MFE-FV towards the exact solution is obtained by passing in the limit and uniqueness of the solution of the continuous problem. Academic and realistic numeric simulations for two-dimensional problems confirm the stability and the effectiveness of the combined scheme. Finally, we analyze a residual error estimator for a convection-diffusion-reaction equation discretized by a semi-implicit finite volume. We introduce two kinds of indicators. The first is local in time and space and constitutes an effective tool for the adaptation of the grid to each time step. The second is total in space but local in time and can be used for the adaptation in time. The error estimators with respect to both time and space yield global upper and local lower bounds on the error measured in the energy norm. Numerical results of adaptations of grid are presented and show the effectiveness of the method.

The software part of this work concerns two shutters. The first allowed to carry out an IMPES simulator, MFlow, written in C++, for the simulation of the system of miscible flows considered in this thesis. The second shutter relates to the collaboration with a group of researchers for the development of the Homogenizer++ platform realized within the framework of the GDR MoMaS (<http://mommas.univ-lyon1.fr/>).