HAL open science

Quelques méthodes numériques robustes pour l'écoulement et le transport en milieu poreux

Amel Sboui

▶ To cite this version:

Amel Sboui. Quelques méthodes numériques robustes pour l'écoulement et le transport en milieu poreux. Mathématiques [math]. Université Paris Dauphine - Paris IX, 2007. Français. NNT : . tel-00284856

HAL Id: tel-00284856

https://theses.hal.science/tel-00284856v1

Submitted on 3 Jun 2008

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.

UNIVERSITE PARIS DAUPHINE

EDDIMO

CEREMADE

N° attribué par la bibliothèque

Quelques méthodes numériques robustes pour l'écoulement et le transport en milieu poreux

THÈSE

pour obtenir le titre de

DOCTEUR EN MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES

(Arrêté du 07 Août 2006)

Présentée et soutenue publiquement par

Amel SBOUI

JURY

Directeur de thèse :	**M. Jérôme JAFFRE** Directeur de recherche à l'Inria Rocquencourt
Rapporteurs :	**M. Brahim AMAZIANE** Maître de Conférences à l'université de Pau et des Pays de l'Adour **M. Olivier PIRONNEAU** Professeur à l'université Pierre et Marie Curie
Suffragants :	**M. Guy CHAVENT** Professeur à l'université Paris Dauphine **M. Laurent LOTH** Chef de service calcul scientifique à l'Andra **M. Alain BOURGEAT** Professeur à l'université Lyon 1

31 janvier 2007

Résumé :

L'objectif de cette thèse est de modéliser et de développer des outils numériques adaptés à l'étude de l'écoulement des eaux souterraines ainsi que la propagation des polluants en milieux poreux. La motivation de ce travail est un benchmark du GDR Momas et de l'Andra pour la simulation de la propagations 3-D des radionucléides autour d'un stockage profond de déchets nucléaires. Premièrement on a construit une nouvelle méthode d'éléments finis mixtes sur un maillage formé d'hexaèdres généraux. La convergence de la méthode est prouvée et confirmée par des tests numériques. Deuxièment, nous présentons une méthode de discrétisation en temps pour une équation d'advection telle que des pas de temps différents sont utilisés dans différents sous-domaines afin de prendre en compte les hétérogèneités. Enfin une méthode numérique pour le calcul de transport de contaminants est proposée. Les techniques précédentes sont implémentées en 3-D et des résultats numériques sont présentés sur le benchmark 3-D champ lointain du GDR Momas et de l'Andra.

Mots clés :

Ecoulement en milieu poreux, équation de transport, volumes finis, éléments finis mixtes, maillage hexaèdrique, schéma amont, discrétisation en temps par sous-domaine, séparation d'opérateurs.

Abstract :

The aim of this thesis is to model and develop numerical tools adapted to study underground water flow and the propagation of pollutants in a porous medium. The main motivation of this work is a benchmark from GDR Momas and Andra to simulate the 3-D propagation of radionuclides around a deep disposal of nuclear waste. Firstly, we construct a new mixed finite elements method suitable for general hexahedral meshes. Convergence of the method is proved and shown in numerical experiments. Secondly, we present a method of time dicretisation for the advection equation which allows for the use of different time steps in different subdomains in order to take into account of strong heterogeneities. Finally a numerical method for the calculation of the transport of contaminants is proposed. The techniques above were implemented in a 3-D code and simulation results are shown on the 3-D far field benchmark from GDR Momas and Andra.

Key words :

Flow in porous media, transport equation, finite volumes mixed finite elements, hexahedral mesh, upstream scheme, subdomain time stepping, operator splitting.

Remerciements

Cette thèse a été préparée au sein du projet Estime de l'Inria Rocquencourt et je remercie Jérôme Jaffré pour m'avoir accueilli dans son équipe, m'offrant d'excellents conditions de travail, et pour avoir dirigé ma thèse.
Cette thèse a aussi bénéficié d'un financement partiel du GDR Momas du CNRS à qui j'adresse mes remerciements.

Je souhaite maintenant remercier Brahim Amaziane et Olivier Pironneau qui m'ont fait l'honneur d'accepter d'être les rapporteurs de ma thèse, ainsi que les autres membres du jury, M. Guy Chavent, M. Laurent Loth et M. Alain Bourgeat.

J'exprime également toute ma gratitude à Jean Roberts qui a aussi joué un grand rôle dans la direction de cette thèse.

Je dois remercier l'Andra, en particulier Laurent Loth et Bernard Vialay, pour les données physiques qu'ils nous ont fournies.

Un grand merci à Loic Marechal du projet Gamma pour m'avoir initié aux secrets des maillages hexaédriques.

J'exprime aussi ma reconnaissance à François Clément, Michel Kern et particulièrement à Estelle Marchand pour m'avoir aidé à mener à bien ce travail.

Plus généralement merci à tous les membres des projets Estime et Poems ainsi qu'à Masoud Najafi et Alan Layec du projet Metalau pour leur soutien et leur gentillesse.

Je ne manque pas de remercier grandement ma famille en France et en Tunisie qui m'a soutenu et encouragé tout au long de cette aventure.

Pour finir, je remercie les amis qui m'ont soutenu continuellement.

Pour Nébil.

Table des matières

1 Introduction **3**
1.1 Contexte général . . . 3
1.2 Contexte scientifique . . . 3
1.3 Eléments finis mixtes et mixtes hybrides . . . 5
1.4 Rappel . . . 6
1.4.1 Le milieu poreux . . . 7
1.5 Formulation mathématique . . . 8
1.5.1 Equations de l'écoulement . . . 8
1.5.2 Le transport d'un radionucléide en milieux poreux . . . 9
1.6 Plan du mémoire . . . 12

2 Un benchmark 3D réaliste **13**
2.1 Géométrie du domaine de calcul . . . 13
2.2 Maillages et décomposition . . . 17
2.3 Equations . . . 22
2.4 Données physiques pour le problème de l'écoulement . . . 22
2.5 Données physiques pour le problème de transport . . . 23
2.6 Conditions aux limites . . . 24
2.7 le code LifeV . . . 25
2.7.1 Implémentation des nouveaux éléments finis mixtes . . . 25

3 Une nouvelle méthode d'éléments finis mixtes pour des maillages hexaèdriques généraux **27**
3.1 Introduction . . . 28
3.2 Numerical analysis for mixed methods . . . 32
3.3 The approximation spaces . . . 33
3.3.1 A composite element . . . 34
3.3.2 Local approximation spaces . . . 35
3.4 Interpolation error . . . 37
3.4.1 Local interpolation operators and error estimates . . . 39
3.4.2 Global interpolation error estimates . . . 45
3.5 Numerical experiment . . . 47
3.6 Conclusion . . . 51

4 Raffinement en temps par sous-domaine pour un problème d'advection en milieu poreux **53**
4.1 Introduction 53
4.2 Discrétisation avec utilisation d'un pas de temps unique 55
4.3 Utilisation de raffinement en temps par sous-domaines 57
4.3.1 Motivation 57
4.4 Les résultats numériques 60
4.4.1 Validation de la méthode en milieu homogène 61
4.4.2 Validation de la méthode en milieu hétérogène 62
4.5 Décomposition de domaines pour l'advection implicite 66
4.6 Conclusion 70

5 Discrétisation de l'équation de transport **71**
5.1 Motivation 71
5.2 L'équation du transport d'un radionucléide 72
5.3 Formulation discrète 73
5.4 Séparation d'opérateurs 77
5.5 Résultats numériques 80

6 Conclusions et Perspectives **96**

A The Piola transformation **98**

B Notes on the program for difformed hexahedrons **102**
B.1 Geometry 102
B.2 Basis functions 104
B.3 Error calculation 107

Chapitre 1

Introduction

Ce travail est consacré aux simulations de l'écoulement souterrain et du transfert de contaminants en milieu poreux saturé. L'objectif de cette thèse est de modéliser et de développer des outils numériques adaptés à l'étude de l'écoulement des eaux souterraines ainsi qu'à la prévision de la propagation des polluants.

1.1 Contexte général

La protection de l'environnement et la préservation de la nature devenant des enjeux majeurs dans nos sociétés contemporaines. La modélisation des écoulements et du transport en milieu poreux est donc un thème d'actualité, car elle concerne la partie souterraine du cycle de l'eau. Considérons, par exemple, le problème de la modélisation du transport des déchets autour d'un site de stockage souterrain ou en surface, à plus ou moins longue échéance, le stockage commencera à fuir, ces déchets seront dissous dans l'eau puis transportés par celle-ci. La question est alors de savoir dans quels délais, à quel rythme ces évènements se produiront, à quelle vitesse les déchets se déplaceront et où ils aboutiront. La compréhension des écoulements de l'eau et du transport en milieu poreux – ce milieu poreux étant la subsurface dans notre cas – est donc à la base des problèmes de stockage de déchets.

C'est ce problème qui justifie notre étude. Le stockage profond des déchets nucléaires à vie longue en est l'application particulière qui a motivé ce travail. Les recherches concernant ce problème sont menées par l'Andra (/http ://ww.andra.fr) et bénéficient du soutien programme Pace (http ://www.cnrs.fr/DEP/prg/pace.html) du CNRS. Ce programme rassemble plusieurs GDR dont le GDR Momas (http ://www.gdrmomas.org/) consacré à la modélisation mathématique et numérique.

1.2 Contexte scientifique

La modélisation numérique joue un rôle important dans les domaines de l'écoulement et du transport dans le sous-sol car les expérimentations y sont difficiles à réaliser, ce qui

induit des coûts conséquents, et sont limitées à quelques points (forages ou laboratoires).

Par exemple, les échelles d'étude pour le transport de contaminants sont typiquement de l'ordre de la dizaine de kilomètres voire de la centaine de kilomètres sur des dizaines ou des centaines de milliers d'années. Dans ces conditions, de nombreux problèmes de modélisation d'ordre purement numérique apparaissent.

Les difficultés spécifiques de cette modélisation numérique proviennent en premier lieu des hétérogénéités du domaine de calcul. Ces hétérogénéités existent à plusieurs échelles en espace. A l'échelle la plus grande, elles sont causées par les changements de couches géologiques. Cela correspond à des changements dans les propriétés hydrogéologiques des roches qui composent ces couches, provoquant, par exemple, des variations de perméabilités ou de coefficients de diffusion-dispersion de plusieurs ordres de grandeur. Ces hétérogénéités se traduisent par des discontinuités dans les coefficients des équations au passage d'une couche géologique à l'autre. Cependant, certaines quantités physiques restent continues : les débits en eau, la pression et les flux de contaminants.
Nous utilisons les éléments finis mixtes comme outils de base de l'approximation en espace pour bien traiter ces discontinuités dans les coefficients de perméabilités ou de diffusion-dispersion. En outre, ces changements d'une couche à l'autre se traduisent par des échelles de temps différentes. C'est pourquoi nous avons introduit des méthodes de discrétisation en temps permettant des pas de temps qui diffèrent d'un sous-domaine géologique à l'autre.

Comme nous travaillons sur un maillage formé d'hexaèdres déformés, le problème qui se pose concerne l'utilisation de la méthode des éléments finis mixtes standard. En effet l'approche classique ne conserve pas les propriétés de convergence de la méthode. Dans le chapitre 3 nous présentons une nouvelle méthode d'éléments finis mixtes pour les maillages d'hexaèdres déformés. Cette méthode est inspirée par les articles [38, 39] et permet de résoudre ces difficultés.

Une troisième difficulté est la durée de la simulation qui est en général longue car les écoulements souterrains sont lents (en comparaison avec ce qui se passe en surface ou dans l'air). Dans le cas des déchets nucléaires cette durée de simulation est particulièrement longue, un million d'années, car on considère des déchets à vie longue. La durée de la simulation est choisie de sorte qu'au bout de ce temps les déchets ont perdu l'essentiel de leur activité radioactive.

Enfin, particulièrement importante dans le cas des déchets nucléaires, la gestion des incertitudes et les études de sûreté, qu'elles soient faites par des méthodes stochastiques ou déterministes, nécessitent un très grand nombre de simulations numériques. La question du temps de calcul reste donc au centre des préoccupations du numéricien.

Notons que les questions soulevées ici se retrouvent en ingénierie pétrolière, que ce soit dans la simulation de la genèse des bassins sédimentaires ou dans la simulation de réservoirs pétroliers.

1.3 Eléments finis mixtes et mixtes hybrides

L'idée de base des méthodes mixtes est d'approcher simultanément la fonction d'état et son gradient. Elles ont été présentées pour la première fois par Meissner[48]. La réalisation mathématique et numérique des éléments finis mixtes (EFM) a été rendue possible grâce au travail pionnier de Raviart & Thomas [57] et Thomas [66]. Pour plus de détails sur l'analyse et la construction d'éléments finis mixtes, on pourra se référer aux travaux de Brezzi, Fortin, Marini, Douglas, Roberts [11], [10], [20], [52],[53].

En général la méthode des éléments finis mixtes est employée pour résoudre des équations aux dérivées partielles elliptiques. Avec la méthode des EFM associée à un espace de Raviart-Thomas de plus bas degré, notés $\mathbf{RTN}_0$, nous aboutissons à un système linéaire dont les inconnues sont les charges moyennes par maille et les flux a travers les interelements. Cette approche présente une difficulté numérique : Le système matriciel issu de la méthode des EFM, est symétrique mais non-défini (voir e.g. [11]).

Afin de remédier à cet inconvénient, une nouvelle formulation à été proposée, appelée méthode des Eléments Finis Mixtes Hybrides EFMH. Elle permet de transformer, après quelques manipulations algébriques, le système matriciel issu de la méthode des éléments finis mixtes en un système symétrique défini positif dont les inconnues sont des multiplicateurs de Lagrange. Ils sont introduits pour réaliser l'hybridation et s'interprètent comme des traces de la fonction d'état sur les faces des éléments.

Une littérature abondante existe à ce sujet : l'hybridation a été originellement introduite dans [16], puis a été analysée en détail dans [5] et utilisée dans [12]. Sur les éléments finis mixtes de Raviart et Thomas, citons [57] ; pour les éléments 3D, il convient d'ajouter le nom de Nédélec aux deux précédents [52]. Nous citons également les deux ouvrages [58] et [11], qui permettent d'avoir une vision globale de la question. Mentionnons enfin l'article [13] qui offre une très bonne approche physique et pédagogique des éléments finis mixtes et mixtes hybrides.

Les travaux exposés dans [32, 31] portent sur la fiabilité numérique des EFM appliqués aux problèmes d'écoulement. Bien que les formulations des EFMH et EFM soient algébriquement équivalentes, la méthode des EFM est numériquement plus précise que celle des EFMH dans l'approximation des flux avec la présence de mailles aplaties ou de contrastes extrêmes de conductivité hydraulique. En milieu hétérogène, le conditionnement de la méthode des EFMH dépend linéairement du rapport des valeurs extrêmes de la perméabilité associées aux sous-domaines adjacents du milieu, ce qui mène parfois à des valeurs inconsistantes dans le champ de vitesse. Dans ces travaux on peut observer l'importance qu'il y a à utiliser une décomposition LDL^t, et non pas la méthode de Cramer, des matrices élémentaires utilisées dans l'élimination des vitesses et des pressions de maille. Nous avons implémenté cette méthode dans nos programmes. Les méthodes EFM et EFMH ne respectent pas le principe du maximum [11] ce qui induit des résultats de calcul présentant des oscillations non physiques. La technique la plus simple pour diminuer ces oscillations est le raffinement global ou local du maillage. Hoteit et Al ont proposé la technique de la condensation de masse pour éliminer les oscillations non physiques de la solution obtenue par la méthode des EFMH [24].

Un autre problème qui se pose concerne l'utilisation de la méthode mixte standard sur les maillages d'hexaèdres déformés. L'approche classique, ne permet pas d'assurer les propriétés de convergence de la méthode. En effet le travail de Naff, Russell et Wilson [49], [51] ou [50] montre que la convergence de la méthode des éléments finis mixtes n'est pas assurée sur des hexaèdres convexes ayant des déformations en 3 dimensions : *les vitesses constantes ne vivent pas toujours dans l'espace d'approximation.* Ceci est lié aux propriétés de la transformation de Piola, (voir Annexe A), qui est utilisée habituellement dans les méthodes mixtes pour transformer une fonction vectorielle du cube unité sur un hexaèdre quelconque ; or, cette transformation transforme obligatoirement une fonction vectorielle vivant dans $\mathbf{RTN}_0$ sur le cube de référence, en une fonction dont les flux ont une dépendance *linéaire* sur chaque face de l'hexaèdre d'arrivée[1]. Le problème est que les flux d'une fonction constante dans certains hexaèdres déformés peuvent avoir un comportement *quadratique* [49]. L'un des deux exemples fournis dans les références citées est celui de la pyramide régulière à base carrée dont le sommet a été tronqué. Dans un tel élément, les fonctions de $\mathbf{RTN}_0$ transformées par Piola ne peuvent représenter un flux uniforme de façon exacte.

Une autre solution à ce problème préconisée dans [51] est de se placer dans le cadre des méthode CVMFE —*Control-Volume Mixed Finite Element*— et de prendre des fonctions pour la vitesse de forme *quadratiques* et non plus linéaires. Ceci permet d'améliorer notablement la précision dans la plupart des cas.

Une solution est proposée par Shen [34]. Celui-ci introduit un nouvel espace d'approximation de la vitesse, ajoute une fonction bulle à l'espace $\mathbf{RTN}_0$ sans augmenter le nombre de degrés de liberté. Cependant, on ignore comment étendre cette méthode en trois dimensions. Une autre solution proposée par Arnold-Boffi-Falk [18, 19], consiste à ajouter deux degrés de liberté à l'espace d'approximation de la vitesse, qui sont les moments d'ordre un dans les directions x et y. Néanmoins, étendre cette méthode en trois dimensions est très compliqué puisque elle demande un grand nombre de degrés de liberté, [40].

Pour ce travail, nous avons programmé en C++ en trois dimensions la méthode des éléments finis mixtes pour des éléments de Raviart–Thomas–Nédélec d'ordre le plus bas, et pour une nouvelle méthode d'éléments finis mixtes inspirée par les articles [38, 39] sur le problème de transport et le problème d'écoulement dans un maillage général constitué d'hexaèdres déformés. L'analyse et les expériences numériques montrent que cette dernière méthode converge, ce qui n'est pas le cas de la méthode $\mathbf{RTN}_0$

1.4 Rappel

- Les isotopes sont des formes d'un même élément chimique dont les noyaux possèdent un nombre de protons identique et un nombre de neutrons différent.
- Un radionucléide est un isotope radioactif, appelé aussi parfois radio-isotope, d'un élément.

[1] Plus exactement, la composante k du flux dépend linéairement de la variable x_k, $k = 1, 2, 3$.

- La désintégration est la transformation d'un noyau instable en un noyau stable ou instable au cours de laquelle le nombre et la nature des nucléons (neutron ou proton, particules constitutives du noyau atomique) sont modifiés.
- La radioactivité est la propriété que possèdent certains éléments chimiques de se transformer spontanément en un autre élément par désintégration d'une partie de leur noyau atomique. Pendant la désintégration, une quantité importante de chaleur est dégagée, différents types de rayonnement peuvent être émis en fonction de l'élément d'origine. La radioactivité α se caractérise par l'émission d'un noyau d'hélium, la radioactivité β par l'émission d'un électron (et d'un antineutrino), la radioactivité γ par l'émission d'un photon. L'ordre de grandeur des énergies de ces particules est le MeV $(1,610e-13$ J).
  La loi de décroissance radioactive s'écrit, pour un isotope isolé :
  $$\frac{dN}{dt} = -\lambda N$$
  où N(t) est le nombre de noyaux présent à l'instant t et λ la constante de décroissance radioactive. Cette équation différentielle donne :
  $$N(t) = N_0 \exp(-\lambda t)$$
  où N_0 est le nombre de noyaux radioactifs à l'instant t = 0.
  Cette fonction décroissante atteint une valeur égale à la moitié de la quantité initiale N_0 au bout d'une certaine durée notée $T_{\frac{1}{2}}$. En simplifiant, on obtient alors :
  $$T_{\frac{1}{2}} = Ln2/\lambda$$
  Cette durée $T_{\frac{1}{2}}$ est appelé la demi-vie ou période radioactive (temps au bout duquel la moitié des noyaux se sont désintégrés).

1.4.1 Le milieu poreux

Une roche poreuse est un matériau composé d'une partie solide et d'une partie vide qui constitue les pores. Ces pores peuvent avoir différentes formes, occuper plus ou moins d'espace, et être plus ou moins connectés. C'est dans ces pores que va circuler l'eau et donc les radionucléides.

Par la suite, la roche poreuse est observée à une échelle telle que les pores sont très petits et qu'elle peut être assimilée à un milieu continu. On appelle milieu poreux l'ensemble : solide + pores, il est essentiellement caractérisé par deux quantités physiques :

- La porosité, notée ω, est définie comme le rapport entre le volume des pores d'un échantillon de matériau et le volume total de l'échantillon. $0 \leq \omega \leq 1$
- La perméabilité, notée K, mesure la résistance de l'écoulement d'un fluide à l'intérieur de pores du milieu poreux.

Le milieu poreux est dit homogène lorsque ω et K sont constantes ; dans le cas contraire il est dit hétérogène. Le milieu poreux est dit saturé si un fluide sature complètement le matériau et occupe tous les volumes des pores. Dans cette étude, le milieu poreux considéré est hétérogène et saturé en eau. C'est dans ce cadre que les équations ci-dessous sont valides.

1.5 Formulation mathématique

1.5.1 Equations de l'écoulement

En ce qui concerne l'hydrogéologie, dans la roche poreuse du sous-sol deux phases peuvent circuler, l'air et l'eau. On parle alors d'écoulement diphasique. Cependant, si l'on descend à une profondeur suffisamment importante, la proportion d'air diminue jusqu'à ce que l'air devienne immobile et que l'eau occupe presque la totalité du volume de pores. Le milieu est dit saturé. Nous nous placerons dans cette situation.

Dans ces conditions, l'écoulement stationnaire de l'eau, considéré comme un fluide visqueux incompressible, est régi par la loi de Darcy :

$$\begin{array}{rcll} \text{div } \mathbf{u} & = & q & \text{dans } \Omega \\ \mathbf{u} & = & -\frac{K}{\mu}\vec{\nabla}(p+\rho g z) & \text{dans } \Omega \\ p & = & \overline{p} & \text{sur } \Gamma_D \\ \mathbf{u}\cdot\mathbf{n} & = & g & \text{sur } \Gamma_N \end{array}$$

où

- $\partial\Omega = \Gamma = \Gamma_N \cup \Gamma_D$,
- p est la pression,
- K est le coefficient de perméabilité, donné par une matrice définie positive,
- ρ la masse volumique du fluide,
- μ la viscosité,
- g l'accélération de la pesanteur,
- z la hauteur,
- q représente le champ de forces (en volume) auquel est soumis notre écoulement.

On note $\mathbf{u}$ la vitesse de filtration de l'écoulement appelée vitesse de Darcy. C'est une vitesse fictive correspondant à un écoulement moyen de l'eau observé à une échelle bien supérieure à la dimension des pores.

La première équation exprime la conservation de la masse d'eau. Comme nous considérons un écoulement incompressible, la densité volumique du fluide est constante dans le temps et dans l'espace. Pour ce type d'écoulement, les flux surfaciques entrants compensent exactement les flux surfaciques sortants.

La deuxième équation est appelée loi de Darcy. Elle traduit le fait que la vitesse de Darcy est proportionnelle au gradient de pression. Celle-ci n'est valable que sous certaines conditions : de faibles vitesses (permettant de négliger l'inertie du fluide) et des milieux qui ne sont pas trop hétérogènes.

Si le milieu poreux est isotrope c.à.d l'écoulement est unidirectionnel, le coefficient de la perméabilité K est un coefficient scalaire. Quand le milieu dans l'espace a trois dimensions est anisotrope, le coefficient de conductivité hydrolique est définie par un tenseur symétrique de la forme

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{xy} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{xz} & K_{yz} & K_{zz} \end{bmatrix},$$

En se plaçant dans un repère dont les axes sont les directions pour lesquelles l'écoulement est parallèle au gradient de la pression, le tenseur de conductivité hydraulique est diagonal.

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_h & 0 & 0 \\ 0 & K_h & 0 \\ 0 & 0 & K_v \end{bmatrix},$$

où K_h est le coefficient de perméabilité horizontale, et K_v la perméabilité verticale [46]. Le transport d'un polluant dépend en premier lieu des caractéristiques de l'écoulement qui le transporte. Une approximation précise du champ de vitesse est donc nécessaire et c'est pourquoi nous avons choisi la méthode des élément finis mixtes. Les méthodes numériques classiques mènent parfois à des résultats insatisfaisants notamment dans un milieu fortement hétérogène et dans le cas d'un maillage hexaédrique déformé.

1.5.2 Le transport d'un radionucléide en milieux poreux

Les radionucléides se déplacent sous forme dissoute dans l'eau. Le transport d'un élément radioactif, sans réaction chimique, est donnée par l'équation de type convection-diffusion classique suivante :

$$\omega \frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}\ (-\mathbf{D}\vec{\nabla} c + \mathbf{u}c) + \omega\lambda c = f \tag{1.5.1}$$

où :

- c représente la concentration en solution,
- $\mathbf{u}$ est la vitesse de filtration de l'écoulement, c'est-à-dire la vitesse de Darcy.
- ω représente la porosité cinématique du milieu.
- λ la constante de décroissance radioactive
- f est un terme source

D est le tenseur de diffusion-dispersion est donné par cette forme

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}_e + \mathbf{D}_m(\mathbf{u})$$

où
$\mathbf{D}_e$ est le tenseur de diffusion moléculaire $\mathbf{D}_e = d_e\mathbf{I}$, d_e est un coefficient strictement positif.
$\mathbf{D}_m$ est le tenseur de diffusion mécanique qui dépend linéairement de la vitesse $\mathbf{u}$ défini par

$$\mathbf{D}_m(\mathbf{u}) = |\mathbf{u}|[\alpha_l \mathbf{E}(\mathbf{u}) + \alpha_t(\mathbf{I} - \mathbf{E}(\mathbf{u}))], \quad E_{ij}(\mathbf{u}) = \frac{u_i u_j}{|\mathbf{u}|}$$

avec $\mathbf{E}(\mathbf{u})$ est l'opérateur de projection sur $\mathbf{u}$ et (α_l, α_t) désignent respectivement le coefficient de dispersion longitudinale (ie dans la direction de la vitesse $\mathbf{u}$) et le coefficient de dispersion transversale (ie dans la direction normale à la vitesse)

Le transport de ces polluants met en jeu des phénomènes physiques(convection, dispersion hydrodynamique) ou chimiques(diffusion moléculaire, adsorption, précipitation/dissolution etc...) qui peuvent ralentir ou accélérer la migration de ces éléments. On peut citer :

- Le terme div $(-\mathbf{D}\vec{\nabla}c)$ représente le phénomène de diffusion. Les radionucléides vont se déplacer d'une région où ils sont très concentrés vers une région où ils le sont moins.
- Le terme div $(\mathbf{u}c)$ représente le phénomène de convection. Les radionucléides sont entraînés par le mouvement de l'eau.
- Le phénomène d'adsorption c'est à dire la fixation de l'élément chimique des radionucléides sur la roche. Le phénomène peut être entièrement réversible, c'est à dire que l'élément adsorbé est relaché peu après, ce qui se dit désorbé, dans le fluide.
- Un autre phénomène important du modèle est la perte de masse de l'élément radioactif par fission nucléaire. En l'absence de tout autre phénomène, la décroissance radioactive s'exprime par une équation différentielle linéaire en c donné par

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\lambda c.$$

Dans la suite on considère un modèle d'adsorption linéaire, la relation entre la concentration en solution c et la concentration massique de l'élément adsorbé par la roche $c_s(x, c)$ est donnée par :

$$c_s(1, x) = \gamma(x)c(1, x)$$

où $\gamma(x)$ est le coefficient de partage.

Si $\rho(x)$ est la masse volumique de la partie solide du milieu au point x, la masse totale de solide dans une unité de volume du milieu poreux est donné par

$$wc(t, x) + (1 - w)\rho(x)c_s(t, x)$$

Selon l'expérience, les mécanismes d'adsorption étant relativement rapides (environ quelques minutes) devant la lenteur des écoulements en milieux poreux, la réaction d'adsorption peut être considérée instantanée, ce qui permet d'exprimer c_s indépendamment du t, mais en fonction de x et de c. Une telle fonction est alors appelée isotherme d'adsorption, que nous notons également c_s. Ce phénomène, finalement qualifié d'adsorption-désorption instantanée introduit un retard dans l'écoulement. Les exemples d'adsorption les plus couramment utilisés sont [46, 44].

En couplant avec le phénomène d'adsorption l'équation de transport (5.2.1) s'écrit :

$$\omega\frac{\partial c}{\partial t} + (1 - \omega)\rho\frac{\partial c_s}{\partial t} + \text{div } (-\mathbf{D}\vec{\nabla}c + \mathbf{u}c) + \lambda(\omega c + (1 - \omega)\rho c_s) = f \tag{1.5.2}$$

En remplaçant c_s par sa valeur $c_s = \gamma c$ on obtient :

$$(\omega + (1 - \omega)\rho\gamma)\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div } (-\mathbf{D}\vec{\nabla}c + \mathbf{u}c) + \lambda c(\omega + (1 - \omega)\rho\gamma) = f \tag{1.5.3}$$

On définit le terme de retard R dû à l'adsorption par :

$$R = \omega + (1 - \omega)\rho\gamma$$

L'équation de transport devient :

$$R\omega\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}\ (-\mathbf{D}\vec{\nabla}c + \mathbf{u}c) + R\omega\lambda c = f \tag{1.5.4}$$

La désintégration d'un atome d'un élément radioactif produit de l'énergie sous forme de rayonnement et un ou plusieurs atomes dont la masse est inférieure à celle de l'élément en question. Donc il faut considérer une famille finie de radionucléides. Nous simplifierons en supposant qu'il n'existe qu'un seul élément radioactif intervenant dans ce modèle.

Pour choisir un schéma adapté à la résolution du problème plusieurs propriétés sont souhaitables :

- conservation locale de la masse,
- garantie de la continuité des flux aux interfaces des différents éléments de la discrétisation,
- approximation précise du champ de vitesse en milieu fortement hétérogène,
- préservation de la positivité de la solution schéma monotone,
- capacité à traiter des problème anisotropes,
- flexibilité dans la manipulation de domaines à géométrie complexe,
- traitement satisfaisant des différents types de conditions aux limites,
- résolution efficace du système obtenu.

1.6 Plan du mémoire

Cette thèse comporte cinq chapitres, après cette introduction on décrira dans le chapitre 2 l'exemple d'application qui nous était fournie par l'Andra [28] et sur lequel on va tester nos méthodes numériques.

Dans le Chapitre 3 nous nous intéressés au développement, à l'analyse et à l'implémentation d'une nouvelle méthode d'éléments finis mixtes sur des maillages tridimensionnels d'hexaèdres déformés. Cette méthode est inspirée des travaux de Kuznetsov et Repin [38, 39]. Des expériences numériques ont été réalisées montrant l'accord de la théorie avec l'expérience.

Dans le Chapitre 4 nous présentons une méthode de discrétisation en temps telle que des pas de temps différents sont utilisés dans différents sous-domaines en espace. L'équation d'advection du premier ordre est discrétisée par un schéma décentré amont en espace et par un schéma d'Euler explicite ou implicite en temps. Le raccord entre les grilles en temps est réalisé de sorte que le schéma soit conservatif. Les résultats numériques ont montré que cette méthode pouvait remplacer une méthode utilisant un pas de temps unique, sans perte de précision et avec un gain de temps de calcul important.

Dans le Chapitre 5, nous étudions la résolution de l'équation de diffusion-advection en 3 dimensions en utilisant la technique de séparation d'opérateurs. Un exercice de simulation du transport des déchets radioactifs autour d'un stockage en couches géologiques profondes a été effectué.

Une conclusion propose quelques pistes pour poursuivre ce travail dans le Chapitre 6. Les Annexes A et B sont dédiées respectivement sur la transformation de Piola et aux nouvelles fonctions de bases de notre nouvel espace d'approximation.

Chapitre 2

Un benchmark 3D réaliste

Nous présentons dans ce chapitre le benchmark du GDR Momas correspondant à un problème 3D réaliste issu de l'Andra, [28]. Il s'agit de simuler de façon plus précise le relâchement des radionucléides qui pourraient s'échapper des colis de déchets, sur une géométrie tridimensionnelle avec des coefficients géologiques réalistes (voir les sections suivantes).

Dans la suite, nous qualifierons de modèle oxfordien tout ce qui se rapporte à ce problème.

2.1 Géométrie du domaine de calcul

Le domaine a une extension horizontale de l'ordre de 55 kilomètres et une hauteur d'ordre 500 m., cf. figure 2.1.1, à gauche. Nous résolvons le problème d'écoulement et du transport dans le domaine Ω présenté sur la partie gauche de la figure 2.1.1. Le modèle est constitué de six couches géologiques dont nous donnons la liste de haut en bas :

- Tithonian
- Kimmeridgian
- Oxfordian supérieur(L2a-L2b)
- Hp1-Hp4
- C3a-C3b
- Callovo-Oxfordian(Cox)

Chaque couche géologique est divisée en deux zones : une zone "régionale" et une zone "locale" (définie par $X > 815$ (kilomètre), $1084 < Y < 1104$ (kilomètre)) où les perméabilités sont plus faibles, sauf pour le Kimméridgian qui est divisé en trois zones, voir tableau 2.1.

L'Andra étudie la possibilité de stocker des déchets dans cette dernière couche, le Callovo-Oxfordien, car c'est un type d'argile très peu perméable. L'emplacement d'un éventuel stockage est indiqué sur la figure 2.1.2.

Ainsi, comptant le stockage, le domaine est divisé en 14 sous-domaines voir figure 2.1.1 Les couches inférieures sont des prismes à base hexagonale et d'épaisseurs constantes. Seuls le Tithonien et le Kimméridgien ont des géométries plus complexes.

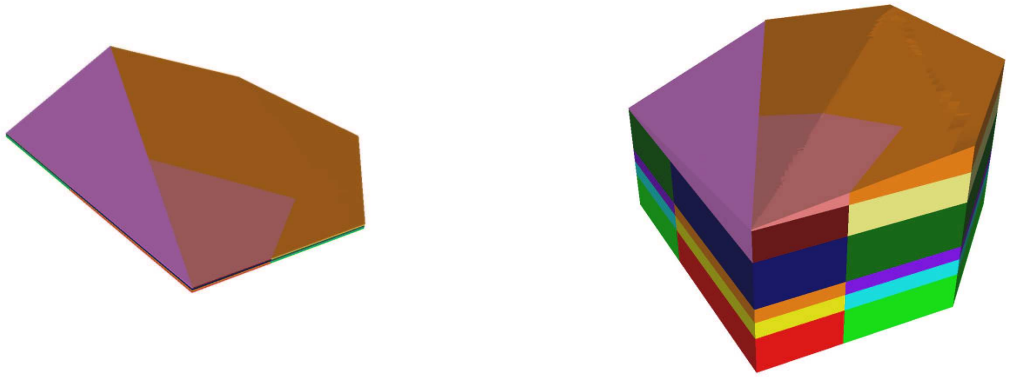

Fig. 2.1.1 – Vues extérieures du domaine 3D du modèle oxfordien. Gauche : domaine Ω à échelle réelle. Droite : domaine Ω', obtenu par dilatation du domaine Ω d'un facteur 30 selon l'axe Oz. Visualisation grâce à (outil de visualisation de maillage de l'Inria, [26]). On observe les différents sous-domaines dessinés avec des couleurs distinctes. Les sous-domaines sont stratifiés par couches horizontales. Dans chaque couche géologique, deux sous-domaines sont accolés : le premier, à l'avant sur la figure, est la zone dite "locale" qui s'encastre dans le second, la zone "régionale", dont on voit les faces latérales à gauche et à droite du premier. Le sous-domaine rouge contient le site de stockage. Visualisation grâce à (outil de visualisation de maillage de l'Inria, [26])

L'hexagone servant de base peut être vu sur la figure 2.1.2. Les coordonnées de ses sommets $O_i, i = 1, \ldots, 6$, sont données dans le tableau 2.1.

Pour toutes les autres visualisations et pour certains calculs, une mise à l'échelle est réalisée : les altitudes sont multipliées par un facteur 30. Cette homothétie, d'axe Oz et de facteur 30 définit un nouveau domaine Ω' tel que :

$$\Omega' := \left\{(x, y, z') \in \mathbb{R}^3 \ / \ (x, y, z) \in \Omega \text{ et } z' = 30z\right\}. \tag{2.1.1}$$

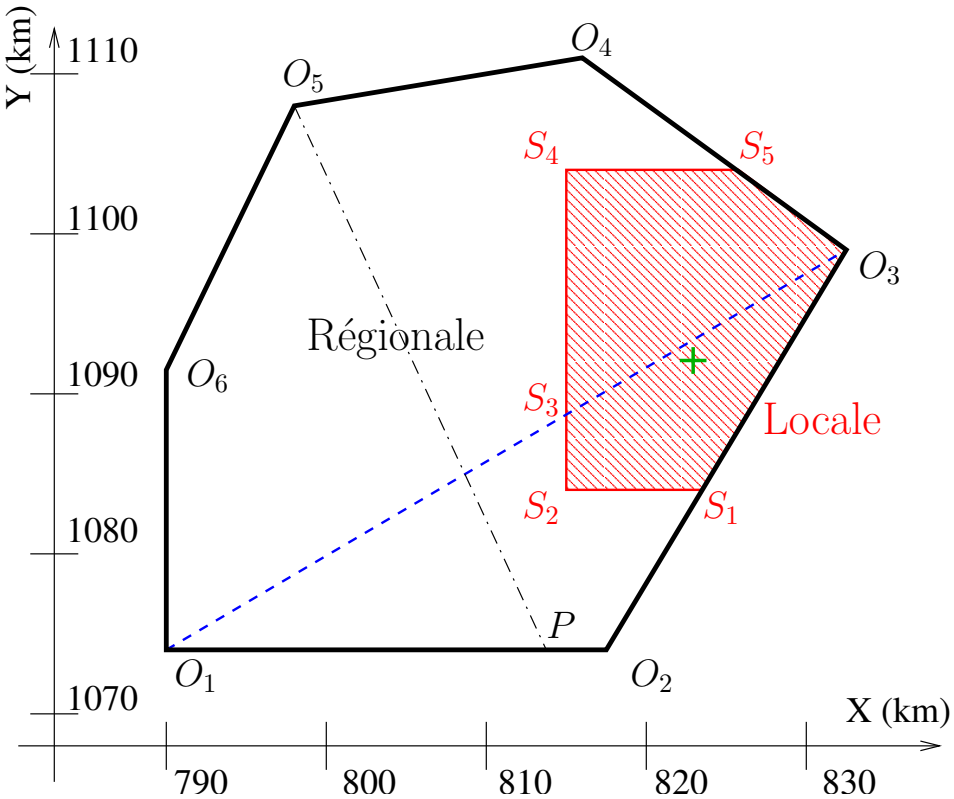

FIG. 2.1.2 – Vue de dessus de la géométrie du modèle oxfordien. On distingue les deux zones, régionale et locale (hachurée en rouge), possédant des propriétés physiques différentes. L'emplacement du laboratoire de Bure est positionné au niveau de la croix verte. Le trait discontinu bleu O_1O_3 marque la limite Sud de l'affleurement du Tithonien. La ligne O_5P montre le plan de coupe de la figure 2.1.4.

Le Kimméridgien, voir la partie droite de la figure 2.1.3, possède un plancher horizontal et un toit divisé en trois morceaux de plan dont un horizontal. Cette formation affleure dans la partie Sud du domaine, délimitée par les points O_1, O_2, O_3, à l'emplacement où le Tithonien n'existe pas. La perméabilité de cette zone est importante.

Le Tithonien, voir la partie gauche de la figure 2.1.3, est encadré par un toit (frontière supérieure) et un plancher (frontière inférieure) divisé en plusieurs morceaux de plans horizontaux et inclinés. Cette formation est affleurante, et coiffe la quasi-totalité du domaine Ω. La projection du toit du Tithonien sur un plan horizontal est le pentagone $O_1O_3O_4O_5O_6$.

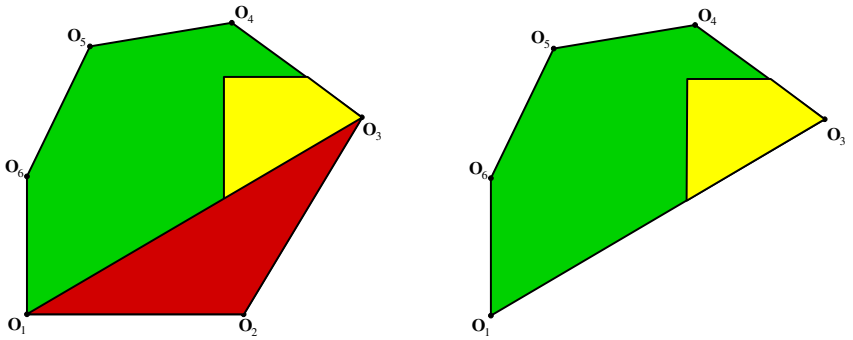

FIG. 2.1.3 – Coupes horizontales des couches de Kimmeridgian et de Tithonian

Point	O_1	O_2	O_3	O_4	O_5	O_6
X (Lambert1 km)	790	$817,5$	$832,5$	816	798	790
Y (Lambert1 km)	1074	1074	1099	1111	1108	$1091,5$
Topographie (m)	145	145	251	341	341	341
Subs. Tithonien (m)	145	$--$	251	251	251	251
Subs. Kimméridgien (m)	145	145	145	145	145	145
Subs. Oxfordien L2a-L2b (m)	-20	-20	-20	-20	-20	-20
Subs. Oxfordien Hp1-Hp4 (m)	-70	-70	-70	-70	-70	-70
Subs. Oxfordien C3a-C3b (m)	-130	-130	-130	-130	-130	-130
Subs. Callovo-Oxfordien (m)	-265	-265	-265	-265	-265	-265

TAB. 2.1 – Cotes des points délimitant le domaine Ω du modèle oxfordien. Le substratum ("Subs."), qui modélise la frontière inférieure, est donné en mètres, tandis que les coordonnées horizontales sont exprimées en kilomètres.

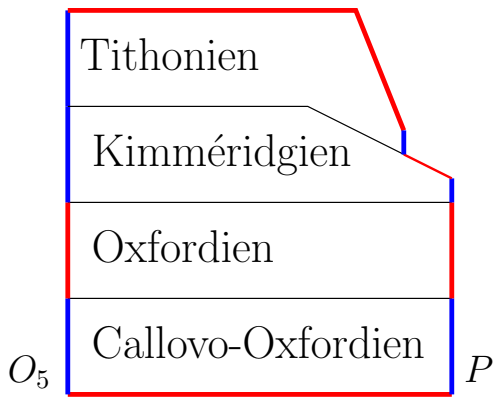

FIG. 2.1.4 – Schéma simplifié d'une coupe verticale selon O_5P du modèle oxfordien, cf. figure 2.1.2. Les quatre strates hydrogéologiques principales sont indiquées. L'oxfordien se scinde en trois sous-couches. Sur les bords, dessinés en rouge, des conditions de type Dirichlet sont imposées pour le problème de l'écoulement. Sur les bords bleus, ce sont des conditions de type Neumann homogène (flux nul). Les échelles réelles ne sont évidemment pas respectées.

2.2 Maillages et décomposition

Le maillage du domaine Ω complet était fourni par l'Andra. Il est constitué de 384 582 hexaèdres cf. figure 2.2.1. La topologie des couches, cf. figure 2.1.4, et les conditions imposées par la géométrie du site de stockage, voir les figures 2.2.2 ont contribué à la déformation importante de certaines mailles. Dans les couches les plus basses qui sont géométriquement des prismes, les déformations sont restées 2D : les mailles sont des quadrangles déformés extrudés. Mais la couche du Tithonien contient des mailles qui ont des déformations 3D ; pour ces mailles hexaédriques déformées, la convergence de la méthode des éléments finis mixtes n'est plus assurée, comme l'ont fait remarquer Naff, Russell et Wilson dans [49]. Pour corriger ce problème, nous avons développé au chapitre 3 une nouvelle méthode d'éléments finis mixtes. En outre, le maillage est bien évidemment caractérisé par une très forte anisotropie, induite par celle du domaine lui-même.

Les sous-domaines sont homogènes en termes de perméabilité mais pas en termes de diffusion-dispersion et de tailles de maillages. Il n'y a en effet aucune raison pour que les couches géologiques aient toutes des maillages de même taille. Dans la pratique, elles ont des maillages très différents : Le plus petit sous-domaine contient un peu plus de 10 000 hexaèdres, alors que le plus gros, correspondant à la zone locale du Collavo-Oxfordien où se trouve le stockage, en contient plus de 70 000. Le stockage possède une forme d'un parallélépipède et composé de 234 hexaèdres.

On peut visualiser une vue de dessous des deux maillages du Collavo-Oxfordien sur les figures 2.2.4 et 2.2.3. Une vue de dessus du maillage complet est présentée sur la figure 2.2.2.

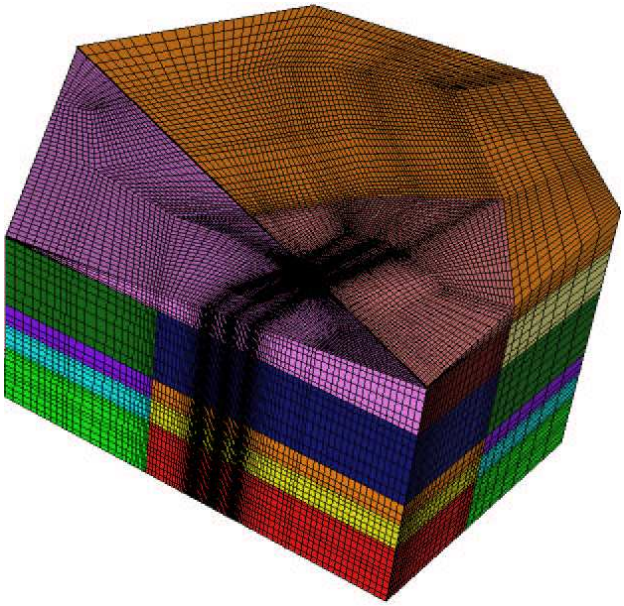

Fig. 2.2.1 – Un stockage est possible dans la partie rouge de la couche inférieure.

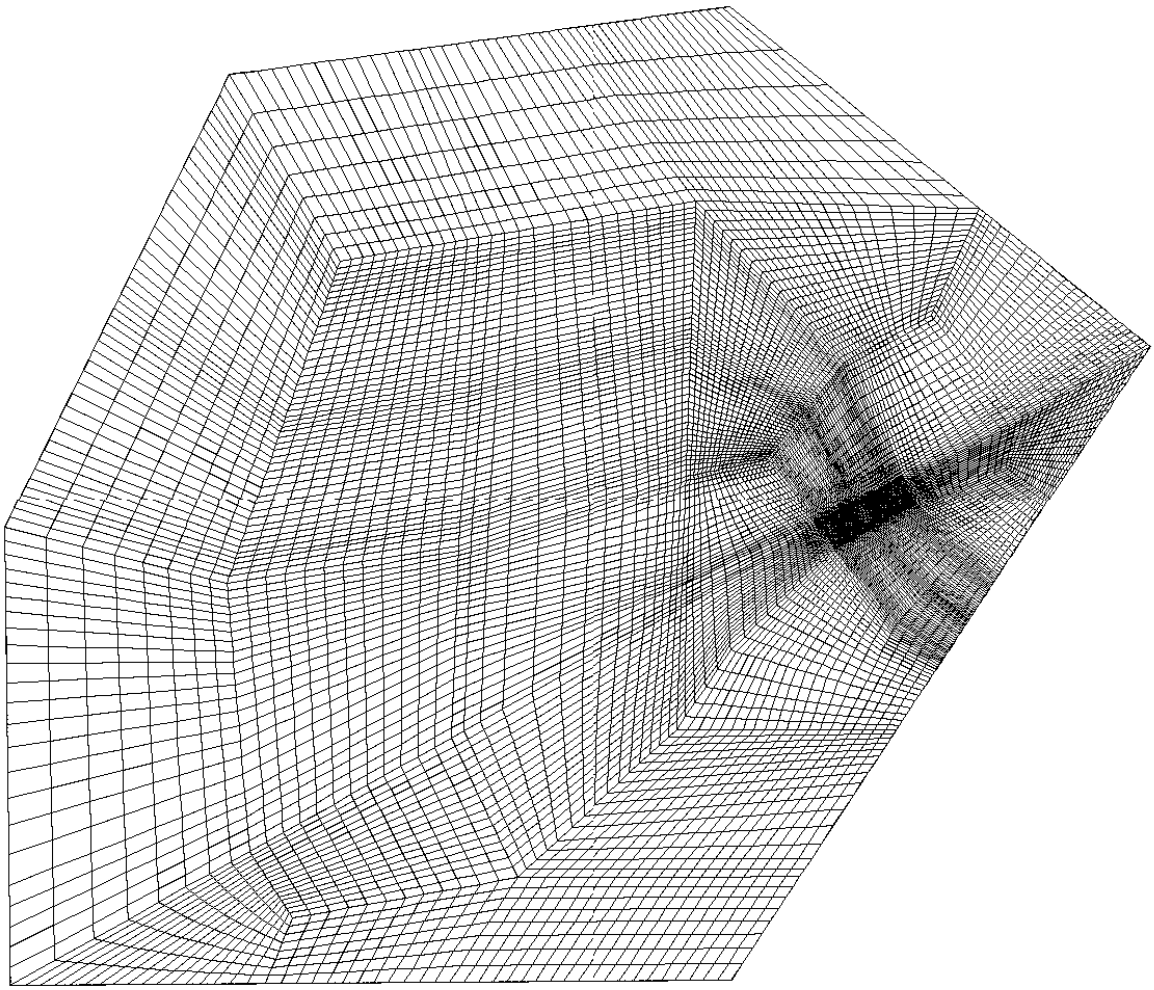

Fig. 2.2.2 – Vue de dessus du maillage du modèle oxfordien. Visualisation avec **Medit**, [26].

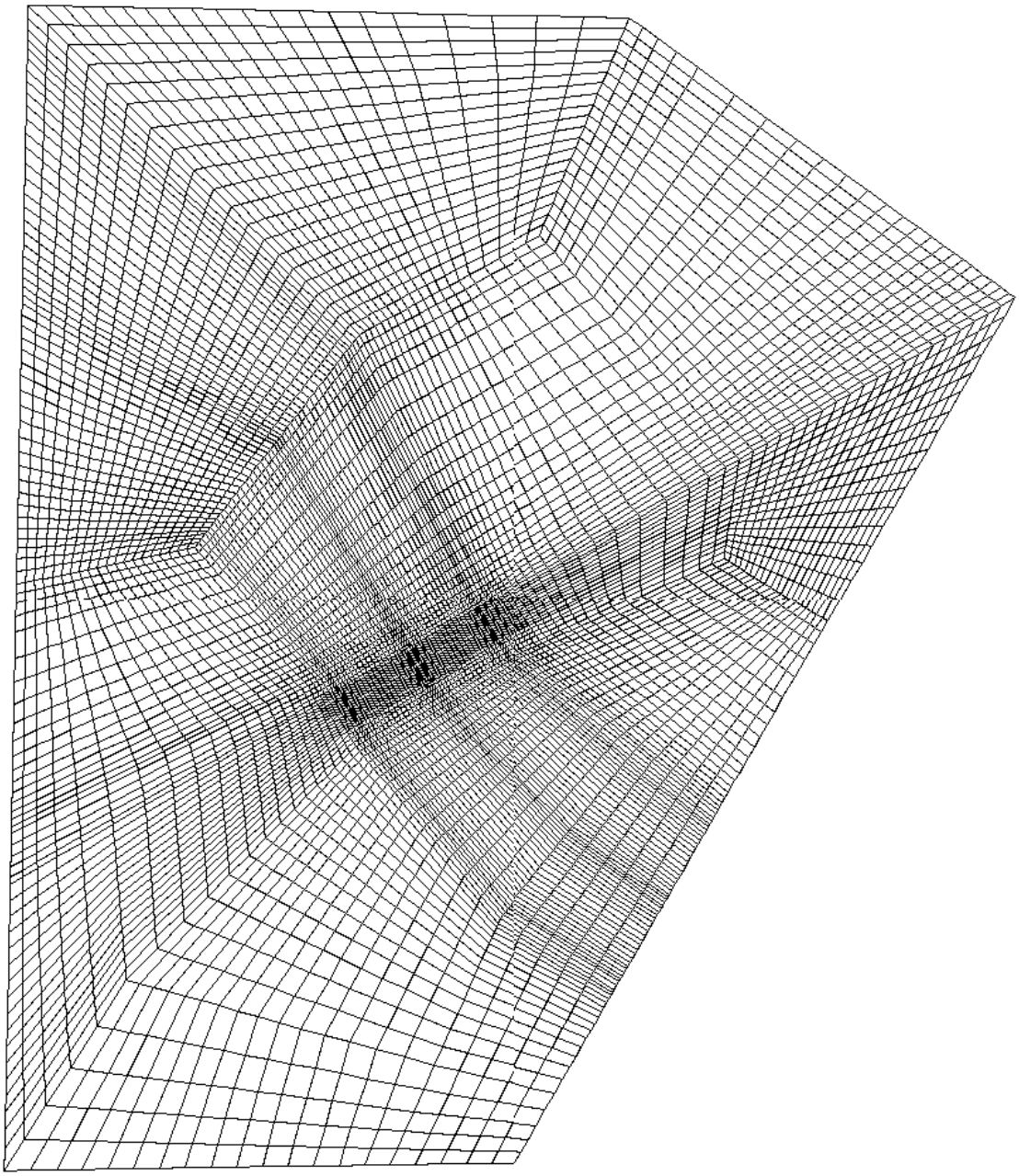

Fig. 2.2.3 – Vue de dessous du maillage de la zone locale du modèle oxfordien. Echelle différente de la figure 2.2.4. Visualisation avec **Medit**, [26].

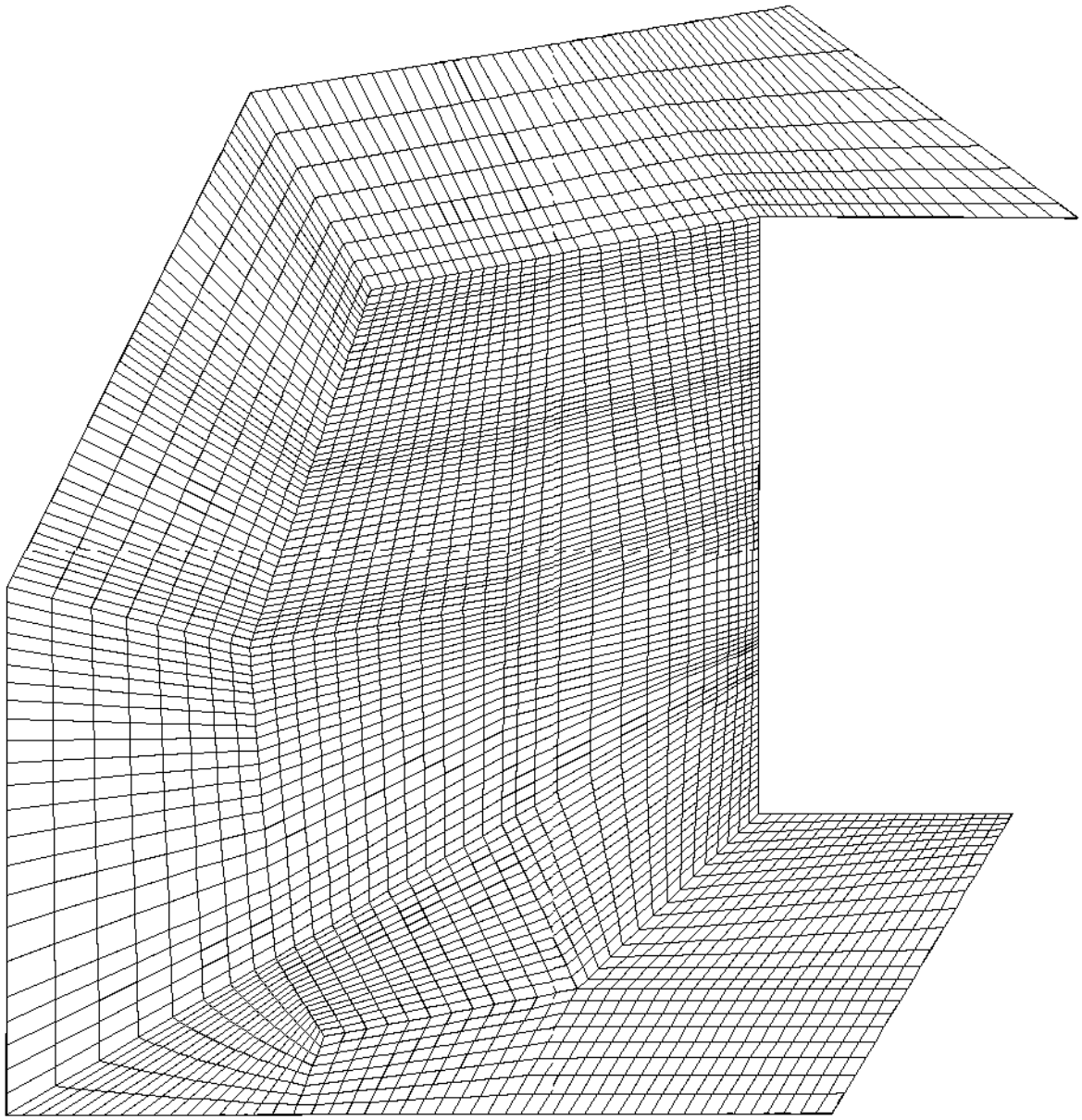

Fig. 2.2.4 – Vue de dessous du maillage de la zone régionale du modèle oxfordien. Visualisation avec **Medit**, [26].

2.3 Equations

Soit Ω un ouvert borné de $\mathbb{R}^3$ qui enserre le site de stockage S. Nous commençons par résoudre le problème de l'écoulement supposé incompressible, sur le domaine Ω. La masse volumique, ρ et la viscosité du fluide, μ, sont supposées constantes dans l'équation de Darcy. Le vecteur gravité g est supposé indépendant des variables spatiales. En supposant que toutes les couches de roche sont saturées en eau l'écoulement est donc indépendant du temps.
Le tenseur de perméabilité est une matrice diagonale K, comme nous le verrons à la section suivante. L'équation de l'écoulement que nous considérons s'écrit :

$$\begin{aligned} \text{div } \mathbf{u} &= 0 \qquad \text{dans } \Omega, \\ \mathbf{u} &= -\frac{K}{\mu}\vec{\nabla} p \qquad \text{dans } \Omega, \\ p &= \overline{p} \qquad \text{sur } \Gamma_D, \\ \mathbf{u}\cdot\mathbf{n} &= \overline{\mathbf{u}} \qquad \text{sur } \Gamma_N. \end{aligned} \tag{2.3.1}$$

La frontière de Ω est composé de deux morceaux, la frontière de Dirichlet Γ_D et la frontière de Neumann Γ_N.

L'eau, dans son déplacement, peut entraîner, grâce à une fuite dans le stockage de déchets radioactifs, des éléments sous forme dissoute.
L'adsorption est supposée linéaire ce qui se modélise par un facteur de retard R dans l'équation de transport suivante :

$$\omega R\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div } (-\mathbf{D}\vec{\nabla} c + \mathbf{u}c) + \lambda\omega R c = 0.$$

où c est la concentration, ω est la porosité, λ la constante de décroissance radioactif et D le tenseur de diffusion-dispersion donné par :

$$\mathbf{D} = D_e\mathbf{I} + |\mathbf{u}|[D_L\mathbf{E}(\mathbf{u}) + D_T(I - \mathbf{E}(\mathbf{u}))], \quad E_{ij}(\mathbf{u}) = \frac{u_i u_j}{|\mathbf{u}|}$$

où D_e est le coefficient de diffusion moléculaire, D_L et D_T désignent les coefficients longitudinaux et transversaux de dispersion.
Dans la suite, le stockage est considéré comme une source supposée constante en temps et égale à un. Une fois la vitesse de Darcy est calculée, nous résolvons l'équation de transport. Dans ce problème, la frontière de Ω est composé de deux morceaux, la frontière extérieure Γ et la frontière du stockage ∂S : $\partial\Omega = \Gamma \cup \partial S$. Ces deux frontières sont des frontières de Dirichlet.

2.4 Données physiques pour le problème de l'écoulement

Les perméabilités que nous avons utilisé dans nos calculs sont données dans la Table 2.2. Nous supposons que dans chaque couche, les zones régionales et locales sont homogènes et

ont une perméabilité $\mathbf{K}$ qui s'écrit

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_h & 0 & 0 \\ 0 & K_h & 0 \\ 0 & 0 & K_v \end{bmatrix},$$

où K_h est le coefficient de perméabilité horizontale, et K_v la perméabilité verticale. Les deux valeurs sont exprimées en mètre par seconde[1]. Le tenseur de perméabilité est généralement scalaire, la seule exception étant le Callovo-Oxfordien au sein duquel la perméabilité verticale est 100 fois plus faible que la perméabilité horizontale.

Ces perméabilités ont deux caractéristiques principales : d'une part, les valeurs sont extrêmement petites, et d'autre part elles sont particulièrement hétérogènes. Le saut entre la zone locale et régionale, des deux couches Hp1-Hp4 et C3a-C3b, est de deux ordres de grandeur et le saut entre la zone affleurée et la zone affleurante du Kimméridgien est de sept ordres de grandeur.

Couche	zone	SD	$\Delta z(m)$	$K_h(m/s)$	$K_v(m/s)$
Tithonien	Reg.	13	$0 \leq 90$	3.10^{-5}	3.10^{-5}
Tithonien	Loc.	12	$0 \leq 90$	3.10^{-5}	3.10^{-5}
Kimmér.	Partie affleurée.	11	$0 \leq 100$	3.10^{-4}	3.10^{-4}
Kimmér.	Reg.	10	$0 \leq 100$	10^{-11}	10^{-11}
Kimmér.	Loc.	9	$0 \leq 100$	10^{-12}	10^{-12}
Ox. L2a-L2b	Reg.	8	165	2.10^{-7}	2.10^{-7}
Ox. L2a-L2b	Loc.	7	165	10^{-9}	10^{-9}
Ox. Hp1-Hp4	Reg.	6	50	6.10^{-7}	6.10^{-7}
Ox. Hp1-Hp4	Loc.	5	50	8.10^{-9}	8.10^{-9}
Ox. C3a-C3b	Reg.	4	60	10^{-10}	10^{-10}
Ox. C3a-C3b	Loc.	3	60	10^{-12}	10^{-12}
C-Ox.	Reg.	2	135	10^{-12}	1.10^{-14}
C-Ox.	Loc.	1	135	10^{-12}	1.10^{-14}

TAB. 2.2 – Caractéristiques physiques de chaque sous-domaine : couche géologique (Tithonien, Kimméridgien, Oxfordien, Callovo-Oxfordien), zone (régionale ou locale), numéro du sous-domaine, épaisseur de la couche, coefficients de perméabilité selon l'horizontale et la verticale.

2.5 Données physiques pour le problème de transport

Le contaminant transporté est L'iode 129 (I^{129}), sa période radioactive est de 1,57E7 ans. Le facteur de retard R est égale à un. Les constantes physiques du problème de

[1]Nous avons gardé cette unité. Nous pourrions également travailler en m/an ou en km/an qui ont plus de sens pour un calcul de transport.

transport sont données couche par couche dans le tableau (2.3).

Hydrogeologic layers	Thickness [m]	Porosity [%]	Effevtive diffusion coef[m^2/s]	Dispersivity coef[m]
Tithonian	Variable	10	10^{-9}	6.0,0.6
Kimmeridgian	Variable	10	10^{-9}	6.0,0.6
Oxfordian L2a-L2b	165	6	10^{-9}	6.0,0.6
Oxfordian the Hp1-Hp4	50	18	10^{-9}	1600,30
Oxfordian the C3a-C3b	60	1	4.10^{-12}	6.0,0.6
Callovo-Oxfordian Cox	135	1	4.10^{-12}	6.0,0.6

TAB. 2.3 – Données physiques des couches géologiques : la porosité, le coefficient de diffusion moléculaire, le coefficient longitudinal et transversal de dispersion, sont donnés dans chaque couche.

Les coefficients de diffusion et de dispersion sautent de plusieurs ordres de grandeur d'une couche géologique à l'autre. Par exemple le saut des coefficients de diffusion et de dispersion entre la couche du C3a-C3b et la couche du Hp1-Hp4 est de trois ordres de grandeurs.

2.6 Conditions aux limites

Pour le problème de l'écoulement, les conditions aux limites de type Neumann homogène sont affectées à certaines parois latérales des couches géologiques 2.1.4. Celles-ci valent zéro. Partout ailleurs, des conditions de type Dirichlet sont imposées ; elles sont lues par des fichiers de données fournis par l'Andra. Les charges imposées varient entre 470 au plancher du Callovo-Oxfordien et 150 au toit du Tithonien. Nous pouvons voir sur la figure suivante comment sont appliquées les conditions aux limites sur le domaine.

Pour le problème du transport, la condition initiale appliquée à la concentration vaut zéro sur tout le domaine Ω. Sur le bord du stockage ∂S, la concentration est supposée égale a un et sur le bord Γ, elle est supposée nulle. Cette dernière condition ne pose pas de problème sauf sur le bas du domaine qui est proche du stockage car, mise à part ce dernier morceau, les contaminants n'atteignent pas la frontière. Pour le bas du domaine, cette condition de concentration nulle correspond à une situation où les contaminants sont emportés instantanément par un grand champ de vitesse dans une couche géologique se trouvant en-dessous du domaine de calcul.

Les simulations numériques concernant l'écoulement et le transport du contaminant I^{129}, effectués sur le modèle oxfordian, sont présentés respectivement au chapitre 3 et au chapitre 5.

2.7 le code LifeV

Le projet sur lequel nous avons travaillé est LifeV : LifeV[2] est une librairie d'éléments finis en trois dimensions —L*ibrary of* F*inite* E*lements*— écrite en c++ et qui vise, à son origine tout au moins, des applications plutôt orientées vers les écoulements sanguins.

Cette librairie est le fruit d'un partenariat étroit qui dure depuis quelques années entre différents laboratoires de recherche européens : notamment au sein de l'Inria Rocquencourt, du Politecnico de Milan en Italie, et de l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne en Suisse[3].

Le lien avec les milieux poreux, qui nous préoccupent ici, peut sembler ténu au premier abord. En fait, une collaboration s'est mise en place car certains écoulements sanguins à travers des filtres, dont le but est de séparer les différents constituants du sang, peuvent se modéliser comme des écoulements en milieux poreux anisotropes.

Le langage de programmation orienté objets c++ est maintenant largement répandu dans la communauté numérique. La programmation objet est beaucoup moins sûre que la programmation fonctionnelle.

Nous présentons quelques ouvrages —goutte d'eau au milieu de l'océan des publications consacrées au c++— qui nous ont servi et que nous avons trouvé bien faits : le passeport pour le c++ [30] est un bon livre plutôt à l'usage des étudiants, donnant un bon aperçu du c++. Le livre de Stroustrup [64] est la référence incontournable, très complète bien qu'un peu indigeste. Nous concluons avec un livre original sur le c++ : [30] ; son intérêt majeur est de commencer directement par l'utilisation de la librairie de modèles standard —*Standard Template Library* ou STL—, et de fournir un accès rapide aux possibilités avancées du langage. Il renverse ainsi les habitudes de l'enseignement du c++ et permet sans doute à un débutant de démarrer assez rapidement.

2.7.1 Implémentation des nouveaux éléments finis mixtes

Ces quelques lignes expliquent le travail de programmation que nous avons réalisé pour obtenir un code qui résolve l'écoulement et le transport en trois dimensions.

Nous sommes partis de la librairie LifeV et nous nous sommes servis des outils de gestion de maillage, de traitement des conditions aux limites, d'assemblage, de manipulations de tableaux, d'inversion matricielle, etc., qui existaient déjà. Nous avons utilisé le formalisme de mise en œuvre des éléments finis pour ajouter les nouveaux éléments de **KR** sur des hexaèdres déformés, aux éléments finis déjà implémentés[4].

L'élimination des inconnues de vitesse et de pression est réalisée grâce aux librairies **Blas** [5] —*Basic Linear Algebra Subprograms*— [22], et **Lapack**[6] —*Linear Algebra*

[2]Voir l'URL `http ://www.lifev.org/`.

[3]Voir l'URL `http ://iacs.epfl.ch/cmcs/Haemodel.php3`.

[4]Citons les éléments $P1$, $P1$ bulle, $P2$, Raviart-Thomas-Nédélec de plus bas degré et d'autres, pour les tétraèdres et $Q1$, Raviart-Thomas-Nédélec de plus bas degré pour les hexaèdres.

[5]Voir l'URL `http ://www.netlib.org/blas/`.

[6]Voir l'URL `http ://www.netlib.org/lapack/`.

Package— [47]. L'inversion du système matriciel est opérée grâce à la librairie **Aztec**, [2].

Chapitre 3

Une nouvelle méthode d'éléments finis mixtes pour des maillages hexaèdriques généraux

Le problème posé concerne l'utilisation de la méthode des éléments finis mixtes standard sur les maillages d'hexaèdres déformés. L'approche classique, consistant à utiliser la transformation de Piola et à passer de l'hexaèdre déformé au cube de référence, ne permet pas de conserver les champs de vitesse uniformes [49]. Ceci est un problème qui a pour conséquence la détérioration des propriétés de convergence de la méthode. Dans le cas des tétraèdres et des parallélépipèdes ce problème n'existe pas car la transformation de Piola est affine. Cette idée servira de fil conducteur à la présentation de notre nouvelle méthode d'éléments finis mixtes pour les maillages d'hexaèdres déformés. Cette méthode est inspirée des travaux de Kuznetsov et Repin [38, 39].

Une première solution a été proposée en dimensions deux par Shen [34]. Celui-ci introduit un nouvel espace d'approximation de la vitesse, construit en ajoutant une fonction bulle à l'espace $\mathbf{RTN}_0$ sans augmenter le nombre de degrés de liberté. Cependant, on ignore comment étendre cette méthode en trois dimensions. Une autre solution en dimensions deux est proposée par Arnold-Boffi-Falk [18, 19]. Elle consiste à ajouter deux degrés de liberté à l'espace d'approximation de la vitesse, qui sont les moments d'ordre un dans la direction de x et y. Néanmoins, étendre cette méthode en trois dimensions est très compliqué puisque cela demande un grand nombre de degrés de liberté, comme cela été proposée par Luce-Thomas [40].

Dans ce chapitre nous nous intéressés au développement, à l'analyse et à l'implémentation d'une nouvelle méthode d'éléments finis mixtes sur des maillages tridimensionnels d'hexaèdres déformés. Des expériences numériques ont été réalisées montrant l'accord de la théorie avec l'expérience. Ce travail a été présenté lors de la conférence **CMWR XVI : Computational Methods in Water ressources XVI International Conference, Copenhagen, Denmark, June 19-22 2006**, et publié dans les actes de cette conférence [62]. Un autre article [4] sur cette partie est soumis à publication.

3.1 Introduction

Single phase incompressible flow in a porous medium is governed by the Darcy flow equation, an elliptic equation coupling a conservation equation with Darcy's law. If gravity is neglected the mixed form of this equation becomes the system

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= -K\vec{\nabla}p \quad \text{in} \quad \Omega \\ \operatorname{div} \mathbf{u} &= f \qquad\quad \text{in} \quad \Omega, \end{aligned}$$

where the primary unknown p is the fluid pressure, the secondary unknown $\mathbf{u}$ is the Darcy flow velocity, the coefficient K is a piecewise constant symmetric tensor, and f is a source term. It has been known since the early 80's that mixed finite element methods are particularly useful for the numerical simulation of this system of equations. There are several reasons why this is so. First of all, with a mixed method the Darcy velocity $\mathbf{u}$ is calculated simultaneously with the pressure p and to the same order of accuracy. Also in many applications the premeability K is discontinuous and can vary over several orders of magnitude from one geological region to another, and mixed methods are particularly suited to handling this difficulty. Equally important is the fact that mixed methods are conservative and even locally conservative and for most geophysical applications this is an essential feature.

Many mixed methods for second order elliptic problems were introduced. Among the most well known of these are [57], [52], [53], [10], [9], and [8]. These elements are all based on triangular or rectangular elements in 2 dimensions or on tetrahedral, parallelepiped, or prismatic elements in 3 dimensions. For large calculations, regular meshes of rectangular or parallelepipedic elements are particularly efficient. However, for geophysical applications, the porous medium is a geological structure and is not always well suited to a regular mesh of rectangular elements. A natural idea is to deform a regular rectangular mesh so that the elements are convex quadrilaterals or hexahedra and to construct finite elements on the mesh by using multilinear mappings to a reference rectangle or rectangular solid. The approximation space on the deformed element is the image under the Piola transformation (see [45]) of the approximation space on the reference element. However, unless the new elements are parallelograms or parallelepipeds, so that the multilinear maps are actually affine, the classical scaling arguments break down and interpolation accuracy is lost. Though there remain problems for two dimensional elements, see [19], the problem is particularly evident for three dimensional elements. We describe an example due to Tom Russell given in [49] to show that if the approximation space on the reference element is $\mathbf{RTN}_0$, the lowest order Raviart Thomas Nedelec space, cf. [58], the resulting approximation space does not even contain the constant functions. Consider the truncated pyramid E of unit height and with square horizontal bases of extents $s_0 \times s_0$ and $s_1 \times s_1$, shown below in Figure 3.1.1, and suppose that the constant vector field $\mathbf{u}(x) = (0, 0, 1)^t, \forall x \in E$, does belong to the approximation space.

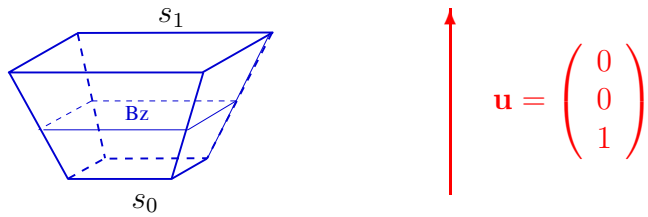

FIG. 3.1.1 – A hexahedron in the form of a truncated pyramid and a constant flow field

The exact flux through a horizontal section B_z, for $0 \leq z \leq 1$ is equal to the area of this section

$$\int_{B_z} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_z = ((1-z)s_0 + zs_1)^2.$$

However the flux of any $\mathbf{v} \in \mathbf{RTN}_0$ of the unit reference cube through a horizontal section $\hat{B}_z$ varies linearly with z

$$\int_{\hat{B}_z} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_z = (1-z)s_0^2 + zs_1^2.$$

Since the Piola transformation preserves flux through any section, the constant field $\mathbf{u}$ can not be the image of any vector field in $\mathbf{RTN}_0$.

To show the effect in an actual computation we show a calculation carried out by Martin Prosi [1]. The calculation domain is a right circular cylinder. The permeability is constant and the source term is null. The boundary conditions imposed on the sides of the cylinder are so called no flow conditions, i.e. homogeneous Neumann conditions, and a constant pressure is given on each of the two bases of the cylinder with a pressure drop from one end to the other. Thus for the analytic solution the pressure is constant on each cross section parallel to the axis and it varies linearly from one end to the other while the flow field is constant and is parallel to the axis of the cylinder. The results shown in Figure 3.1.2 were obtained with deformed $\mathbf{RTN}_0$ elements. The pressure result is correct, but the flow field is not constant.

[1] Post doctorat à l'école polytechnique de Milan, martin.prosi@mate.polimi.it

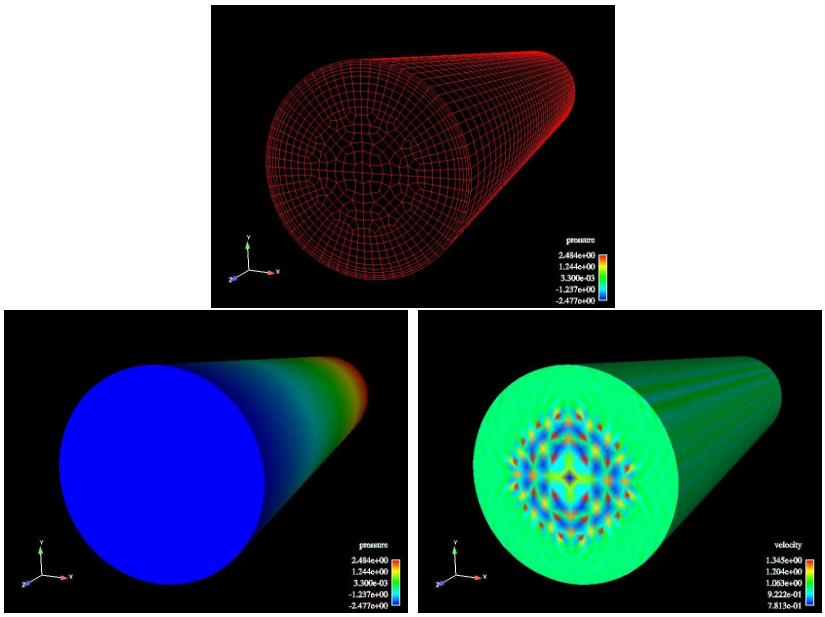

FIG. 3.1.2 – Difficulty for a mesh of non parallelepiped hexahedra

Several articles have addressed the problem of defining a mixed finite element on a distorted, non parallelogram rectangle or on a distorted, non parallelepiped rectangular solid at least for lowest order elements. In [34] and [18, 19] elements are introduced for convex quadrilateral elements, i.e. two dimensional elements but neither of these has a satisfactory extension to convex hexahedral elements, or three dimensional elements. In [38] a composite element was introduced for convex quadrilaterals in which the quadrilateral was subdivided into two triangles. The space of functions corresponding to the subdivided quadrilateral was the space of $H(\text{div})$-functions on the quadrilateral such that the restriction to each of the two triangles was in $\mathbf{RTN}_0$ of the triangle and such that the divergence of the function was constant over the entire quadrilateral. In [39] this idea was extended in a general way to elements that are three dimensional polygons.

In this article, following the ideas of Kuzenetsov and Rapine, we develop a composite element specifically for a convex hexahedron. This element is obtained by dividing the hexahedron into five tetrahedra. We show that the element has order h approximation properties for functions that are slightly more regular than H^1.

We will assume throughout this article that the boundary $\partial\Omega$ of Ω is made up of a nonempty part Γ_D on which a Dirichlet boundary condition is imposed and that on the remainder or the boundary Γ_N, a homogeneous Neumann condition has been imposed.

$$\begin{aligned} p &= p_d \quad \text{on} \quad \Gamma_D \\ \mathbf{u}\cdot\mathbf{n}_\Omega &= 0 \quad \text{on} \quad \Gamma_N, \end{aligned}$$

Where $\mathbf{n}_\Omega$ is the unit outward normal vector on the boundary of Ω. Throughout we will use the notation, if X is a domain in $\mathbb{R}^3$, then $\mathbf{n}_X$ is a unit, outward pointing normal

vector field on the boundary of X. If Y is part of the boundary of a domain in $\mathbb{R}^3$, then $\mathbf{n}_Y$ denotes a unit normal vector field on Y.

In Section 1.3 we recall some of the theory for mixed finite elements methods. The new mixed finite element approximation is developed in section 2.3. Section 3.3 is devoted to the interpolation error. In Section 4.3 we present some mumerical results.

3.2 Numerical analysis for mixed methods

In this section we recall some well known results for mixed finite element methods. In [7] it is shown that if $\mathcal{W}$ and $\mathcal{M}$ are Hilbert spaces and if $a : \mathcal{W} \times \mathcal{W} \longrightarrow \mathbb{R}$ and $b : \mathcal{W} \times \mathcal{M} \longrightarrow \mathbb{R}$, are continuous bilinear forms satisfying the following two conditions :

$$(i) \quad a \text{ is } \mathcal{V}\text{-elliptic, where } \mathcal{V} = \{\mathbf{v} \in \mathcal{W} \,:\, b(\mathbf{v}, q) = 0, \quad \forall q \in \mathcal{M}\}, \text{ i. e.} \tag{3.2.1}$$

$$\exists \alpha > 0 \text{ such that } \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}, \quad a(\mathbf{v}, \mathbf{v}) \geq \alpha \|\mathbf{v}\|^2_{H(\mathrm{div};\Omega)}$$

$$(ii) \quad b \text{ satisfies the inf-sup condition on } \mathcal{W} \times \mathcal{M}, \text{ i. e.} \tag{3.2.2}$$

$$\exists \beta > 0 \text{ such that } \inf_{q \in \mathcal{M}} \sup_{\mathbf{v} \in \mathcal{W}} b(\mathbf{v}, q) \geq \beta \|\mathbf{v}\|_{H(\mathrm{div};\Omega)} \|q\|_{L^2(\Omega)},$$

then if $\mathcal{L}_{\mathcal{W}} : \mathcal{W} \longrightarrow \mathbb{R}$ and $\mathcal{L}_{\mathcal{M}} : \mathcal{M} \longrightarrow \mathbb{R}$ are continuous linear forms there exists a unique solution ($\mathbf{u}$, p) to the problem

$$(\mathcal{P}_w) \quad \begin{array}{l} \text{Find } \mathbf{u} \in \mathcal{W} \text{ and } p \in \mathcal{M} \text{ such that} \\ a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) - b(\mathbf{v}, p) = \mathcal{L}_{\mathcal{W}}(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{W} \\ b(\mathbf{u}, q) = \mathcal{L}_{\mathcal{M}}(q), \quad \forall q \in \mathcal{M}. \end{array} \tag{3.2.3}$$

If also $\mathcal{W}_h$ and $\mathcal{M}_h$ are finite element subspaces of $\mathcal{W}$ and $\mathcal{M}$ respectively, and the bilinear forms a and b are such that

$$(i) \quad a \text{ is } \mathcal{V}_h\text{-elliptic, where } \mathcal{V}_h = \{\mathbf{v} \in \mathcal{W}_h \,:\, b(\mathbf{v}, q) = 0, \quad \forall q \in \mathcal{M}_h\}, \text{ i. e.} \tag{3.2.4}$$

$$\exists \alpha_h > 0 \text{ such that } \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}_h, \quad a(\mathbf{v}, \mathbf{v}) \geq \alpha_h \|\mathbf{v}\|^2_{H(\mathrm{div};\Omega)}$$

$$(ii) \quad b \text{ satisfies the inf-sup condition on } \mathcal{W}_h \times \mathcal{M}_h, \text{ i. e.} \tag{3.2.5}$$

$$\exists \beta_h > 0 \text{ such that } \inf_{q \in \mathcal{M}_h} \sup_{\mathbf{v} \in \mathcal{W}_h} b(\mathbf{v}, q) \geq \beta_h \|\mathbf{v}\|_{H(\mathrm{div};\Omega)} \|q\|_{L^2(\Omega)},$$

then the discretized problem

$$(\mathcal{P}_h) \quad \begin{array}{l} \text{Find } \mathbf{u} \in \mathcal{W}_h \text{ and } p \in \mathcal{M}_h \text{ such that} \\ a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) - b(p, \mathbf{v}) = \mathcal{L}_{\mathcal{W}}(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{W}_h \\ b(q, \mathbf{u}) = \mathcal{L}_{\mathcal{M}}(q) \quad \forall q \in \mathcal{M}_h, \end{array} \tag{3.2.6}$$

admits a unique solution ($\mathbf{u}_h$,p_h), and

$$\|p - p_h\|^2_{L^2(\Omega)} + \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|^2_{H(\mathrm{div};\Omega)} \leq C \left\{ \inf_{q_h \in \mathcal{M}_h} \|p - q_h\|^2_{L^2(\Omega)} + \inf_{\mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|^2_{H(\mathrm{div};\Omega)} \right\}$$

with a constant C which depends only on the constants of continuity of the bilinear forms a and b and the constants α_h and β_h.

With $\mathcal{W}$=$\mathbf{H}(\text{div};\Omega)$ and $\mathcal{M}$=$L^2(\Omega)$ and

$$a(\mathbf{u},\mathbf{v}) = \int_\Omega \mathbf{v}\cdot\mathbf{u} \qquad \text{and} \qquad b(\mathbf{u},q) = \int_\Omega q \,\text{div}\ \mathbf{v},$$

problem ($\mathcal{P}_w$) is the weak form of ($\mathcal{P}$) where the forms $\mathcal{L}_\mathcal{W} : \mathcal{W} \longrightarrow \mathbb{R}$ and $\mathcal{L}_\mathcal{M} : \mathcal{M} \longrightarrow \mathbb{R}$ are determined by the source term and the Dirichlet boundary data respectively. Further a and b satisfy the conditions (3.2.1) and(3.2.2) so there is a unique solution $(\mathbf{u}, p)$ to problem ($\mathcal{P}$).

Thus to see that a pair of spaces $(\mathcal{W}_h, \mathcal{M}_h)$ is suitable for a mixed method it suiffices to show that the two conditions (3.2.4) and (3.2.5) are satisfied with contants α_h and β_h independent of h and to estimate interpolation errors.

For the spaces we shall consider, $(\mathcal{W}_h, \mathcal{M}_h)$ it is easy to see that the condition (3.2.4) is satisfied because $\mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$ so that α_h may be taken to be α. For the condition (3.2.5) we know that $\mathcal{M}_h \subset \mathcal{M}$ and b satisfies (3.2.2) for the spaces $(\mathcal{W}, \mathcal{M})$. Thus given $q_h \in \mathcal{M}_h$ there is an element $\mathbf{v} \in \mathcal{W}$ such that $b(\mathbf{v}, q_h) \geq \beta\|\mathbf{v}\|_{H(\text{div};\Omega)}\|q_h\|_{L^2(\Omega)}$. Thus following standard procedure we define a projection operator Π_h onto $\mathcal{W}_h$ such that $b(\Pi_h\mathbf{v}, q_h) = b(\mathbf{v}, q_h),\ \forall q_h \in \mathcal{M}_h$ and such that $\|\Pi_h\mathbf{v}\|_{H(\text{div};\Omega)} \leq \gamma_h\|\mathbf{v}\|_{H(\text{div};\Omega)}$ and show that γ_h is in fact independent of h when h is sufficiently small. We will also give interpolation estimates.

3.3 The approximation spaces

Suppose that Ω is a convex polyhedral domain in $\mathbb{R}^3$ and let $\mathcal{M} = L^2(\Omega)$ and $\mathcal{W} = \{\mathbf{u} \in H(\text{div}\ ,\Omega)\ \ :\ \ \mathbf{u}\cdot\mathbf{n}_\Omega = 0\ \text{on}\Gamma_N\}$. Let $\mathcal{T}_h$ be a mesh made up of general convex hexahedral cells E with planar faces such that the permeability K is constant on each cell E. Let $\mathcal{F}_h$ be the set of faces F (quadralateral) of elements of $\mathcal{T}_h$. Let $\mathcal{M}_h \subset \mathcal{M}$ be the space of L^2 functions on Ω that are constant on each cell $E \in \mathcal{T}_h$. The object of this section is to define an approximation space $\mathcal{W}_h \subset \mathcal{W}$ such that the pair $(\mathcal{W}_h, \mathcal{M}_h)$ yields a pair of approximation spaces appropriate for mixed finite element approximation in the sense that both Brezzi conditions are satisfied and that the spaces permit order h approximation of sufficiently regular functions.

The approximation space $\mathcal{W}_h \subset \mathcal{W}$ will be defined such that an element $\mathbf{u}_h \in \mathcal{W}_h$

– has constant divergence in each hexahedron $E \in \mathcal{T}_h$,

– has constant normal component on each face $F \in \mathcal{F}_h$,

– is uniquely determined by its normal traces on the faces $F \in \mathcal{F}_h$.

as is the case for the Raviart-Thomas-Nedelec mixed finite element approximation space of lowest-order for a tetrahedral or a parallelepiped mesh. Toward this end, we construct a composite element by subdividing each hexahedron E into 5 tetrahedra $T_j^E, \quad j = 1, \cdots, 5$. We define a space $\mathcal{W}_E$ for each E in $\mathcal{T}_h$ and we will define $\mathcal{W}_h$ the space of $\mathbf{H}(\text{div};\Omega)$ − functions in Ω that are locally in $\mathcal{E}_E$. Thus the pair of approximation spaces is defined by

$$\mathcal{M}_h = \{q \in \mathcal{M}\ :\ q_{|E} \text{ is constant } \forall E \in \mathcal{T}_h\}$$

$$\mathcal{W}_h = \{\mathbf{u} \in \mathcal{W}\ :\ \mathbf{u}_{|E} \in \mathcal{W}_E \forall E \in \mathcal{T}_h\}$$

3.3.1 A composite element

One begins by choosing either set of 4 of the 8 vertices for which no pair are joined by an edge of a face of E; i.e. one chooses any of the 8 verticies together with the three vertices which shave a face with the original vertex but are not joined to it by an edge. These four points determine a tetrahedron T_5^E whose faces are in the interior of E, and $E \setminus T_5^E$ is made up of four disjoint tetrahedra $T_j^E, \quad j = 1, \cdots, 4$: as indicated in Figure 3.3.1.

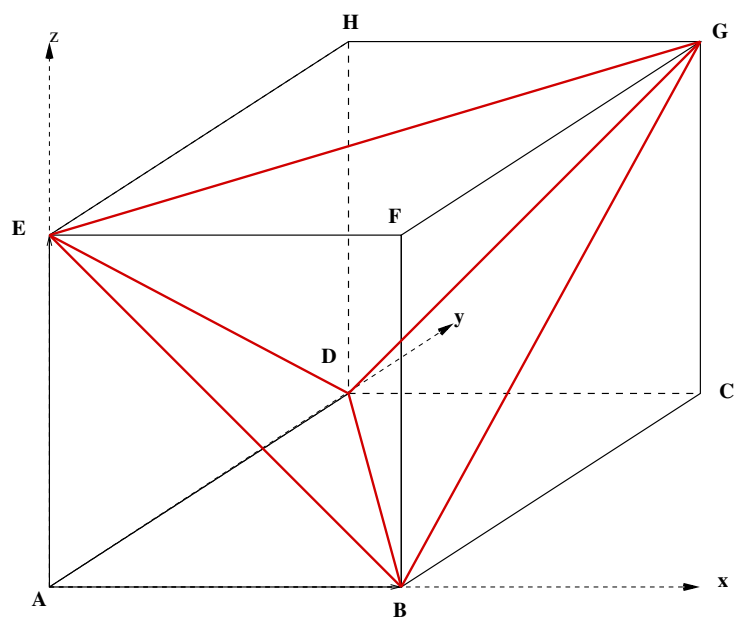

FIG. 3.3.1 – One partition of the reference hexaedron into 5 tetrahedra

$$E \;=\; T_1^E \cup T_2^E \cup T_3^E \cup T_4^E \cup T_5^E.$$

In the figure 3.3.1 we have

$$T_1^E = ABDE, \quad T_2^E = BEFG, \quad T_3^E = BCGD, \quad T_4^E = DEHG, \quad T_5^E = BEDG.$$

Each of the first four tetrahedra, $T_j^E \quad j = 1, \cdots, 4$, has three triangular faces which are contained in the boundary of E and one internal face. (In fact if E is a cube these four tetrahedra are similar). The four internal faces of these four tetrahedra form the boundary of the fifth tetrahedron T_5^E. Note that for a given hexahedron there are exactly tow ways to subdivide it in such a manner.

We denote by $\widetilde{\mathcal{T}}_E$ one of the triangulations of E made up of these 5 tetrahedra :

$$\widetilde{\mathcal{T}}_E = \{T_j^E : j = 1, \cdots, 5\}.$$

We will also use the notation $\mathcal{F}_E$ for the set of faces F of the hexahedron E and $\widetilde{\mathcal{F}}_E$ for the set of faces $\widetilde{F}$ of the tetrahedra $T \in \widetilde{\mathcal{T}}_E$:

$$\mathcal{F}_E = \{F \in \mathcal{F}_h \ : \ F \text{ is a face of } E\}, \qquad \widetilde{\mathcal{F}}_E = \{\widetilde{F} \ : \ \widetilde{F} \text{ is a face of } T_j^E \text{ for some } j, j = 1, \cdots 5\}.$$

Note that $\mathcal{F}_E$ has 6 elements and $\widetilde{\mathcal{F}}_E$ 16 elements, 12 of which are on the boundary of E and 4 of which lie in the interior of E.

3.3.2 Local approximation spaces

Here we define several local approximation spaces both for scalar functions and for vector valued functions. For a given $E \in \mathcal{T}_h$ define the space $\mathcal{M}_E$ to be the space of scalar functions q that are constant on E and let $\widetilde{\mathcal{M}}_E$ denote the space of piecewise constant functions on E that are constant on each tetrahedra of $\widetilde{\mathcal{T}}_E$:

$$\mathcal{M}_E = \{q \in L^2(E) \ : \ q_{|E} \text{ is constant } \}$$

$$\widetilde{\mathcal{M}}_E = \{q \in L^2(E) \ : \ q_{|T_j^E} \text{ is constant, } j = 1, \cdots, 5\}$$

and note that

$$\mathcal{M}_E \subset \widetilde{\mathcal{M}}_E.$$

An element of $\mathcal{M}_E$ is determined by its constant value on E and an element of $\widetilde{\mathcal{M}}_E$ is determined by its constant values on the 5 tetrahedra of $\widetilde{\mathcal{T}}_E$.

The space associated with the composite element is $\mathcal{W}_E$, the space of vector functions $\mathbf{v} \in \mathbf{H}(\text{div}; E)$ satisfying the following conditions :

$$\mathbf{v}_{|T_j^E} \in \mathbf{RTN}_0(T_j^E), \quad j = 1, \cdots, 5 \tag{3.3.1}$$

$$\text{div } \mathbf{v} \quad \text{is a constant over E} \tag{3.3.2}$$

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_E \quad \text{is constant on each face of E.} \tag{3.3.3}$$

We denote by $\widetilde{\mathcal{W}}_E$ the lowest order Raviart-Thomas-Nedelec space over E associated with the discretisation $\widetilde{\mathcal{T}}_E$ of E and define the intermediate space $\widehat{\mathcal{W}}_E$ to be the elements of $\widetilde{\mathcal{W}}_E$ having constant divergence so that

$$\widetilde{\mathcal{W}}_E = \{\mathbf{v} \in \mathbf{H}(\text{div}; E) \ : \ \mathbf{v}_{|T_j^E} \in \mathbf{RTN}_0(T_j^E), \quad j = 1, \cdots, 5\}$$

$$\widehat{\mathcal{W}}_E = \{\tilde{\mathbf{v}} \in \widetilde{\mathcal{W}}_E \ : \ \text{div } \tilde{\mathbf{v}}|_E \text{ is constant}\} \tag{3.3.4}$$

$$\mathcal{W}_E = \{\hat{\mathbf{v}} \in \widehat{\mathcal{W}}_E \ : \ \hat{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n}_{E\,|F} \text{ is constant, } \forall F \in \mathcal{F}_E\}$$

and

$$\mathcal{W}_E \subset \widehat{\mathcal{W}}_E \subset \widetilde{\mathcal{W}}_E.$$

It is well known that an element of $\widetilde{\mathcal{W}}_E$ is uniquely determined by the constant values of the normal fluxes through the faces $\widetilde{F} \in \widetilde{\mathcal{F}}_E$ and that a basis for $\widetilde{\mathcal{W}}_E$ consists of the

set of functions $\tilde{\omega}_{\tilde{F}_i}$, $\widetilde{F}_i \in \widetilde{\mathcal{F}}_E$ having constant normal component on the face $\widetilde{F}_j$ equal to $\delta_{i,j}, j = 1, \cdots, 16$.

To check that a function $\mathbf{v}$ of $\mathcal{W}_E$ is uniquely defined by its normal traces through the 6 faces of E, first note that it is also in $\widetilde{\mathcal{W}}_E$ and so it is determined by the 16 degrees of freedom which are its normal traces on the faces in $\widetilde{\mathcal{F}}_E$. However since its normal traces on the faces in $\mathcal{F}_E$ are constant, the number of degrees of freedom is reduced to 10. (Each (quadralateral) face in $\mathcal{F}_E$ is made up of 2 (triangular) faces in $\widetilde{\mathcal{F}}_E$.) Since the divergence of the element is the same on each of the five tetrahedra in $\widetilde{\mathcal{T}}_E$, the number of degrees of freedom is reduced again by 4. Thus there remain six degrees of freedom to be determined. To check for unisolvence it suffices to note that with g_i denoting the function defined on the boundary of E by $g_{i\,|F_j} = \delta_{i,j}$ for each face $F_j, j = 1, \cdots, 6$, of E, ω_i is defined to be the component $\mathbf{u}$ of the solution $(\mathbf{u},p)$ to the mixed finite element problem

Find $(\mathbf{u}, p) \in (\widetilde{\mathcal{W}}_E^{g_i}, \widetilde{\mathcal{M}}_E)$ such that

$$(\mathcal{P}_E) \qquad \begin{array}{rcll} a(\mathbf{u},\mathbf{v}) - b(\mathbf{v},p) & = & 0 & \forall \mathbf{v} \in \widetilde{\mathcal{W}}_E^0 \\ b(\mathbf{u},q) & = & \dfrac{|F_i|}{|E|} & \forall q \in \widetilde{\mathcal{M}}_E, \end{array}$$

where $\widetilde{\mathcal{W}}_E^{g_i}$, respectively $\widetilde{\mathcal{W}}_E^0$, is the subspace of $\widetilde{\mathcal{W}}_E$ consisting of those elements whose normal traces agree with g_i, respectively are equal to 0, on the boundary of E. Note that while this Neumann problem determines p only up to a constant, it determines $\mathbf{u}$ uniquely so that ω_i is well defined. To see that this is true suppose that ω_i' is a second such solution. Then the difference $\omega_i - \omega_i'$ is a solution to the problem $(\mathcal{P}_E)$ but with the boundary term g_i replaced by 0 and the source term $\dfrac{|F_i|}{|E|}$ replaced by 0. Thus the solution has zero divergence in each of the tetrahedra of $\mathcal{T}_E$ and has zero normal component on all of the external faces of $\widetilde{F}_E$. But each of the exterior tetrahedra $T_i^E, i = 1, \cdots, 4$ has three faces on the boundary of E. Since the flux through each of these faces is null and since the divergence on the tetrahedron is null, the flux through the fourth face, the interior face must also be null. Thus $\omega_i = \omega_i'$. The set of functions $\omega_i, i = 1, \cdots, 6$, thus defined forms a basis of $\mathcal{W}_E$.

In the same way one can see that an element of $\widehat{\mathcal{W}}_E$ is determined by the values of its normal components on the 12 faces in $\widetilde{\mathcal{F}}_E$ that lie on the boundary of E, and that a basis for $\widehat{\mathcal{W}}_E$ is made up of the 12 functions $\hat{\omega}_i$ defined in the obvious maner.

Remark 1 *It might seem more natural to use the canonical subdivision of the hexahedron into 6 tetrahedra, (all of which are identical when the hexahedron is a cube). If instead, the hexahedron were divided in this way into 6 tetrahedra, there would be 18 coefficients to determine corresponding to 18 tetrahedral faces. Conditions (3.3.2) and (3.3.3) impose 5 and 6 constraints respectively leaving 7 degrees of freedom to calculate. The macroelement would not be unisolvant. One could still solve a problem analagous to $(\mathcal{P}_E)$ but the element ω_i would no longer be uniquely determined as with this alternative decomposition each tetrahedron would have two external faces and two internal faces. This decomposition introduces an edge which does not lie on the boundary of E and around which a divergence*

free flow could turn. As was suggested to us by Todd Arbogast, one could instead work with the rotational free subspace.

Remark 2 *Note that while $\mathcal{W}_h$ and $\mathcal{M}_h$ are defined from the local spaces $\mathcal{W}_E$ and $\mathcal{M}_E$ global spaces $\widetilde{M}_h$, $\widetilde{W}_h$ and $\widehat{W}_h$ can not be defined since the decomposition of the elements E is not necessarily done in a way that makes the set of all T such that $T \in \mathcal{T}_E$ for some $E \in \mathcal{T}_h$ a triangulation of Ω.*

3.4 Interpolation error

As we saw in Section 3.2 it follows from Babuska-Brezzi theory that the errors committed in using the mixed finite element method with approximation spaces satisfying the 2 conditions (3.2.1), (3.2.2) is of the same order as the error of interpolation :

$$\|p-p_h\|_{L^2(\Omega)}+\|\mathbf{u}-\mathbf{u}_h\|_{H(\mathrm{div};\Omega)} \leq C\left(\inf_{q_h\in L^2(\Omega)}\|p-q_h\|_{L^2(\Omega)}+\inf_{\mathbf{v}_h\in H(\mathrm{div},\Omega)}\|\mathbf{u}-\mathbf{v}_h\|_{H(\mathrm{div};\Omega)}\right).$$

This section is devoted to the estimation of this error. The goal is thus to show that

$$\inf_{q_h\in L^2(\Omega)}\|p-q_h\|_{L^2(\Omega)} \leq ChN(p) \quad \text{and} \quad \inf_{\mathbf{v}_h\in H(\mathrm{div},\Omega)}\|\mathbf{u}-\mathbf{v}_h\|_{H(\mathrm{div};\Omega)} \leq ChN(\mathbf{u}),$$

where C is a constant independent of the mesh parameter h and the particular function being approximated and $N(p)$, respectively $N(\mathbf{u})$, represents some norm of the function, p, respectively $\mathbf{u}$, being approximated. For the more classical approximation spaces, the usual technique is to define a projection operator into the approximation space and use a linear mapping to a reference element which commutes with the projection operator and then to use a scaling argument. In the present case we define projection operators, but there is no linear mapping to a reference element. Such a mapping would be trilinear and would not produce the desired scaling argument. For both the scalar and the vector functions we define a projection operator which is factored through a projection into a classical approximation space. For the first term in the factorisation we then obtain the standard estimate. However for the second term in the factorisation we obtain an order of h term but the norm is an L^∞ norm on the gradient of the function being approximated. Thus while there is no loss of order of convergence there is loss in terms of the regularity required on the functions being approximated.

To calculate interpolation errors we will, following [39] define a norm on the 4 dimensional spaces $\mathbf{RTN}_0(T)$, for T a tetrahedron, by

$$|[\mathbf{v}]|_T = \int_{\partial T} |\mathbf{v}_j \cdot \mathbf{n}_T|, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{RTN}_0(T).$$

That this semi norm is in fact a norm is evident because in $\mathbf{RTN}_0(T)$, an element with zero normal component on each face of T is the zero vector function. As $\mathbf{RTN}_0(T)$ is finite

dimensional, any two norms are equivalent so there exists positive constants $\alpha_0(T)$ and $\alpha_1(T)$ such that

$$\alpha_0(T) \leq \frac{\|\mathbf{v}\|_{0,T}^2}{|[\mathbf{v}]|_T^2} \leq \alpha_1(T), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{RTN}_0(T).$$

For T a tetrahedron we define ρ_T and h_T by the radius of the inscribed sphere for the tetrahedron T and the diameter of T respectively. Following Arnold et. al. [19] we introduce the notion of *shape regular*. To define the composite element for a hexahedron E, we divided the hexahedron into 5 tetrahedra. There are two possible ways to decompose E into tetrahedra in such a fashion, each resulting in 5 tetrahedra. We let ρ_E be the smallest radius of the inscribed spheres for these 10 tetrahedra, and let h_E be the diameter of E. Then the shape constant of E is defined to be $\sigma_E = \dfrac{h_E}{\rho_E}$. The shape constant for a mesh $\mathcal{T}_h$ consisting of convex hexahedra is the supremum of the shape constants σ_E for $E \in \mathcal{T}_h$. A family of meshes $\{\mathcal{T}_h \ : \ h \in \mathcal{H}\}$ is said to be *shape regular* if the shape constants for the meshes can be uniformly bounded.

Lemma 1 *If the family of discretizations $\{\mathcal{T}_h, h \in \mathcal{H}\}$ is shape regular, then there are constants β_0 and β_1, independent of T and h, such that $\forall T \in \widetilde{\mathcal{T}}_E,\ E \in \mathcal{T}_h,\ h \in \mathcal{H}$,*

$$\beta_0 \leq \frac{\|\mathbf{v}\|_{0,T}^2 h_E^4}{|[\mathbf{v}]|_T^2 |T|} \leq \beta_1. \tag{3.4.1}$$

Proof : The result follows from a scaling argument : if $\hat{T}$ is a reference tetrahedral element and T is the image of $\hat{T}$ under a bijective affine mapping G and if $\forall \hat{\mathbf{v}} \in \mathbf{RTN}_0(\hat{T}), \mathbf{v}$ denotes the image of $\hat{\mathbf{v}}$ under the Piola transformation, then $|[\mathbf{v}]|_T = |[\hat{\mathbf{v}}]|_{\hat{T}}$. It is also well known [] that

$$\frac{1}{|J|\|DG^{-1}\|^2}\|\hat{\mathbf{v}}\|_{0,\hat{T}}^2 \leq \|\mathbf{v}\|_{0,T}^2 \leq \frac{1}{|J|}\|DG\|^2\|\hat{\mathbf{v}}\|_{0,\hat{T}}^2,$$

where DG is the linear part of G and J is it's determinant. Thus

$$\frac{1}{|J|\|DG^{-1}\|^2}\frac{\|\hat{\mathbf{v}}\|_{0,\hat{T}}^2}{|[\hat{\mathbf{v}}]|_{\hat{T}}} \leq \frac{\|\mathbf{v}\|_{0,T}^2}{|[\mathbf{v}]|_T} \leq \frac{1}{|J|}\|DG\|^2\frac{\|\hat{\mathbf{v}}\|_{0,\hat{T}}^2}{|[\hat{\mathbf{v}}]|_{\hat{T}}},$$

and

$$\frac{|\hat{T}|^2}{|T|^2}\frac{\rho_T^2}{\hat{h}^2}\frac{\|\hat{\mathbf{v}}\|_{0,\hat{T}}^2}{|\hat{T}||[\hat{\mathbf{v}}]|_{\hat{T}}} \leq \frac{\|\mathbf{v}\|_{0,T}^2}{|T||[\mathbf{v}]|_T} \leq \frac{|\hat{T}|^2}{|T|^2}\frac{h_T^2}{\hat{\rho}^2}\frac{\|\hat{\mathbf{v}}\|_{0,\hat{T}}^2}{|\hat{T}||[\hat{\mathbf{v}}]|_{\hat{T}}},$$

regrouping and multiplying by h_E^4

$$\frac{\rho_T^2 h_E^4}{|T|^2}\frac{|\hat{T}|\|\hat{\mathbf{v}}\|_{0,\hat{T}}^2}{\hat{h}^2|[\hat{\mathbf{v}}]|_{\hat{T}}} \leq \frac{h_E^4\|\mathbf{v}\|_{0,T}^2}{|T||[\mathbf{v}]|_T} \leq \frac{h_T^2 h_E^4}{|T|^2}\frac{|\hat{T}|\|\hat{\mathbf{v}}\|_{0,\hat{T}}^2}{\hat{\rho}^2|[\hat{\mathbf{v}}]|_{\hat{T}}}$$

using norm equality

$$\frac{\rho_T^2 h_E^4}{|T|^2}\alpha_0(\hat{T})\frac{|\hat{T}|}{\hat{h}^2} \leq \frac{h_E^4\|\mathbf{v}\|_{0,T}^2}{|T||[\mathbf{v}]|_T} \leq \frac{h_T^2 h_E^4}{|T|^2}\alpha_1(\hat{T})\frac{|\hat{T}|}{\hat{\rho}^2}$$

or

$$\frac{\rho_T^2 h_E^4}{|T|^2}\hat{\alpha}_0 \leq \frac{h_E^4 \|\mathbf{v}\|_{0,T}^2}{|T||[\mathbf{v}]|_T} \leq \frac{h_T^2 h_E^4}{|T|^2}\hat{\alpha}_1,$$

where $\hat{\alpha}_0 = \alpha_0(\hat{T})\dfrac{|\hat{T}|}{\hat{h}^2}$ and $\hat{\alpha}_1 = \alpha_1(\hat{T})\dfrac{|\hat{T}|}{\hat{\rho}^2}$. To conclude it suffices to use the shape regularity of the family $\{\mathcal{T}_h : \ h \in \mathcal{H}\}$.

3.4.1 Local interpolation operators and error estimates

For the scalar function spaces

We denote by π_E, respectively $\tilde{\pi}_E$, the L^2-projection operator from $L^2(E)$ onto $\mathcal{M}_E$, respectively $\widetilde{\mathcal{M}}_E$:

$$\pi_E(q) = \frac{1}{|E|}\int_E q(x)dx \quad \forall E \in \mathcal{T}_E, \ \forall q \in L^2(E). \tag{3.4.2}$$

$$(\tilde{\pi}_E(q))_{|T} = \frac{1}{|T|}\int_T q(x)dx \quad \forall T \in \widetilde{\mathcal{T}}_E, \ \forall q \in L^2(E). \tag{3.4.3}$$

It is well known [7, 29] that if q is sufficiently regular then following approximation results holds :

$$\|q - \tilde{\pi}_E(q)\|_{0,E} \leq Ch|q|_{1,E} \quad \forall q \in H^1(E). \tag{3.4.4}$$

and

$$\|q - \pi_E(q)\|_{0,E} \leq Ch|q|_{1,E} \quad \forall q \in H^1(E). \tag{3.4.5}$$

For the vector function spaces

The Raviart-Thomas-Nedelec projection operator $\widetilde{\Pi}_E$ from $(H^1(E))^3$ onto $\widetilde{\mathcal{W}}_E$ is defined by

$$\int_{\widetilde{F}} \widetilde{\Pi}_E(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}_{\widetilde{F}}\, ds = \int_{\widetilde{F}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{\widetilde{F}}\, ds \quad \forall \widetilde{F} \in \widetilde{\mathcal{F}}_E, \ \forall \mathbf{v} \in (H^1(E))^3, \tag{3.4.6}$$

where for each $\widetilde{F} \in \widetilde{\mathcal{F}}_E$, $\mathbf{n}_{\widetilde{F}}$ is a unit vector normal to $\widetilde{F}$. It is known that [7]

$$\|\mathbf{v} - \widetilde{\Pi}_E(\mathbf{v})\|_{0,E} \leq Ch|\mathbf{v}|_{1,E} \quad \forall \mathbf{v} \in H^1(E)^3. \tag{3.4.7}$$

and that the interpolation operators $\widetilde{\Pi}_E$ and $\tilde{\pi}_E$ satisfy the property

$$\tilde{\pi}_E \text{div } \mathbf{v} = \text{div } \widetilde{\Pi}_E \mathbf{v} \quad \forall \mathbf{v} \in (H^1(E))^3 \tag{3.4.8}$$

so that

$$\|\text{div } (\mathbf{v} - \widetilde{\Pi}_E(\mathbf{v}))\|_{0,E} = \|\text{div } \mathbf{v} - \tilde{\pi}_E(\text{div } \mathbf{v})\| \leq Ch|\text{div } \mathbf{v}|_{1,E} \quad \forall \mathbf{v} \in H^1(E)^3. \tag{3.4.9}$$

Similarly one may define the interpolation operator $\widehat{\Pi}_E$ from $(H^1(E))^3$ onto $\widehat{\mathcal{W}}_E$ by

$$\int_{\widetilde{F}} \widehat{\Pi}_E(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}_{\widetilde{F}}\, ds = \int_{\widetilde{F}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{\widetilde{F}}\, ds \quad \forall \widetilde{F} \in \widetilde{\mathcal{F}}_E, \widetilde{F} \subset \partial E, \tag{3.4.10}$$

and the interpolation operator Π_E from $(H^1(E))^3$ onto $\mathcal{W}_E$ by

$$\int_F \Pi_E(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}_F\, ds = \int_F \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_F\, ds \quad \forall F \in \mathcal{F}_E. \tag{3.4.11}$$

One can show that

$$\pi_E \text{div } \mathbf{v} = \text{div } \widehat{\Pi}_E \mathbf{v} = \text{div } \Pi_E \mathbf{v} \quad \forall \mathbf{v} \in (H^1(E))^3 \tag{3.4.12}$$

so that, if $\mathbf{v}$ is sufficiently regular,

$$\begin{aligned} \|\text{div } (\mathbf{v} - \Pi_E(\mathbf{v}))\|_{0,E}^2 &= \|\text{div } (\mathbf{v} - \widehat{\Pi}_E(\mathbf{v}))\|_{0,E}^2 = \|\text{div } \mathbf{v} - \pi_E(\text{div } \mathbf{v})\|^2 \\ &\leq Ch^2 |\text{div } \mathbf{v}|_{1,E}^2, \quad \forall \mathbf{v} \in H^1(E)^3. \end{aligned} \tag{3.4.13}$$

We note that $\Pi_E(\mathbf{v})$ is also determined by :

$$\forall F \in \mathcal{F}_E \quad \int_F \Pi(\mathbf{v})_E \cdot \mathbf{n}_F ds = \sum_{j=1}^{2} \int_{\widetilde{F}_j} \widehat{\Pi}_E(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}_F \quad \text{where} \quad F = \widetilde{F}_1 \cup \widetilde{F}_2 \quad \text{with} \quad \widetilde{F}_1, \widetilde{F}_2 \in \widetilde{\mathcal{F}}_E.$$

To obtain an estimate for $\|\mathbf{v} - \Pi_E(\mathbf{v})\|_{0,E}$ we write

$$\|\mathbf{v} - \Pi_E(\mathbf{v})\|_{0,E}^2 \leq \|\mathbf{v} - \widetilde{\Pi}_E(\mathbf{v})\|_{0,E}^2 + \|\widetilde{\Pi}_E(\mathbf{v}) - \widehat{\Pi}_E(\mathbf{v})\|_{0,E}^2 + \|\widehat{\Pi}_E(\mathbf{v}) - \Pi_E(\mathbf{v})\|_{0,E}^2. \tag{3.4.14}$$

Since we have (3.4.7), there remains to estimate the last two terms in the right hand side.

First however, we number the faces of $F \in \mathcal{F}_E$ arbitrarily and then number the faces $\widetilde{F} \in \widetilde{\mathcal{F}}_E$ as follows : let $\widetilde{F}_i = T_i^E \cap T_5^E$ be the interior face of T_i^E, $i = 1, \cdots .4$, and let the remaining faces, the exterior faces, be numbered such that $F_i = \widetilde{F}_{2i+3} \cup \widetilde{F}_{2i+4}, i = 1, \cdots, 6$.

Recall that, for $i = 1, \cdots 16$, $\tilde{\omega}_i$ denotes the basis element of $\widetilde{\mathcal{W}}_E$ whose constant normal component on the face $\widetilde{F}_j$ is $\delta_{i,j}$ $j = 1, \cdots, 16$. Also for $i = 5, \cdots 16$, $\hat{\omega}_i$ denotes the basis element of $\widehat{\mathcal{W}}_E$ whose constant normal component on the face $\widetilde{F}_j$ is $\delta_{i,j}, j = 5, \cdots, 16$. And for $i = 1, \cdots 6$, ω_i denotes the basis element of $\mathcal{W}_E$ whose constant normal component on the face F_j is $\delta_{i,j}, j = 1, \cdots, 6$. Similarly we let χ_E be the constant function of value one on E, and for $j = 1, \cdots, 5$, let χ_j be the characteristic function of T_j^E defined on E. Then

we have

$$
\begin{aligned}
\widetilde{\Pi}_E\mathbf{v} &= \sum_{i=1}^{16} \tilde{\phi}_i\tilde{\omega}_i && \text{where} && \tilde{\phi}_i = \frac{1}{|\widetilde{F}_i|}\int_{\widetilde{F}_i} \widetilde{\Pi}_E\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}_{\widetilde{F}_i} &&= \frac{1}{|\widetilde{F}_i|}\int_{\widetilde{F}_i} \mathbf{v}\cdot\mathbf{n}_{\widetilde{F}_i}, && i = 1,\cdots,16 \\
\text{div } \widetilde{\Pi}_E\mathbf{v} &= \sum_{j=1}^{5} \tilde{\psi}_j\tilde{\chi}_j && \text{where} && \tilde{\psi}_j = \frac{1}{|\mathcal{T}_j|}\int_{\mathcal{T}_j} \text{div } \widetilde{\Pi}_E\mathbf{v} &&= \frac{1}{|\mathcal{T}_j|}\int_{\mathcal{T}_j} \text{div } \mathbf{v}, && j = 1,\cdots,5 \\
\widehat{\Pi}_E\mathbf{v} &= \sum_{i=5}^{16} \hat{\phi}_i\hat{\omega}_i && \text{where} && \hat{\phi}_i = \frac{1}{|\widetilde{F}_i|}\int_{\widetilde{F}_i} \widehat{\Pi}_E\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}_{\widetilde{F}_i} &&= \frac{1}{|\widetilde{F}_i|}\int_{\widetilde{F}_i} \mathbf{v}\cdot\mathbf{n}_{\widetilde{F}_i}, && i = 5,\cdots,16 \\
\text{div } \widehat{\Pi}_E\mathbf{v} &= \hat{\psi}\chi_E && \text{where} && \hat{\psi} = \frac{1}{|E|}\int_E \text{div } \widehat{\Pi}_E\mathbf{v} &&= \frac{1}{|E|}\int_E \text{div } \mathbf{v} \\
\Pi_E\mathbf{v} &= \sum_{i=1}^{6} \phi_i\omega_i && \text{where} && \phi_i = \frac{1}{|F_i|}\int_{F_i} \Pi_E\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}_{F_i} &&= \frac{1}{|F_i|}\int_{F_i} \mathbf{v}\cdot\mathbf{n}_{F_i}, && i = 1,\cdots,6 \\
\text{div } \Pi_E\mathbf{v} &= \psi\chi_E && \text{where} && \psi = \frac{1}{|E|}\int_E \text{div } \Pi_E\mathbf{v} &&= \frac{1}{|E|}\int_E \text{div } \mathbf{v}.
\end{aligned}
\tag{3.4.15}
$$

Also let

$$
\hat{\phi}_i = \frac{1}{|\widetilde{F}_i|}\int_{\widetilde{F}_i} \widehat{\Pi}_E\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}_{\widetilde{F}_i} \quad (\neq \frac{1}{|\widetilde{F}_i|}\int_{\widetilde{F}_i} \mathbf{v}\cdot\mathbf{n}_{\widetilde{F}_i}), \quad i = 1,\cdots,4.
$$

Note that

$$
\tilde{\phi}_i = \hat{\phi}_i,\ i = 5,\cdots,16, \quad \text{and that} \quad \hat{\psi} = \psi,
$$

but that

$$
\tilde{\phi}_i \neq \hat{\phi}_i,\ i = 1,\cdots,4.
$$

Since the normal components of the functions $\widehat{\Pi}_E\mathbf{v}$ and $\widetilde{\Pi}_E\mathbf{v}$ are the same on ∂E but may differ on the internal faces, we have

$$
\begin{aligned}
\int_{\partial T_j\setminus\widetilde{F}_j} \widetilde{\Pi}_E\mathbf{v}\cdot\mathbf{n} + \tilde{\phi}_j|\widetilde{F}_j| &= |T_j|\tilde{\psi}_j \qquad j = 1,\cdots,4 && (3.4.16)\\
-\sum_{j=1}^{4} \tilde{\phi}_j|\widetilde{F}_j| &= |T_5|\tilde{\psi}_5 \\
\int_{\partial T_j\setminus\widetilde{F}_j} \widehat{\Pi}_E\mathbf{v}\cdot\mathbf{n} + \hat{\phi}_j|\widetilde{F}_j| &= |T_j|\hat{\psi} \qquad j = 1,\cdots,4 && (3.4.17)\\
-\sum_{j=1}^{4} \hat{\phi}_j|\widetilde{F}_j| &= |T_5|\hat{\psi},
\end{aligned}
$$

and subtracting, we obtain

$$
\begin{aligned}
(\tilde{\phi}_j - \hat{\phi}_j)|\widetilde{F}_j| &= |T_j|(\tilde{\psi}_j - \hat{\psi}),\ j = 1,\cdots,4 && (3.4.18)\\
\sum_{j=1}^{4}(\tilde{\phi}_j - \hat{\phi}_j)|\widetilde{F}_j| &= |T_5|(\hat{\psi} - \tilde{\psi}_5).
\end{aligned}
$$

Now, to estimate the second term in the right hand side of (3.4.14) $\| \widetilde{\Pi}_E\mathbf{v} - \widehat{\Pi}_E\mathbf{v} \|_{0,E}^2$, we use the norm equivalence (3.4.1) together with (3.4.15) and (3.4.18) to obtain

$$
\begin{aligned}
\| \widetilde{\Pi}_E\mathbf{v} - \widehat{\Pi}_E\mathbf{v} \|_{0,E}^2 &= \sum_{j=1}^{5} \| \widetilde{\Pi}_E\mathbf{v} - \widehat{\Pi}_E\mathbf{v} \|_{0,T_j}^2 \\
&\leq \frac{\beta_1}{h_E^4} \sum_{j=1}^{5} |T_j||[\widetilde{\Pi}_E\mathbf{v} - \widehat{\Pi}_E\mathbf{v}]|_{T_j}^2 \\
&= \frac{\beta_1}{h_E^4} \{ \sum_{j=1}^{4} |T_j| (\int_{\partial T_j} |\widetilde{\Pi}_E\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_j} - \widehat{\Pi}_E\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_j}|)^2 \\
&\qquad + |T_5| (\int_{\partial T_5} |\widetilde{\Pi}_E\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_5} - \widehat{\Pi}_E\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_5}|)^2 \} \\
&= \frac{\beta_1}{h_E^4} \{ \sum_{j=1}^{4} |T_j||\tilde{\phi}_j - \hat{\phi}_j|^2 |\widetilde{F}_j|^2 + |T_5| (\sum_{j=1}^{4} |\tilde{\phi}_j - \hat{\phi}_j||\widetilde{F}_j|)^2 \} \\
&\leq \frac{\beta_1}{h_E^4} \{ \sum_{j=1}^{4} |T_j||\tilde{\psi}_j - \hat{\psi}|^2 |T_j|^2 + |T_5| (\sum_{j=1}^{4} |\tilde{\psi}_j - \hat{\psi}| \ |T_j|)^2 \} \\
&\leq \frac{\beta_1}{h_E^4} \{ \sum_{j=1}^{4} |T_j||\tilde{\psi}_j - \hat{\psi}|^2 |T_j|^2 + 4|T_5| \sum_{j=1}^{4} |\tilde{\psi}_j - \hat{\psi}|^2 |T_j|^2 \} \\
&\leq 5\beta_1 \frac{|E|^2}{h_E^4} \sum_{j=1}^{4} |\tilde{\psi}_j - \hat{\psi}|^2 |T_j| \\
&= 5\beta_1 \frac{|E|^2}{h_E^4} \sum_{j=1}^{4} |\frac{1}{|T_j|} \int_{T_j} \text{div } (\widetilde{\Pi}_E\mathbf{v} - \widehat{\Pi}_E\mathbf{v})|^2 |T_j| \\
&\leq 5\beta_1 \frac{|E|^2}{h_E^4} \sum_{j=1}^{4} \| \text{div } \widetilde{\Pi}_E\mathbf{v} - \widehat{\Pi}_E\hat{\mathbf{v}} \|_{0,T_j}^2 \\
&\leq 5\beta_1 h_E^2 \| \text{div } \widetilde{\Pi}_E\mathbf{v} - \text{div } \widehat{\Pi}_E\mathbf{v} \|_{0,E}^2 \\
&\leq 5\beta_1 h_E^2 \| \text{div } \widetilde{\Pi}_h\mathbf{v} - \text{div } \widehat{\Pi}_h\mathbf{v} \|_{0,E}^2 \\
&\leq 5\beta_1 h_E^2 \| \tilde{\pi}_h \text{div } \mathbf{v} - \pi_h \text{div } \mathbf{v} \|_{0,E}^2 \\
&\leq 5\beta_1 h_E^2 \| \tilde{\pi}_h \text{div } \mathbf{v} - \pi_h(\tilde{\pi}_h \text{div } \mathbf{v}) \|_{0,E}^2
\end{aligned}
$$

Since

$$
\begin{aligned}
\| (I - \pi_h)\tilde{\pi}_h \text{div } \mathbf{v} \|_0^2 &\leq 2 \| \tilde{\pi}_h \text{div } \mathbf{v} \|_0^2 + 2 \| \pi_h \tilde{\pi}_h \text{div } \mathbf{v} \|_0^2 \\
&\leq 4 \| \tilde{\pi}_h \text{div } \mathbf{v} \|_0^2
\end{aligned} \tag{3.4.19}
$$

We obtain

$$\begin{aligned} \| \widetilde{\Pi}_h \mathbf{v} - \widehat{\Pi}_h \mathbf{v} \|_{0,E}^2 &\leq 20\beta_1 h_E^2 \| \tilde{\pi}_h \text{div } \mathbf{v} \|_{0,E}^2 \\ &\leq 20\beta_1 h_E^2 \| \text{div } \mathbf{v} \|_{0,E}^2 . \end{aligned} \tag{3.4.20}$$

To estimate the third and final term $\| \widehat{\Pi}_E \mathbf{v} - \Pi_E \mathbf{v} \|_{0,E}$ of (3.4.14) we use the fact that for each exterior tetrahedra $T_j^E, \quad j = 1, \cdots, 4$

$$\text{div } (\widehat{\Pi}_E \mathbf{v} - \Pi_E \mathbf{v})_{|T_j^E} = 0 \text{ and } \int_{\partial T_j^E} (\widehat{\Pi}_E \mathbf{v} - \Pi_E \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}_{T_j^E} = 0, \quad j = 1, \cdots, 4. \tag{3.4.21}$$

Then for $\mathbf{v} = \widehat{\Pi}_E \mathbf{v} - \Pi_E \mathbf{v}$

$$\int_{\widetilde{F}_j} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_j^E} = - \int_{\partial T_j^E \setminus \widetilde{F}_j} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_j^E}, \quad j = 1, \cdots, 4$$

and

$$\int_{\widetilde{F}_j} |\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_j^E}| = | \int_{\widetilde{F}_j} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_j^E}| = | \int_{\partial T_j^E \setminus \widetilde{F}_j} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_j^E}| \leq \int_{\partial T_j^E \setminus \widetilde{F}_j} |\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_j^E}|, \quad j = 1, \cdots, 4$$

so we obtain that

$$\sum_{j=1}^{4} \int_{\widetilde{F}_j} |\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_j^E}| \leq \sum_{j=1}^{4} \int_{\partial T_j^E \setminus \widetilde{F}_j} |\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_j^E}| = \sum_{i=5}^{16} \int_{\widetilde{F}_i} |\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{\widetilde{F}_i}|. \tag{3.4.22}$$

Then we have

$$
\begin{aligned}
\| \widehat{\Pi}_E \mathbf{v} - \Pi_E \mathbf{v} \|_{0,E}^2 &= \sum_{j=1}^{5} \| \widehat{\Pi}_E \mathbf{v} - \Pi_E \mathbf{v} \|_{0,T_j}^2 \\
&\leq \frac{\beta_1}{h_E^4} \sum_{j=1}^{5} |T_j| |[\widehat{\Pi}_E \mathbf{v} - \Pi_E \mathbf{v}]|_{\partial T_j}^2 \\
&= \frac{\beta_1}{h_E^4} \{ \sum_{j=1}^{4} |T_j| (\int_{\partial T_j} |\widehat{\Pi}_E \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_j} - \Pi_E \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_j}|)^2 \\
&\qquad + |T_5| (\int_{\partial T_5} |\widehat{\Pi}_E \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_5} - \Pi_E \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_5}|)^2 \} \\
&\leq \frac{\beta_1}{h_E^4} |E| \{ \sum_{j=1}^{4} (\int_{\partial T_j} |\widehat{\Pi}_E \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_j} - \Pi_E \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_j}|)^2 \\
&\qquad + (\int_{\partial T_5} |\widehat{\Pi}_E \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_5} - \Pi_E \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{T_5}|)^2 \} \\
&\leq \frac{\beta_1}{h_E^4} |E| \{ 8 \sum_{i=1}^{4} (\int_{\widetilde{F}_i} |\widehat{\Pi}_E \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{\widetilde{F}_i} - \Pi_E \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{\widetilde{F}_i}|)^2 \\
&\qquad + 4 \sum_{i=5}^{16} (\int_{\widetilde{F}_i} |\widehat{\Pi}_E \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{\widetilde{F}_i} - \Pi_E \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{\widetilde{F}_i}|)^2 \} \\
&\leq \frac{\beta_1}{h_E^4} |E| \{ 12 \sum_{i=5}^{16} (\int_{\widetilde{F}_i} |(\widehat{\Pi}_E \mathbf{v} - \Pi_E \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}_{\widetilde{F}_i}|)^2 \} \\
&\leq \frac{\beta_1}{h_E^4} |E| \{ 12 \sum_{i=5}^{16} |\widetilde{F}_i| \, \| (\widehat{\Pi}_E \mathbf{v} - \Pi_E \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}_{\widetilde{F}_i} \|_{0,\widetilde{F}_i}^2 \}. \qquad (3.4.23)
\end{aligned}
$$

We will now use the approximation properties

$$
\begin{aligned}
\| (\widehat{\Pi}_E \mathbf{v} - \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}_{\widetilde{F}_i} \|_{0,\widetilde{F}_i} &\leq Ch \| \mathbf{v} \|_{1,\widetilde{F}_i}, \\
\| (\Pi_E \mathbf{v} - \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}_{\widetilde{F}_i} \|_{0,\widetilde{F}_i} &\leq Ch \| \mathbf{v} \|_{1,\widetilde{F}_i},
\end{aligned}
$$

and the trace theorem

$$
\| \mathbf{v} \|_{1,\widetilde{F}_i} \leq C \| \mathbf{v} \|_{3/2,E} .
$$

Then

$$
\begin{aligned}
\| (\widehat{\Pi}_E \mathbf{v} - \Pi_E \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}_{\widetilde{F}_i} \|_{0,\widetilde{F}_i}^2 &\leq 2(\| (\widehat{\Pi}_E \mathbf{v} - \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}_{\widetilde{F}_i} \|_{0,\widetilde{F}_i}^2 + \| (\Pi_E \mathbf{v} - \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}_{\widetilde{F}_i} \|_{0,\widetilde{F}_i}^2) \\
&\leq Ch^2 \| \mathbf{v} \|_{3/2,E}^2 .
\end{aligned}
$$

Therefore we obtain

$$
\| \widehat{\Pi}_E \mathbf{v} - \Pi_E \mathbf{v} \|_{0,E}^2 \leq Ch^3 \| \mathbf{v} \|_{3/2,E}^2 . \qquad (3.4.24)
$$

Now summing up the three terms (3.4.7), (3.4.20) and (3.4.24) we obtain

$$\begin{aligned} \| \mathbf{v} - \Pi_E \mathbf{v} \|_{0,E}^2 &= \| \mathbf{v} - \widetilde{\Pi}_E \mathbf{v} \|_{0,E}^2 + \| \widetilde{\Pi}_E \mathbf{v} - \widehat{\Pi}_E \mathbf{v} \|_{0,E}^2 \\ &\qquad + \| \widehat{\Pi}_E \mathbf{v} - \Pi_E \mathbf{v} \|_{0,E}^2 \\ &\leq Ch^2 \left(|\mathbf{v}|_{1,E}^2 + \| \operatorname{div} \mathbf{v} \|_{0,E}^2 + \| \mathbf{v} \|_{3/2,E}^2 \right) \\ &\leq Ch^2 \| \mathbf{v} \|_{3/2,E}^2 \end{aligned} \tag{3.4.25}$$

and by using (3.4.13) we obtain that

$$\|\mathbf{v} - \Pi_E(\mathbf{v})\|_{H(\operatorname{div};E)}^2 \leq Ch^2 (\| \operatorname{div} \mathbf{v} \|_{1,E}^2 + \| \mathbf{v} \|_{3/2,E}^2) \tag{3.4.26}$$

3.4.2 Global interpolation error estimates

We define π_h to be the L^2- projection operator from $L^2(\Omega)$ onto $\mathcal{M}_h$:

$$\pi_h(q)(x) = \pi_E(q)(x) \quad if \quad x \in E, \tag{3.4.27}$$

we also define the interpolation operator Π_h from $(H^1(\Omega))^3$ onto $\mathcal{W}_h$ by

$$\Pi_h(\mathbf{v})(x) = \Pi_E(\mathbf{v})(x) \quad if \quad x \in E. \tag{3.4.28}$$

By summing (3.4.5) over the cells $E \in \mathcal{T}_h$ we obtain

$$\|q - \pi_h(q)\|_{0,\Omega}^2 \leq Ch^2 |q|_{1,\Omega}^2 \tag{3.4.29}$$

Then we obtain by summing (3.4.26) over all the cells E

$$\|\mathbf{v} - \Pi_h(\mathbf{v})\|_{H(\operatorname{div};\Omega)}^2 \leq Ch^2 (\| \operatorname{div} \mathbf{v} \|_{1,\Omega}^2 + \| \mathbf{v} \|_{3/2,\Omega}^2). \tag{3.4.30}$$

Finally, we obtain that approximation errors are of order one :

$$\|q - \pi_h(q)\|_{0,\Omega}^2 + \|\mathbf{v} - \Pi_h(\mathbf{v})\|_{H(\operatorname{div};\Omega)}^2 \leq Ch^2 \left(|q|_{1,\Omega}^2 + \| \operatorname{div} \mathbf{v} \|_{1,\Omega}^2 + \| \mathbf{v} \|_{3/2,\Omega}^2 \right) \tag{3.4.31}$$

3.5 Numerical experiment

First we present numerical convergence results for the analytical solution

$$p = sin(\pi x)sin(\pi y)sin(\pi z) + x(1-x)y^2(1-y)^2z(1-z)$$

on meshes which are deformations of a uniform cubic mesh $n \times n \times n$ for $n = 4, 8, 16, 32, 64$. The deformation consists in moving the vertices in the horizontal plane in order to obtain for the cells the form of truncated pyramids as shown in Figure 3.5.

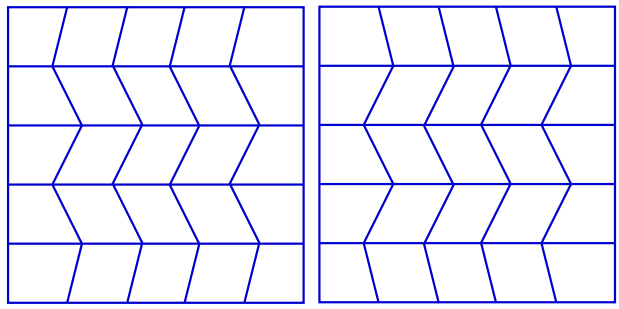

FIG. 3.5.1 – Sections $z = kh_z$, $z = (k+1)h_z$ in a deformed mesh.

Figure 3.5.2 shows $8 \times 8 \times 8$ deformed meshes with such increasing deformations.

Tables 3.5, 3.5, 3.5, 3.5 show errors for the pressure and the velocity using respectively the Raviart-Thomas-Nédélec (RTN) and the Kuznetsov-Repin (KR) mixed finite elements. Actually we are showing the errors between the calculated solution $(p_h, \mathbf{u}_h)$ and the interpolates of the analyticale solution $(\pi_h(p), \Pi_h(\mathbf{u}))$ in order to not have to use integration formulas in the calculation of the errors. These errors usually show superconvergence as we can see for the cubic meshes – order 2 instead of 1 for both pressure and velocity.

	RTN finite element				KR finite element			
n	$\|\| p_h - \pi_h p \|\|_{0,\Omega}$		$\|\| \mathbf{u}_h - \Pi_h \mathbf{u} \|\|_{0,\Omega}$		$\|\| p_h - \pi_h p \|\|_{0,\Omega}$		$\|\| \mathbf{u}_h - \Pi_h \mathbf{u} \|\|_{0,\Omega}$	
	error	rate	error	rate	error	rate	error	rate
4	0.0164		0.0011		0.0164		0.0012	
8	0.0044	1.88	0.0002	2.15	0.0044	1.88	0.0003	2.06
16	0.0011	1.97	6.0e-5	2.00	0.0011	1.97	7.2e-5	1.97
32	0.0003	1.99	1.5e-5	2.00	0.0003	1.99	1.8e-5	2.00
64	7.1e-5	2.00	3.8e-6	1.98	7.1e-5	2.00	4.5e-6	2.00

TAB. 3.1 – Pressure and velocity errors for the RTN and the KR mixed finite elements on the sequence of cubic meshes.

These tables confirm theoretical results stating that the RTN method is not converging on general hexahedrons while the KR method is. Note that the order of convergence for

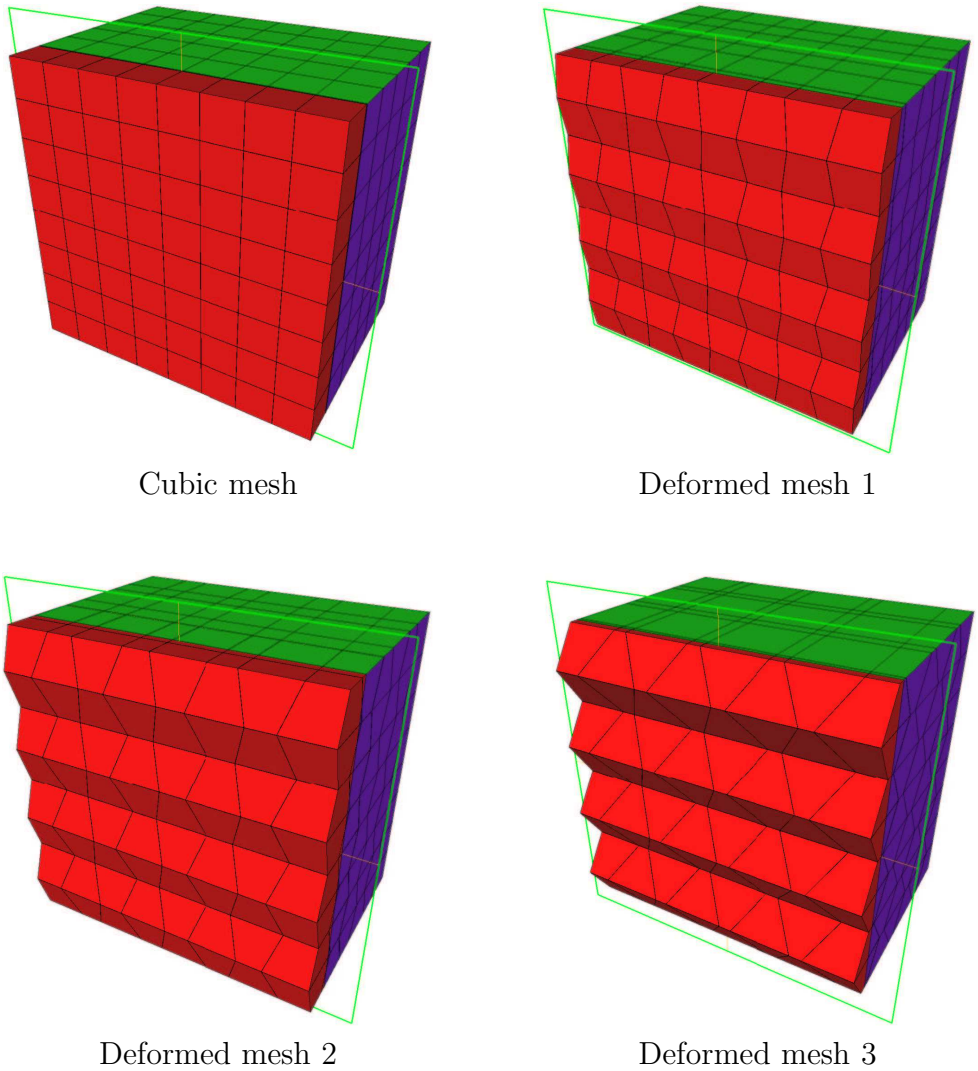

FIG. 3.5.2 – An 8× 8 × 8 cubic mesh with 3 deformed meshes with increasing deformation from this cubic mesh.

	RTN finite element				KR finite element			
n	$\|\| p_h - \pi_h p \|\|_{0,\Omega}$ error	rate	$\|\| \mathbf{u}_h - \Pi_h \mathbf{u} \|\|_{0,\Omega}$ error	rate	$\|\| p_h - \pi_h p \|\|_{0,\Omega}$ error	rate	$\|\| \mathbf{u}_h - \Pi_h \mathbf{u} \|\|_{0,\Omega}$ error	rate
4	0.0172		0.0788		0.0161		0.0395	
8	0.0056	1.6	0.0405	0.96	0.0042	1.92	0.0132	1.58
16	0.0029	0.62	0.0263	0.62	0.0011	1.99	0.0042	1.64
32	0.0024	0.3	0.0234	0.16	2.6e-4	2.	0.0014	1.62
64	0.0023	0.08	0.0229	0.03	6.5e-5	2.01	4.6e-4	1.32

TAB. 3.2 – Pressure and velocity errors for the RTN and the KR mixed finite elements on the sequence of deformed meshes 1.

	RTN finite element				KR finite element			
n	$\|\| p_h - \pi_h p \|\|_{0,\Omega}$ error	order	$\|\| \mathbf{u}_h - \Pi_h \mathbf{u} \|\|_{0,\Omega}$ error	rate	$\|\| p_h - \pi_h p \|\|_{0,\Omega}$ error	rate	$\|\| \mathbf{u}_h - \Pi_h \mathbf{u} \|\|_{0,\Omega}$ error	rate
4	0.0206		0.1773		0.0152		0.0785	
8	0.0119	0.79	0.1160	0.61	0.0036	2.07	0.0265	1.56
16	0.0100	0.25	0.0994	0.22	8.3e-4	2.10	0.0088	1.57
32	0.0095	0.08	0.0967	0.04	2.0e-5	2.06	0.0032	1.48
64	0.0093	0.02	0.0961	0.01	4.9e-5	2.03	0.0013	1.32

TAB. 3.3 – Pressure and velocity errors for the RTN and the KR mixed finite elements on the sequence of deformed meshes 2

	RTN finite element				KR finite element			
n	$\|\| p_h - \pi_h p \|\|_{0,\Omega}$ error	rate	$\|\| \mathbf{u}_h - \Pi_h \mathbf{u} \|\|_{0,\Omega}$ error	rate	$\|\| p_h - \pi_h p \|\|_{0,\Omega}$ error	rate	$\|\| \mathbf{u}_h - \Pi_h \mathbf{u} \|\|_{0,\Omega}$ error	rate
4	0.04736		0.5234		0.0135		0.1671	
8	0.04798	-0.01	0.4770	0.13	0.0023	2.55	0.0699	1.25
16	0.04588	0.06	0.4727	0.01	3.7e-4	2.68	0.0319	1.12
32	0.04487	0.03	0.4733	-0.00	7.0e-5	2.36	0.0155	1.04
64	0.04457	0.01	0.4731	5.e-4	1.6e-5	2.12	7.7e-3	1.01

TAB. 3.4 – Pressure and velocity errors for the RTN and the KR mixed finite elements on the sequence of deformed meshes 3

the velocity is decreasing with the deformation. However, even for deformed meshes 3 which correspond to very large deformations, convergence is maintained. This shows the robustness of the method.

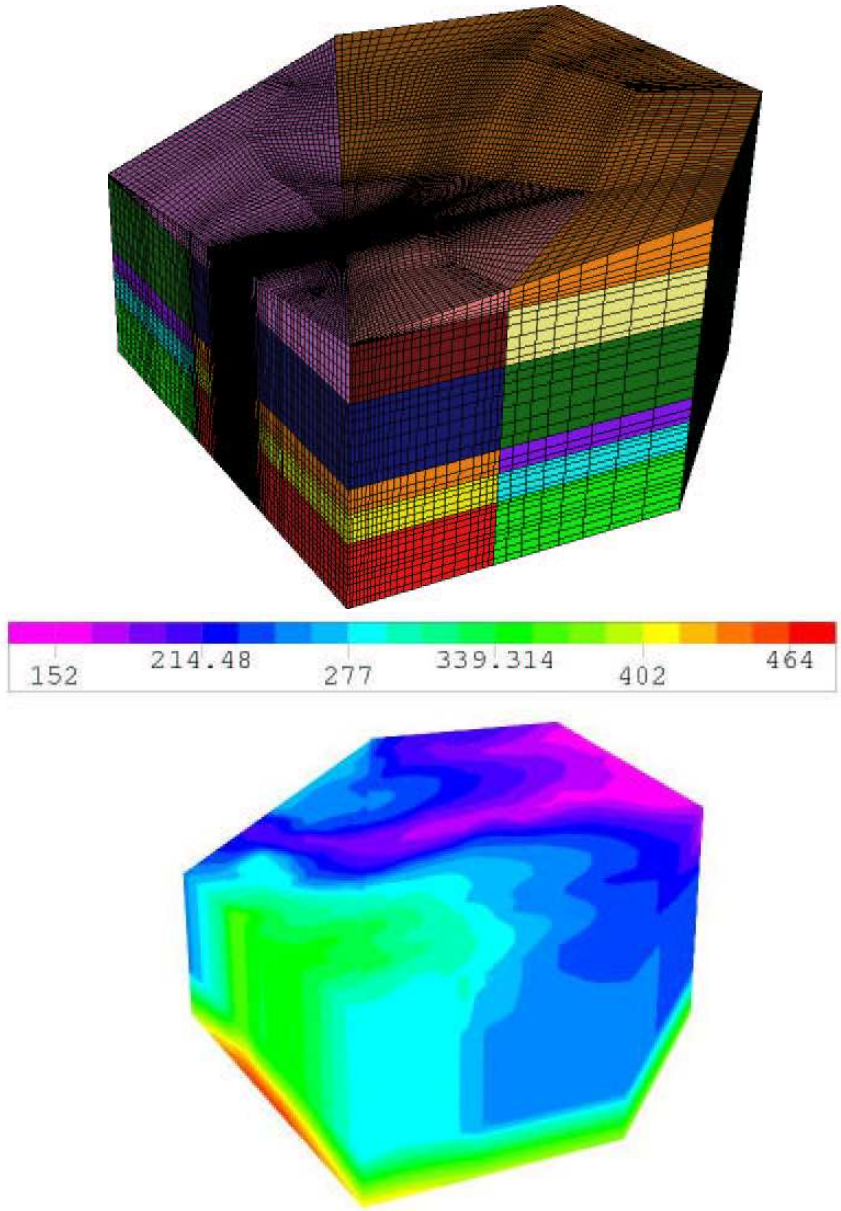

Fig. 3.5.3 – The domain of calculation (top) and the calculated pressure field (bottom)

Once the Kuznetsov-Repin mixed finite element method was proven to be convergent, it was used to calculate the pressure and velocity field around a nuclear waste disposal. Figure 3.5.3 shows the domain of calculation on the top. It is made up of 13 geological subdomains with permeabilities changing with up to three orders of magnitude from one

subdomain to the other.

The permeabilities of the geological layers are defined in Table 2.2. These permeabilities have two principal characteristics : on the one hand, the values are extremely small, and on the other hand they are particularly heterogeneous. In Figure 3.5.3 top the mesh is shown. It was provided by engineers from Andra (http ://www.andra.fr) and is made of about 500,000 hexahedrons which for the most part are not parallelepipeds. On the bottom in Figure 3.5.3 the calculated pressure field calculated with KR mixed finite elements is shown. Both figures are blown up 30 times in the z-direction in order to visualize the results.

However, since the Darcy velocity is actually the important quantity that is needed for the transport, we show in Fig. 3.5.4 the norm of the velocity on an horizontal cross section, the velocity calculated with RTN finite elements (left) and KR mixed finite elements (right). As one can observe, there are significant differences in the calculated velocity. In particular the norm of the velocity calculated with RTN mixed finite elements show a rough behavior which is clearly unphysical for regions with constant permeabilities. This will necessarily have a strong impact when this velocity will be used in transport calculations.

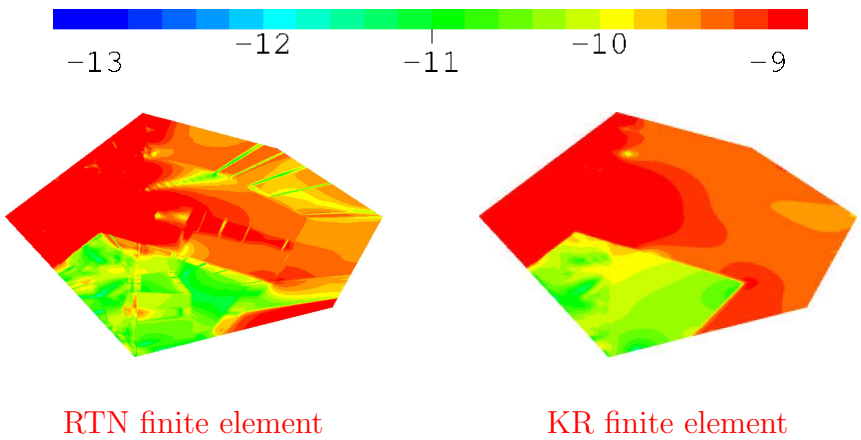

Fig. 3.5.4 – Horizontal cross section of the norm of the Darcy velocity for the RTN (left) and KR (right) mixed finite elements.

3.6 Conclusion

We constructed a new mixed finite element for general hexahedral grids based on Kuznetsov's and Repin's general procedure for composite mixed finite elements. This new mixed finite element provides an elegant and simple way to implement mixed finite elements for general hexahedral discretizations. Theoretical convergence was proven and numerical convergence was observed. The method was applied to the calculation of a Darcy velocity which will be used for the simulation of the transport of radionucides around a storage site.

We pointout, however, that this element is not adapted to general distorted cubes with non-planar faces.

Chapitre 4

Raffinement en temps par sous-domaine pour un problème d'advection en milieu poreux

4.1 Introduction

L'étude des écoulements et du transport dans les milieux poreux trouve principalement deux types d'applications, l'hydrogéologie et la simulation de réservoirs d'hydrocarbures. Pour ce qui est des problèmes d'environnement dans le sous-sol, ils concernent principalement les ressources en eau, qui sont aujourd'hui de plus en plus menacées du fait des pollutions ménagères, industrielles et agricoles et d'une consommation intensive. D'autre part le choix de sites de stockage de déchets nécessite de nombreuses études de fiabilité. En particulier le stockage de déchets radioactifs, notamment en couche géologique profonde, est envisagé dans certains pays industrialisés (dont la France) et parfois même déjà mis en œuvre (comme aux Etats-Unis).
L'hydrogéologie est donc un sujet de première importance pour une société comme la nôtre : elle doit pouvoir gérer convenablement les ressources en eau potable et assurer des niveaux de pollution les plus bas possibles à ses habitants. C'est pour ces raisons qu'il est nécessaire de se donner les moyens de prévoir correctement les comportements des écoulements d'eau et le transport de contaminant dans le sous-sol.

Concernant les problèmes de gisements d'hydrocarbures, la volonté constante des industriels d'augmenter les rendements des réservoirs pétroliers, liée en partie à l'épuisement des ressources en hydrocarbures de la planète, nécessite également des efforts importants de modélisation des écoulements de fluide en sous-sol.

Tous ces problèmes conduisent à de nombreux modèles correspondant à diverses situations physiques : écoulements monophasiques, multiphasiques, réactifs, milieux fracturés, modèles de puits, etc. La modélisation numérique joue dans ces domaines un rôle fondamental car les expérimentations en sous-sol sont coûteuses et peuvent ne pas être réalisables. Par exemple, les échelles d'étude pour le transport de contaminants est typiquement de

l'ordre de la dizaine de kilomètres voire de la centaine de kilomètres sur des dizaines ou des centaines de milliers d'années. Dans ces conditions, de nombreux problèmes de modélisation et d'ordre purement numérique apparaissent. Notamment, la prise en compte des hétérogénéités dans le sous-sol est une des difficultés principales de l'écoulement et du transport souterrain.

Les hétérogénéités se traduisent par des discontinuités dans les coefficients du système d'équations au passage d'un type de roche à l'autre. Cependant certaines quantités physiques restent continues : la vitesse de Darcy, la pression et les flux de contaminants. Pour un exemple d'une telle situation, citons en particulier [3] concernant les déchets nucléaires.

Les simulations du transport des contaminants dans des situations complexes peuvent conduire à des temps de calcul très importants. Par ailleurs dans des milieux hétérogènes les échelles de temps peuvent varier de façon considérable d'une région à l'autre du domaine de calcul. Afin d'économiser du temps de calcul, nous présentons dans cet article une méthode de discrétisation en temps telle que des pas de temps différents sont utilisés dans différents sous-domaines en espace de sorte qu'ils s'accordent le mieux possible à l'échelle de temps du sous-domaine considéré. La discrétisation locale en temps appliquée aux lois de conservation en a déjà été proposée par Stanley Osher et Richard Sanders [54] pour un shéma volumes finis. Plus récemment Clint Dawson et Robert Kirby [15, 37] ont étendu la méthode au cas de schémas d'ordre plus précis que le schéma d'Euler d'ordre 1.

Le couplage de différentes discrétisation en temps a été aussi souvent étudié à partir du point de vue du parallélisme [27] en couplage fluide-structure [60, 61]. D'autres techniques de raffinement en temps ont été développées dans [55, 23]. Un point de vue de décomposition de domaine espace-temps est présenté dans [42]. Nous nous proposons dans cet article de traiter le cas d'un problème d'advection, prototype d'une situation commune en hydrogéologie.

Soit Ω un ouvert de $\mathbb{R}^2$ de frontière $\Gamma = \partial\Omega$ et soit $\mathbf{n}_\Gamma$ la normale extérieure à Ω. On modélise le transport d'un contaminant en milieu poreux par l'équation de conservation.

$$\begin{aligned} \Phi\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}c) &= 0 \quad \text{dans } \Omega\ , \\ c(.,t) &= 1 \quad \text{sur} \quad \Gamma_- = \{(x,y) \in \partial\Omega \quad | \quad \mathbf{u}\cdot\mathbf{n}_\Gamma < 0\}, \\ c(.,0) &= 0 \quad \text{dans } \Omega\ . \end{aligned} \tag{4.1.1}$$

c est la concentration du contaminant dissous dans l'eau, Φ la porosité supposée égale à 1 dans la suite, $t \in [0,T]$, et Γ_- représente la frontière amont de Ω par rapport à $\mathbf{u}$, la vitesse de Darcy de l'eau. Celle-ci est solution d'un problème d'écoulement résolu auparavant :

$$\begin{aligned} &\operatorname{div}\mathbf{u} = 0, && \mathbf{u} = -\frac{K}{\mu}\vec{\nabla}p \\ &\mathbf{u}\cdot\mathbf{n} = q_d \quad \text{sur} \quad \Gamma_N, && p = p_d \quad \text{sur} \quad \Gamma_D \end{aligned}$$

où K est la perméabilité du milieu poreux, μ la viscosité du fluide, p la pression dans le fluide et, Γ_N et Γ_D sont les parties de Γ où une condition de Neumann et une condition de Dirichlet sont imposées, $\Gamma = \Gamma_N \cup \Gamma_D$.

Dans la section qui suit on présente le schéma décentré amont d'ordre 1. Dans la section 3 on divise le domaine Ω en sous-domaines et on définit comment utiliser des pas de temps différents dans chaque sous-domaine. Enfin dans la section 4 on présente des résultats numériques.

4.2 Discrétisation avec utilisation d'un pas de temps unique

Dans la suite, pour simplifier les notations, on suppose que $\Omega =]a, b[\times]d, e[$ est un ouvert rectangulaire. Soit $\mathcal{T}_h$ une subdivision de Ω en rectangles $T_{j,k}$: $\Omega = (T_{j,k})_{j,k}$.
On discrétise l'intervalle $[a, b]$ en sous intervalles $[x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]$, $j = 1, .., N_x$ et l'intervalle $[d, e]$ en sous intervalles $[y_{k-1/2}, y_{k+1/2}]$, $k = 1, .., N_y$ tels que

$$\begin{array}{ll} x_{1/2} = a \leq ... \leq x_j \leq ... \leq b = x_{N_x+1/2}, & h_x = x_{j+1/2} - x_{j-1/2}, \\ y_{1/2} = c \leq ... \leq y_k \leq ... \leq d = y_{N_y+1/2}, & h_y = y_{k+1/2} - y_{k-1/2}. \end{array}$$

Les notations utilisées pour la discrétisation en espace sont représentées sur la figure 4.2.1.

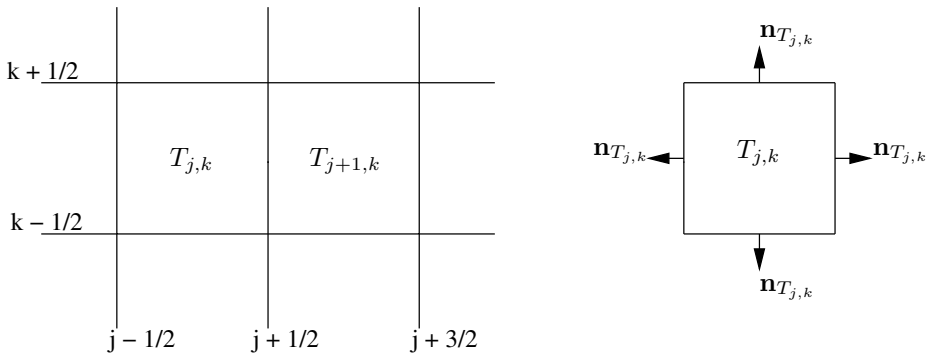

FIG. 4.2.1 – Notations utilisées pour les normales et les arêtes dans les deux mailles $T_{j,k}$ et $T_{j+1,k}$

L'intervalle de temps $[0, T]$ est discrétisé en N_t sous intervalles $[t_n, t_{n+1}]$ tels que

$$0 = t_0 \leq ... \leq t_n \leq ... \leq t_N = T, \quad \Delta t = t_{n+1} - t_n.$$

On approche c par une fonction constante par morceaux en temps et en espace : $c^n_{j,k}$ représente une approximation de la valeur moyenne de la concentration dans la maille $T_{j,k}$ à l'instant $n\Delta t$. $c^{n,*}$ est la valeur amont de la concentration sur chaque arête de la maille, que nous définissons un peu plus loin, $\mathbf{n}_{T_{j,k}}$ est la normale extérieure à la maille $T_{j,k}$.

Nous notons les normales aux arêtes verticales et horizontales respectivement

$$\mathbf{n}_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{n}_y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Nous introduisons les débits d'eau à travers les arêtes de la discrétisation

$$\begin{array}{l}(Q_x)_{j+1/2,k} = \int_{A_{j+1/2,k}} \mathbf{u}\cdot\mathbf{n}_x, \quad 0 \le j \le N_x, \quad 1 \le k \le N_y \\ (Q_y)_{j,k+1/2} = \int_{A_{j,k+1/2}} \mathbf{u}\cdot\mathbf{n}_y, \quad 1 \le j \le N_x, \quad 0 \le k \le N_y,\end{array}$$

où $A_{j+1/2,k}$ est l'arête verticale interface entre les mailles $T_{j,k}$ et $T_{j+1,k}$, et $A_{j,k+1/2}$ est l'arête horizontale interface entre les mailles $T_{j,k}$ et $T_{j,k+1}$.
La concentration $c^{n,*}$ est la concentration amont définie par

$$\begin{array}{lll} c^{n,*}_{j+1/2,k} = c^n_{j,k} & & (Q_x)_{j+1/2,k} \ge 0 \\ c^{n,*}_{j+1/2,k} = c^n_{j+1,k} & \text{si} & (Q_x)_{j+1/2,k} < 0 \end{array}$$

$$\begin{array}{lll} c^{n,*}_{j,k+1/2} = c^n_{j,k} & & (Q_y)_{j,k+1/2} \ge 0 \\ c^{n,*}_{j,k+1/2} = c^n_{j,k+1} & \text{si} & (Q_y)_{j,k+1/2} < 0. \end{array}$$

Avec ces notations, le schéma d'Euler décentré amont explicite s'écrit

$$\begin{aligned} c^{n+1}_{j,k} = c^n_{j,k} - \frac{\Delta t}{h_x h_y}[\ & (Q_x)_{j+1/2,k}\, c^{n,*}_{j+1/2,k} + (Q_y)_{j,k+1/2}\, c^{n,*}_{j,k+1/2} \\ & -(Q_x)_{j-1/2,k}\, c^{n,*}_{j-1/2,k} - (Q_y)_{j,k-1/2}\, c^{n,*}_{j,k-1/2}]. \end{aligned}$$

et le schéma d'Euler décentré amont implicite s'écrit

$$\begin{aligned} c^{n+1}_{j,k} + \frac{\Delta t}{h_x h_y}[\ & (Q_x)_{j+1/2,k}\, c^{n+1,*}_{j+1/2,k} + (Q_y)_{j,k+1/2}\, c^{n+1,*}_{j,k+1/2} \\ & -(Q_x)_{j-1/2,k}\, c^{n+1,*}_{j-1/2,k} - (Q_y)_{j,k-1/2}\, c^{n+1,*}_{j,k-1/2}] = c^n_{j,k}. \end{aligned}$$

Pour les exemples qui vont suivre on va supposer avoir un champ de vitesse tel que $Q_x \cdot \mathbf{n}_x > 0$ et $Q_y \cdot \mathbf{n}_y > 0$, comme par exemple sur la figure 4.2.2.

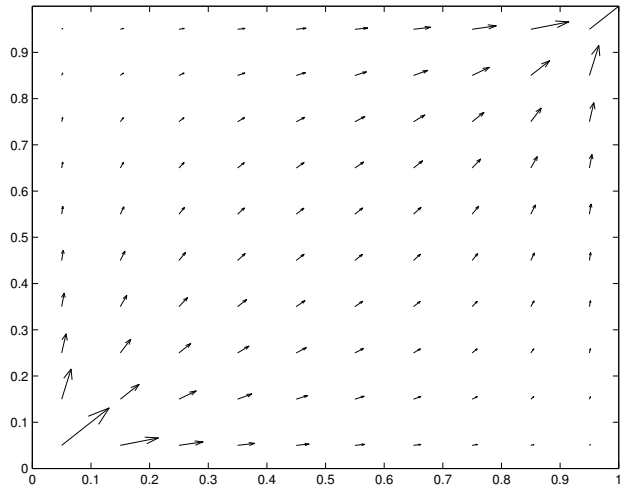

FIG. 4.2.2 – Vitesse de Darcy dans un domaine de perméabilité constante ($\mathbf{u}\cdot\mathbf{n}_x > 0, \mathbf{u}\cdot\mathbf{n}_y > 0$)

Alors les concentrations amont sont

$$c^{n,*}_{j+1/2,k} = c^n_{j,k},\ c^{n,*}_{j-1/2,k} = c^n_{j-1,k},\ c^{n,*}_{j,k+1/2} = c^n_{j,k},\ c^{n,*}_{j,k-1/2} = c^n_{j,k-1}.$$

Dans ce cas le schéma explicite s'écrit maintenant

$$\begin{aligned} c^{n+1}_{j,k} &= c^n_{j,k}(1 - \frac{\Delta t}{h_x h_y}((Q_x)_{j+1/2,k} + (Q_y)_{j,k+1/2})) + \\ & \quad c^n_{j-1,k}\frac{\Delta t}{h_x h_y}(Q_x)_{j-1/2,k} + c^n_{j,k-1}\frac{\Delta t}{h_x h_y}(Q_y)_{j,k-1/2}, \end{aligned} \tag{4.2.1}$$

et le schéma implicite

$$\begin{aligned} & [1 + \frac{\Delta t}{h_x h_y}((Q_x)_{j+1/2,k} + (Q_y)_{j,k+1/2})]c^{n+1}_{j,k} \\ & -\frac{\Delta t}{h_x h_y}(Q_x)_{j-1/2,k}\, c^{n+1}_{j-1,k} - \frac{\Delta t}{h_x h_y}(Q_y)_{j,k-1/2}\, c^{n+1}_{j,k-1} = c^n_{j,k}. \end{aligned} \tag{4.2.2}$$

Le schéma implicite est inconditionnellement stable mais le schéma explicite est stable si et seulement si les pas de discrétisation en temps et en espace satisfont la condition CFL[1]

$$\frac{\Delta t}{h_x h_y} \leq \frac{1}{\max\limits_{1\leq j\leq N_x, 1\leq k\leq N_y}[(Q_y)_{j,k-1/2} + (Q_x)_{j-1/2,k}]}.$$

La condition CFL est écrite sous cette forme inhabituelle car (Q_x) et (Q_y) sont ici des débits à travers les arêtes et non pas des flux.

4.3 Utilisation de raffinement en temps par sous-domaines

4.3.1 Motivation

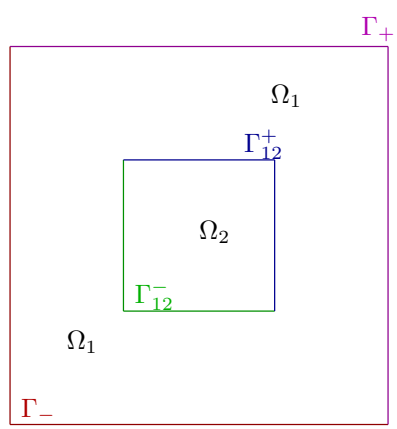

FIG. 4.3.1 – partition du domaine : définition des sous domaines et des interfaces : $\Gamma_{12} = \Gamma^+_{12} \cup \Gamma^-_{12}$ et $\Gamma = \Gamma_+ \cup \Gamma_-$

Considérons maintenant un milieu poreux hétérogène caractérisé par une variation de perméabilité. Le domaine carré Ω est divisé en deux sous-domaines Ω_1 et Ω_2 de perméabilités K_1 et K_2 différentes (voir figure 4.5.2). On suppose que $K_1 \geq K_2$. Dans un milieu à forte perméabilité le fluide a tendance à circuler rapidement, alors que dans un milieu peu perméable le fluide se déplace lentement.

Dans la suite on va montrer comment utiliser des pas de temps Δt_l, $l = 1, 2$, différents dans chacun des sous-domaines Ω_l, ces pas de temps étant déterminés par les conditions CFL associées à ces sous-domaines. La condition CFL implique que, pour une grille en espace donnée, le pas de temps est inversement proportionnel à la vitesse de Darcy.

Or on constate que la vitesse du fluide peut varier de façon importante : le fluide a tendance à aller plus vite quand il passe par une couche géologique de perméabilité importante et à aller moins vite lorsqu'il traverse une couche peu perméable. La figure 4.3.2 montre un exemple de variation de la vitesse en prenant $K_1 = 100$ et $K_2 = 1$. Dans cet exemple la vitesse de Darcy varie dans un rapport de 1 à 0.0035.

Même dans le cas où le domaine est homogène, suivant le problème considéré, la vitesse peut varier de façon importante. Ainsi sur la figure 4.2.2 la vitesse varie dans un rapport de 1 à 0.0043. Ceci est dû à la présence de grandes vitesses près de l'entrée et de la sortie du domaine.

L'objectif est en fait de découper le domaine en sous-domaines où la vitesse de Darcy ne varie pas de façon trop importante.

Notons néanmoins que les sous-domaines choisis de la sorte ne coïncident pas nécessairement avec les sous-domaines correspondant aux hétérogénéités. Ainsi, sur la figure 4.3.3, où nous avons inversé les valeurs de la perméabilité par rapport à la figure 4.3.2, soit $K_1 = 1$ et $K_2 = 100$, les vitesses maximales dans Ω_1 et Ω_2 sont du même ordre de grandeur.

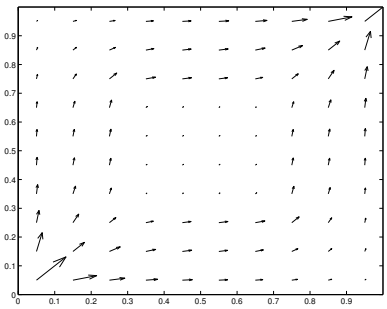

FIG. 4.3.2 – La vitesse du fluide dans le cas où $K_1 = 100$ et $K_2 = 1$

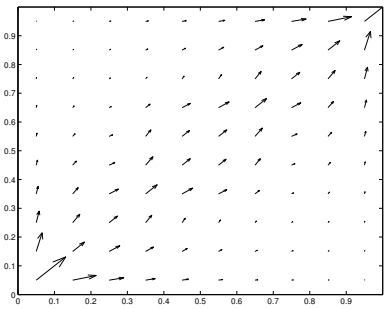

FIG. 4.3.3 – La vitesse du fluide dans le cas où $K_1 = 1$ et $K_2 = 100$

Revenons au cas où $K_1 \geq K_2$ (cas de la figure 4.3.2). On évalue la condition CFL dans chaque sous-domaine :

$$\frac{\Delta t_l}{h_x h_y} \leq \xi_\ell = \min_{\substack{1 \leq j \leq N_x, 1 \leq k \leq N_y \\ T_{jk} \subset \Omega_\ell}} \frac{1}{[(Q_y)_{j,k-1/2} + (Q_x)_{j-1/2,k}]}, \quad \ell = 1, 2.$$

On a évidemment $\xi_2 > \xi_1$. On choisit des pas de temps par sous-domaine $\Delta t_\ell, \ell = 1, 2$ tels que la condition CFL soit vérifiée dans chaque sous-domaine et qu'ils soient dans un rapport entier. En conséquence on aura $\Delta t_1 < \Delta t_2$.

On discrétise donc l'intervalle $[0, T]$ en sous-intervalles $I_n = [t_{n+1}, t_n]$, $n = 0, \ldots, N_t$ avec $N_t \in \mathbb{N}$ et on pose $\Delta t_g = \Delta t_2 = t_{n+1} - t_n$. On calcule $M = E(\frac{\xi_1}{\xi_2} + 1)$ où E est la fonction partie entière et on pose $\Delta t_f = \Delta t_1 = \frac{\Delta t_g}{M}$. Donc chaque intervalle I_n est divisé en sous-intervalles $I_{n,m} = [t_{n,m}, t_{n,m+1}]$, $m = 0, \ldots, M$, tels que $t_{n,m} = t_n + \frac{m\Delta t_2}{M}$. Dans le sous-domaine 1 les pas de temps sont M fois plus petits que dans le sous-domaine 2. Ainsi on discrétise en temps l'équation en utilisant deux grilles différentes. Les inconnues et les pas de temps de chaque grille seront indicées par f et g (pour fin et grossier). On utilise ainsi les notations suivantes :

$$\begin{array}{lcll} (c_f)_{j,k}^{n,m} & \approx & c(kh_x, jh_y, t_{n,m}) & \text{dans le sous-domaine 1,} \\ (c_g)_{j,k}^{n} & \approx & c(kh_x, jh_y, t_n) & \text{dans le sous-domaine 2 .} \end{array}$$

On pose $\lambda_f = \frac{\Delta t_f}{h_x h_y}$ et $\lambda_g = \frac{\Delta t_g}{h_x h_y}$. Dans le domaine 1 l'équation d'advection est approchée par

$$\begin{aligned} (c_f)_{j,k}^{n,m+1} = (c_f)_{j,k}^{n,m} - \lambda_f[\quad & (c_f)_{j,k+1/2}^{n,m\,*}(Q_y)_{j,k+1/2} + (c_f)_{j+1/2,k}^{n,m\,*}(Q_x)_{j+1/2,k} \\ & -(c_f)_{j,k-1/2}^{n,m\,*}(Q_y)_{j,k-1/2} - (c_f)_{j-1/2,k}^{n,m\,*}(Q_x)_{j-1/2,k}]. \end{aligned}$$

Sur les arêtes intérieures à Ω_1 et sur celles incluses dans Γ_+ on a

$$(c_f)_{j+1/2,k}^{n,m\,*} = (c_f)_{j,k+1/2}^{n,m\,*} = (c_f)_{j,k}^{n,m}.$$

Sur les arêtes incluses dans Γ_- on a $(c_f)_{j,1/2}^{n,m\,*} = (c_f)_{1/2,k}^{n,m\,*} = 1$.

A l'intérieur du domaine 2, le schéma décentré amont s'écrit :

$$\begin{aligned} (c_g)_{j,k}^{n+1} = (c_g)_{j,k}^{n} - \lambda_g[\quad & (c_g)_{j,k+1/2}^{n\,*}(Q_y)_{j,k+1/2} + (c_g)_{j+1/2,k}^{n\,*}(Q_x)_{j+1/2,k} \\ & -(c_g)_{j,k-1/2}^{n\,*}(Q_y)_{j,k-1/2} - (c_g)_{j-1/2,k}^{n\,*}(Q_x)_{j-1/2,k}]. \end{aligned}$$

Sur les arêtes intérieures à Ω_2 on a $(c_g)_{j+1/2,k}^{n\,*} = (c_g)_{j,k+1/2}^{n\,*} = (c_g)_{j,k}^{n}$.

Reste maintenant à définir la concentration amont à l'interface entre 2 sous-domaines où des pas de temps différents sont utilisés. Deux situations se présentent alors : soit c'est à l'amont qu'on utilise des pas de temps petits (voir figure 4.3.4), soit c'est à l'aval qu'on utilise des pas de temps petits (voir figure 4.3.5).

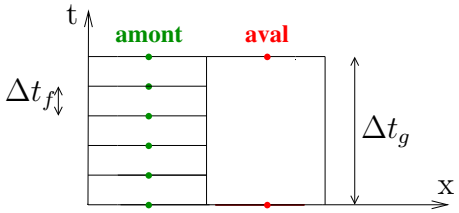

FIG. 4.3.4 – Discrétisation en temps sur Γ_{12}^{-} $(M = 5)$.

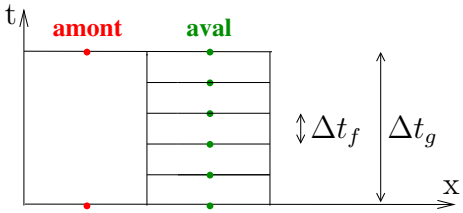

FIG. 4.3.5 – Discrétisation en temps sur Γ_{12}^{+} $(M = 5)$.

Dans tous les cas il est nécessaire de faire des choix qui préserve la conservation du schéma et cet objectif justifie les formules ci-dessous :

Cas des petits pas de temps à l'amont (figure 4.3.4)

Schéma explicite : $(c_g)^{n,*}_{j+1/2,k} = (c_g)^{n,*}_{j,k+1/2} = \dfrac{1}{M}\displaystyle\sum_{m=0}^{M-1}(c_f)^{n,m}_{j,k}$.

Schéma implicite : $(c_g)^{n+1,*}_{j+1/2,k} = (c_g)^{n+1,*}_{j,k+1/2} = \dfrac{1}{M}\displaystyle\sum_{m=1}^{M}(c_f)^{n,m}_{j,k}$

Cas des grands pas de temps à l'amont (figure 4.3.5)

Schéma explicite : $(c_f)^{n,m,*}_{j+1/2,k} = (c_f)^{n,m,*}_{j,k+1/2} = (c_g)^{n}_{j,k}$.

Schéma implicite : $(c_f)^{n,m+1,*}_{j+1/2,k} = (c_f)^{n,m+1,*}_{j,k+1/2} = (c_g)^{n+1}_{j,k}$.

Dans le cas explicite, les pas de temps dans les différents sous-domaines sont choisis de sorte qu'ils soient les plus proches possible des maxima autorisés par les conditions CFL des différents sous-domaines. Dans le cas implicite, le pas de temps résulte d'un compromis précision-temps de calcul. On choisira donc des pas de temps qui sont autant que possible un multiple des pas de temps maximum autorisés par les conditions CFL des différents sous-domaines, ce multiple étant le même pour tous les sous-domaines.

4.4 Les résultats numériques

On présente maintenant des résultats numériques permettant de comparer la méthode avec un pas de temps par sous-domaine à celle où on utilise un pas de temps unique dans tout le domaine. Les comparaisons seront faites dans deux cas :

- le cas homogène, où la perméabilité est égale à 1 sur tout le domaine.
- le cas hétérogène où on a choisi $K_1 = 10$ dans Ω_1 et $K_2 = 1$ dans Ω_2.

Le maillage du domaine Ω est supposé rectangulaire et uniforme. Il est constitué de carrés dont les côtés ont pour longueur h. La discrétisation est telle que les bords de Ω_1 et Ω_2 sont des réunions d'arêtes du maillage.

4.4.1 Validation de la méthode en milieu homogène

On présente sur la figure 4.4.1 à gauche les valeurs de la concentration sur chaque maille du domaine à l'instant $t = 5$ calculées par la méthode utilisant un pas de temps $\Delta t_1 = 0.45$ sur le sous domaine 1 et un deuxième pas $\Delta t_2 = 2.35$ sur le sous domaine 2, soit un rapport $M = 5$. La figure 4.4.1 de droite montre des résultats calculés par la méthode utilisant un seul pas de temps $\Delta t = 0.45$ pour tout Ω. Visuellement les deux figures ne présentent pas de différence, ce qui est confirmé sur la figure 4.4.2 qui compare les fronts le long de la diagonale. On notera la diffusion numérique significative du schéma qui n'est que d'ordre 1 .

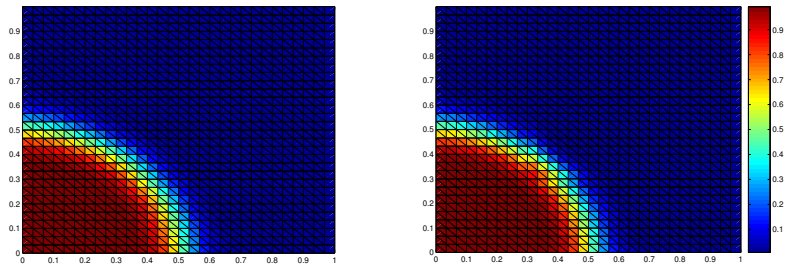

FIG. 4.4.1 – Concentrations dans le cas homogène $K = 1$ calculées par la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine (à gauche) et par la méthode utilisant un seul pas de temps (à droite) à l'instant $t = 30$

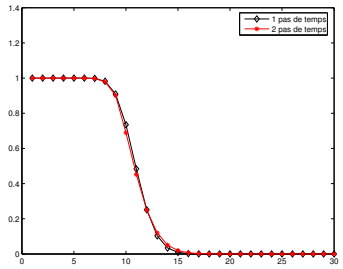

FIG. 4.4.2 – Comparaison des concentrations calculées le long de la diagonale du domaine à l'instant $t = 30$ avec la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine ($\star$) et celle utilisant un seul pas de temps unique ($\diamond$).

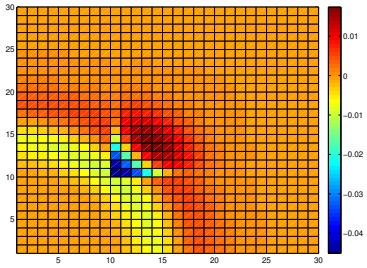

FIG. 4.4.3 – La différence des concentrations calculées par la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine et par la méthode utilisant un seul pas de temps à l'instant $t = 30$

Sur la figure 4.4.3 on observe que la différence des concentrations calculées avec un pas de temps par sous-domaine et avec un seul pas de temps est faible, elle varie de 0 à 0.1 et elle est principalement localisée sur l'interface entre les deux sous-domaines.

4.4.2 Validation de la méthode en milieu hétérogène

Considérons d'abord le cas $K_1 = 10$ et $K_2 = 1$. La figure 4.4.4 montre l'évolution de la concentration aux instants respectifs $t = 4$, $t = 20$, $t = 20$ et $t = 30$. On observe comment les contaminants tendent à éviter la zone centrale où la perméabilité est faible. Dans ce calcul, compte tenu de la condition de courant 4.2.3, le pas de temps dans le domaine 1 est $\Delta t_1 = 0.045$ et dans le domaine 2 $\Delta t_2 = 0.88$, soit un rapport $M = 19$.

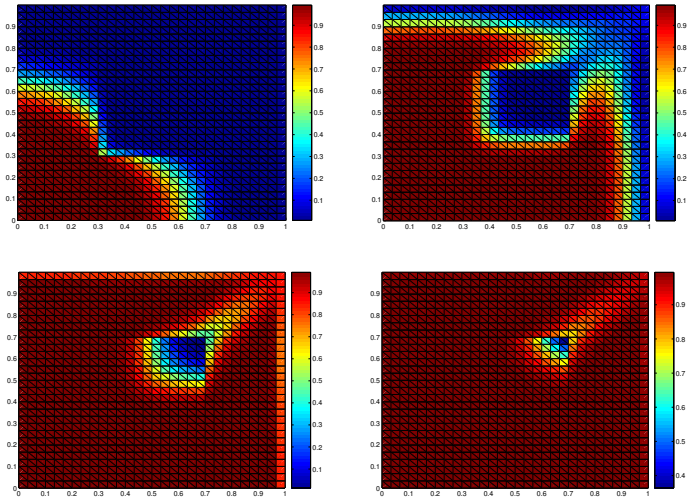

FIG. 4.4.4 – Concentrations dans le cas hétérogène ($K_1 = 10$) calculées par la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaines $t = 4$, $t = 10$, $t = 20$ et $t = 30$ avec $M = 19$

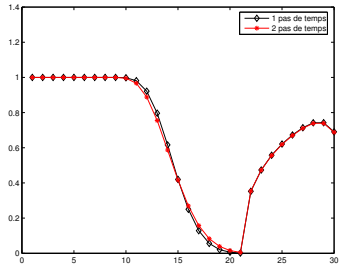

FIG. 4.4.5 – Comparaison des concentrations calculées le long de la diagonale du domaine à l'instant $t = 15$ avec la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine ($\star$) et celle utilisant un seul pas de temps unique ($\diamond$).

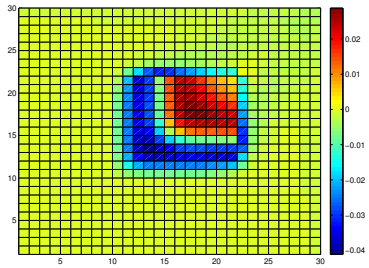

FIG. 4.4.6 – La différence des concentrations calculées par les deux méthodes sur chaque maille du domaine à l'instant $t = 15$

A l'instant $t = 15$ on compare le résultat obtenu avec celui obtenu en utilisant un pas de temps unique sur tout le domaine $\Delta t = 0.045$. Les figures 4.4.5 et 4.4.6 montrent que les courbes sont proches et que la différence est petite.

On a aussi considéré le cas plus difficile où $K_1 = 100$, le champs de vitesse est celui représenté sur la figure 4.3.2.
La figure 4.4.7 montre l'évolution de la concentration aux instants $t = 1$ et $t = 3$. les pas de temps dans les deux sous domaines sont $\Delta t_1 = 0.0045$ et $\Delta t_2 = 0.65$ soit un rapport $M = 144$.

Les figures 4.4.8 et 4.4.9 montrent que les résultats obtenus en comparant les deux méthodes sont très voisins.

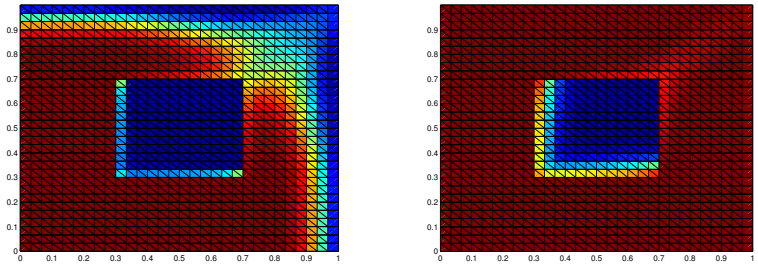

FIG. 4.4.7 – Concentrations dans le cas hétérogène ($K_1 = 100$) calculées par la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine aux instants $t = 1$ et $t = 3$

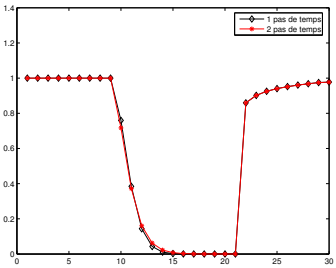

FIG. 4.4.8 – Comparaison des concentrations calculées le long de la diagonale du domaine à l'instant $t = 3$ avec la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine ($\star$) et celle calculée avec un pas de temps unique ($\diamond$).

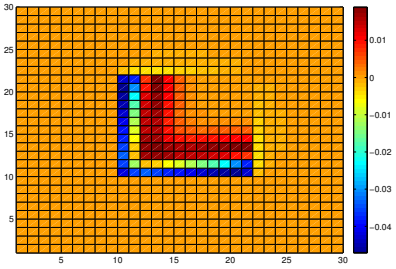

FIG. 4.4.9 – La différence des concentrations calculées par les deux méthodes sur chaque maille du domaine à l'instant $t = 3$

Pour aller au delà des comparaisons visuelles on a construit les courbes de convergence des erreurs en norme L^1 et en norme L^2. Comme la solution exacte ne nous est pas connue, on a calculé l'erreur en prenant pour solution de référence la solution c_f calculée sur un maillage très fin $h = 1/640$. On a comparé cette solution avec celles calculées sur des maillages plus grossiers $h = 1/10, 1/20, 1/40, 1/80, 1/160, 1/320$. Sur ces grilles on a calculé les erreurs L^2 et L^1 à l'instant $t = 10$ dans un cas hétérogène ($K_1 = 10, K_2 = 1$) en utilisant la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine et celle calculée avec un pas de temps unique.

Les figures 4.4.10 montrent les erreurs L^2 et L^1 à l'échelle logarithmique calculée avec les deux méthodes. Les courbes d'erreurs des deux méthodes ne peuvent être distinguées. L'ordre p_2 de l'erreur L^2 calculé par les deux méthodes est compris entre $0.4827 < p_2 < 0.5280$. Tandis que l'ordre p_1 de l'erreur L^1 est compris entre $0.9565 < p_1 < 1.0452$.

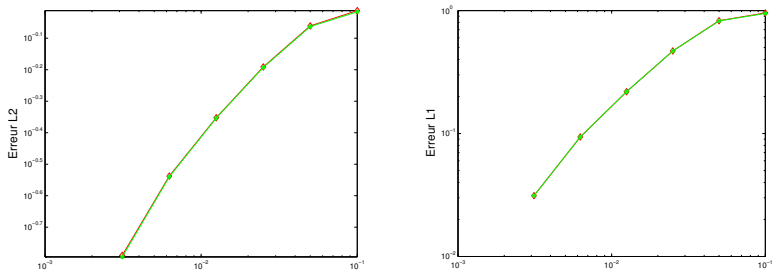

FIG. 4.4.10 – Erreurs L2 (à gauche) et L1 (à droite) en échelle logarithmique à $t = 10s$ entre la solution de référence calculée avec $h = 1/640$ et les solutions calculées avec $h = 1/10$, 1/20, 1/40, 1/80 , 1/160 , 1/320 dans le cas hétérogène $K_1 = 10, K_2 = 1$ par la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine ($\star$) et celle utilisant un seul pas de temps ($\diamond$). Cas du schéma explicite.

Jusqu'ici nous n'avons montré aucun résultat concernant le schéma implicite. Cependant les comparaisons entre les résultats obtenus par les méthodes à un pas de temps par sous-domaine et à un pas de temps unique montrent encore qu'ils sont très voisins. Nous nous contentons ici, sur la figure 4.4.11, de montrer les courbes de convergence d'erreurs obtenues avec le schéma implicite en utilisant les mêmes pas de temps qu'avec le schéma explicite. De nouveau les courbes d'erreurs pour les deux méthodes ne peuvent être distinguées.

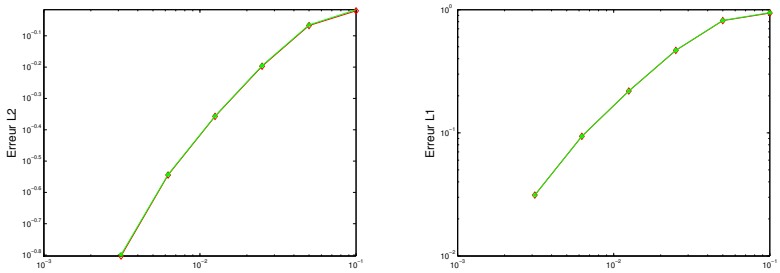

FIG. 4.4.11 – Erreurs L2 (à gauche) et L1 (à droite) en échelle logarithmique à $t = 10s$ entre la solution de référence calculée avec $h = 1/640$ et la solution calculée avec $h = 1/10$, 1/20, 1/40, 1/80 , 1/160 et 1/320 dans le cas hétérogène $K_1 = 10, K_2 = 1$ par la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine ($\star$) et celle utilisant un seul pas de temps ($\diamond$). Cas du schéma implicite.

4.5 Décomposition de domaines pour l'advection implicite

L'objet de la section précédente était de présenter une méthode de discrétisation en temps telle que des pas de temps différents sont utilisés dans différents sous-domaines en espace. L'équation d'advection est discrétisée par un schéma décentré amont en espace et un schéma d'Euler explicite et implicite en temps. Le raccord entre les grilles en temps est réalisé de sorte que le schéma soit conservatif.

En utilisant un schéma implicite la résolution du problème avec cette méthode de discrétisation en temps nécessite d'ordonner le calcul dans les sous-domaines, ce qui n'est pas nécessaire quand on utilise un schéma explicite.

Ainsi, dans l'exemple proposé dans la section précédente la résolution du problème d'advection en utilisant un schéma implicite en temps sur le domaine Ω se fait en trois étapes. On commence par calculer les concentrations sur une partie du premier sous-domaine, la partie colorée en bleu, ensuite dans le deuxième sous-domaine, enfin sur la deuxième partie du premier sous-domaine, colorée en vert.

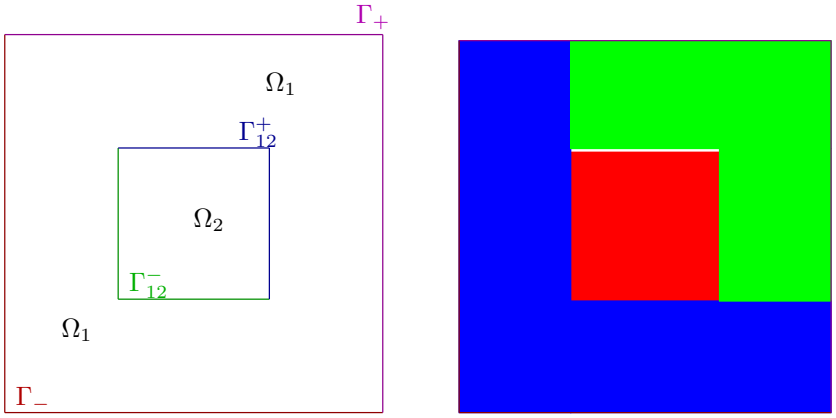

FIG. 4.5.1 – partition du domaine : définition des sous-domaines et des interfaces : $\Gamma_{12} = \Gamma_{12}^+ \cup \Gamma_{12}^-$ et $\Gamma = \Gamma_+ \cup \Gamma_-$

Les inconnues de notre problème discret (4.2.2), (4.2.3) sont les concentrations au centre des mailles. La détermination de ces inconnues dépend des concentrations en amont, elles même qui sont déterminées par le sens du champ de vitesse. La résolution du problème d'advection, avec la méthode de discrétisation en temps qui utilise un pas de temps par sous-domaine, se fait d'une manière séquentielle d'un sous-domaine à l'autre, et donc dépend de l'ordre de la résolution dans les sous-domaines.

Dans le cas d'un domaine hétérogène, divisé en de nombreux sous-domaines il est très difficile de définir un ordre dans les calculs des sous-domaines, surtout dans le cas où on peut avoir des changements de vitesse du fluide aux interfaces de différents matériaux.

Le problème se pose en particulier lorsque l'amont et l'aval changent sur l'interface entre deux sous-domaines. Il n'est pas possible alors d'ordonner le calcul de sorte qu'on puisse calculer la concentration sous-domaine par sous-domaine séquentiellement. Les méthodes de décomposition de domaine sont nécessaires dans ce cas.

L'objectif des méthodes de décomposition de domaine est de trouver des solutions efficaces aux problèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles en décomposant le problème initial en sous-problèmes de petite taille et sur des géométries plus simples [56].

La méthode de décomposition de domaine Ω en sous-domaines, est adaptée au traitement des milieux hétérogènes et aux géométries compliquées. La direction de l'écoulement est liée à la partie convective et aux conditions d'interface. L'interface est coupée en sous-ensembles selon les changements de la direction de l'écoulement.

Par la suite, nous illustrerons comment une méthode de décomposition de domaine peut être appliquée pour résoudre le problème d'advection sur un domaine hétérogène Ω avec un champ de vitesse donné, comme le montre la figure (4.5.2).

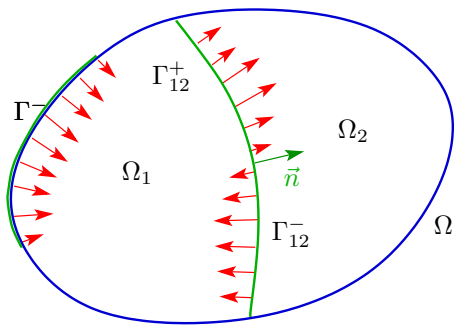

FIG. 4.5.2 – Le domaine de calcul et le champ de vitesse aux interfaces des sous-domaines

Comme dans le chapitre précédent, on considère Ω un domaine composé de deux sous-domaines Ω_i $i = 1, 2$ et on note par Γ_{12} l'interface commune entre Ω_1 et Ω_2. On distingue deux sous-interfaces Γ^+_{12} et Γ^-_{12} qui sont identifiées par la direction locale du champ de vitesse à l'interface de chaque sous-domaine.

$$\Gamma^- = \{x \in \Gamma | \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} < 0\}, \qquad \Gamma^+ = \{x \in \Gamma | \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \geq 0\}$$
$$\Gamma^-_{12} = \{x \in \Gamma_{12} | \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{12} < 0\}, \qquad \Gamma^+_{12} = \{x \in \Gamma_{12} | \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{12} \geq 0\}$$

où $\mathbf{n}_{12}$ est le vecteur unitaire normal sur Γ_{12} orienté vers Ω_2. On note par $\mathcal{T}_h$ la subdivision de Ω en rectangles $T_{j,k}$, $\Omega = (T_{j,k})_{j,k}$.
Dans la suite on note par ∂T^+ et ∂T^- les faces de la maille T qui identifient respectivement un flux sortant et un flux entrant, et par $T^\star$ la maille amont.
On utilise un schéma d'Euler implicite décentré amont. On suppose que Ω_2 a une échelle de temps plus grande que celle de Ω_1. Les pas de temps sont choisis en conséquence :

$$\Delta t = \Delta t_2, \quad \Delta t_1 = \Delta t_2 / M, \quad M \in \mathbb{N}.$$

En appliquant la méthode de discrétisation en temps et en adoptant les mêmes notations, présentée dans la section précédente, le problème (4.1.1) admet les formulations par sous-domaines suivantes :

Une formulation par sous-domaines du problème se lit comme suit :
Dans Ω_1, pour $m = 0, \ldots, M-1$,

$$\begin{cases} |T|\dfrac{c_T^{n,m+1} - c_T^{n,m}}{\Delta t_1} + \displaystyle\int_{\partial T} \mathbf{u}\cdot\mathbf{n}\, c_T^{n,m+1\,\star} = 0, \;\; T \subset \Omega_1, \\ c_T^{n,m+1\,\star} = c_T^{n,m+1} \text{ sur } \partial T^+, \\ c_T^{n,m+1\,\star} = c_{T^\star}^{n,m+1} \text{ sur } (\partial T^- \setminus (\Gamma_{12}^- \cup \Gamma^-)) \cap \partial T^\star, \quad (T^\star \subset \Omega_1) \\ c_T^{n,m+1\,\star} = c_{T^\star}^{n+1} \text{ sur } (\partial T^- \cap \Gamma_{12}^-) \cap \partial T^\star, \quad (T^\star \subset \Omega_2) \\ c_T^{n,m+1\,\star} = c_d \text{ sur } \partial T^- \cap \Gamma^-, \\ c_T^{n,0} = c_T^n, \; c_T^{n,M} = c_T^{n+1}, \; c^{0,0} = c_0. \end{cases}$$

Dans Ω_2

$$\begin{cases} |T|\dfrac{c_T^{n+1} - c_T^{n}}{\Delta t_2} + \displaystyle\int_{\partial T} \mathbf{u}\cdot\mathbf{n}\, c_T^{n+1\,\star} = 0, \;\; T \subset \Omega_2, \\ c_T^{n+1\,\star} = c_T^{n+1} \text{ sur } \partial T^+, \\ c_T^{n+1\,\star} = c_{T^\star}^{n+1} \text{ sur } (\partial T^- \setminus (\Gamma_{12}^+ \cup \Gamma^-)) \cap \partial T^\star, \quad (T^\star \subset \Omega_2) \\ c_T^{n+1\,\star} = (\displaystyle\sum_{m=1}^{m=M} c_{T^\star}^{n,m})/M \text{ sur } (\partial T^- \cap \Gamma_{12}^+) \cap \partial T^\star, \quad (T^\star \subset \Omega_1, \text{ moyenne}), \\ c_T^{n+1\,\star} = c_d \text{ sur } \partial T^- \cap \Gamma^-, \\ c^0 = c_0. \end{cases}$$

Ceci représente un grand système linéaire qu'on veut résoudre par décomposition de domaine.
Dans ce cas, le problème algébrique est ramené, grâce aux opérateurs de types Steklov-Poincaré, à un problème sur les inconnues des interfaces entre sous-domaines.

Définissons deux opérateurs de trace C_1^{n+1} et C_2^{n+1} comme suit :

$$C_1^{n+1} : \Gamma_{12} \longrightarrow \Omega_1 : \lambda \longrightarrow C_1^{n+1}(\lambda)$$
$$C_2^{n+1} : \Gamma_{12} \longrightarrow \Omega_2 : \lambda \longrightarrow C_2^{n+1}(\lambda)$$

On résout dans Ω_1, pour $m = 0, \ldots, M-1$,

$$\begin{cases} |T|\frac{c_T^{n,m+1}-c_T^{n,m}}{\Delta t_1} + \int_{\partial T} \mathbf{u}\cdot\mathbf{n}\, c_T^{n,m+1\,\star} = 0, \quad T \subset \Omega_1, \\ \\ c_T^{n,m+1\,\star} = c_T^{n,m+1} \text{ sur } \partial T^+, \\ c_T^{n,m+1\,\star} = c_{T^\star}^{n,m+1} \text{ sur } (\partial T^- \setminus (\Gamma_{12}^- \cup \Gamma^-)) \cap \partial T^\star, \\ c_T^{n,m+1\,\star} = \lambda \text{ sur } (\partial T^- \cap \Gamma_{12}^-) \cap \partial T^\star, \\ c_T^{n,m+1\,\star} = c_d \text{ sur } \partial T^- \cap \Gamma^-, \\ c_T^{n,0} = c_T^n,\ c_T^{n,M} = c_T^{n+1},\ c^{0,0} = c_0. \end{cases}$$

Alors $C_1^{n+1}(\lambda) = \begin{cases} \lambda \text{ sur } \Gamma_{12}^-, \\ \\ (\sum_{m=1}^{m=M} c_{T^\star}^{n,m})/M \text{ sur } \Gamma_{12}^+. \end{cases}$

On résout dans Ω_2,

$$\begin{cases} |T|\frac{c_T^{n+1}-c_T^{n}}{\Delta t_2} + \int_{\partial T} \mathbf{u}\cdot\mathbf{n}\, c_T^{n+1\,\star} = 0, \quad T \subset \Omega_2, \\ \\ c_T^{n+1\,\star} = c_T^{n+1} \text{ sur } \partial T^+, \\ c_T^{n+1\,\star} = c_{T^\star}^{n+1} \text{ sur } (\partial T^- \setminus (\Gamma_{12}^+ \cup \Gamma^-)) \cap \partial T^\star, \\ c_T^{n+1\,\star} = \lambda \text{ sur } (\partial T^- \cap \Gamma_{12}^+) \cap \partial T^\star, \quad (T^\star \subset \Omega_1), \\ c_T^{n+1\,\star} = c_d \text{ sur } \partial T^- \cap \Gamma^-, \\ c^0 = c_0. \end{cases}$$

Alors $C_2^{n+1}(\lambda) = \begin{cases} \lambda \text{ sur } \Gamma_{12}^+, \\ \\ c_K^{n+1} \text{ sur } \Gamma_{12}^-. \end{cases}$

Le système à résoudre s'écrit comme le problème d'interface :

$$C_1(\lambda) - C_2(\lambda) = 0.$$

C'est un système non-symétrique.
Le développement, l'analyse et l'implémentation de cette méthode peut être envisageable dans la suite de la thèse.

4.6 Conclusion

Nous avons présenté une méthode de discrétisation en temps utilisant un pas de temps par sous-domaine pour résoudre une équation d'advection du premier ordre. Cette méthode, basée sur le schéma d'Euler, est conservatif et peut être utilisée aussi bien avec un schéma explicite qu'avec un schéma implicite. Dans les deux cas les résultats numériques ont montré qu'elle pouvait remplacer une méthode utilisant un pas de temps unique, sans perte de précision.

Ces résultats permettent d'espérer des gains de temps de calcul importants dans des situations complexes en 3 dimensions car ils ouvrent la possibilité d'adapter les pas de temps aux échelles de temps des sous-domaines, ces échelles pourront varier de plusieurs ordre de grandeur d'un milieu géologique à un autre.

Chapitre 5

Discrétisation de l'équation de transport

5.1 Motivation

L'objet de ce dernier chapitre porte sur la résolution de l'équation de transport en milieu poreux saturé et hétérogène. Notre modèle de transport des radionucléides prend en compte les phénomènes de diffusion-dispersion, advection, adsorption (par l'intermédiaire du coefficient de retard) et de décroissance radioactive. Le champ de vitesse de Darcy, supposé indépendant du temps car la viscosité de l'eau n'est pas affectée par la dissolution des radionucléides, a été calculé au chapitre 3.

Nous résolvons le problème de transport pour un modèle $3D$ réaliste, le modèle callovo-oxfordien, issu de l'Andra [28] et du GDR Momas, et présenté au chapitre 2 sous forme de benchmark.

Ce problème est difficile à résoudre numériquement essentiellement pour trois raisons : premièrement, la géométrie du domaine se caractérise par une très forte anisotropie, le domaine ayant l'apparence d'une galette, comme on peut le voir à l'échelle réelle sur la partie gauche de la figure 2.1.1. Deuxièmement, les couches géologiques sont très hétérogènes entre elles : les coefficients de perméabilité, de diffusion et de dispersion sautent de plusieurs ordres de grandeurs d'une couche à l'autre. Enfin, la simulation doit être effectuée sur une très longue période de temps.

Les simulations du transport des contaminants dans cette situation conduit à des temps de calcul très importants. Pour tenir compte de ce que les échelles de temps pour la diffusion et l'advection ne sont pas liées entre elles, et afin d'économiser du temps de calcul, nous utilisons la méthode de séparation d'opérateurs. Par ailleurs, dans des milieux hétérogènes les échelles de temps peuvent varier de façon considérable d'une région à l'autre du domaine de calcul, et on voudrait donc pouvoir utiliser des pas de temps par sous-domaines pour l'advection comme cela a été montré au chapitre 4, et pour la diffusion-dispersion ce qui implique l'utilisation de méthode de décomposition de domaines.

Dans un premier paragraphe, nous détaillerons une méthode de résolution de l'équation

de transport (5.2.1). Dans un second paragraphe nous présenterons la méthode de séparation d'opérateurs et nous finirons par présenter une simulation réaliste de déplacement de radionucléides provenant d'un site de stockage souterrain avec des coefficients géologiques réalistes très hétérogènes donnés dans le chapitre 2.

5.2 L'équation du transport d'un radionucléide

Soit Ω un ouvert borné de $\mathbb{R}^3$ qui enserre le site de stockage S. La frontière de Ω est composé de deux morceaux, la frontière extérieure Γ et la frontière du stockage ∂S : $\partial\Omega = \Gamma \cup \partial S$. Ces deux frontières sont des frontières de Dirichlet, sur ∂S la concentration est supposée égale a un et sur Γ elle est supposée nulle. Cette dernière condition ne pose pas de problème sauf sur le bas du domaine qui est proche du stockage car, mise a part ce dernier morceau, les contaminants n'atteignent pas la frontière.
Pour le bas du domaine, cette condition de concentration nulle correspond à une situation où les contaminants sont emportés instantanément par un grand champ de vitesse dans une couche géologique se trouvant en-dessous du domaine de calcul.
L'équation de transport que nous considérons s'écrit :

$$R\omega\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}\ (-\mathbf{D}\vec{\nabla}c + \mathbf{u}c) + R\omega\lambda c = 0 \quad \text{sur} \quad \Omega, \tag{5.2.1}$$

où c est la concentration, ω est la porosité, R le coefficient de retard, λ la constante de décroissance radioactive, $\mathbf{u}$ la vitesse de Darcy et D le tenseur de diffusion-dispersion donné par :

$$\mathbf{D} = D_e\mathbf{I} + |\mathbf{u}|[\alpha_l\mathbf{E}(\mathbf{u}) + \alpha_t(I - \mathbf{E}(\mathbf{u}))], \quad E_{ij}(\mathbf{u}) = \frac{u_i u_j}{|\mathbf{u}|}, \tag{5.2.2}$$

où D_e est le coefficient de diffusion moléculaire, α_l est la dispersivité longitudinale et α_t est la dispersivité transversale.
Les conditions aux bords s'écrivent

$$c = c_d \ \text{ sur } \partial\Omega, \ \text{ avec } \ c_d = 0 \ \text{ sur } \ \Gamma, \ c_d = 1 \ \text{ sur } \ \partial S,$$

et la condition initiale est :

$$c(x, t = 0) = 0, \ \forall x \in \Omega.$$

Dans la suite, on introduira le champ de diffusion-dispersion

$$\mathbf{r} = -\mathbf{D}\vec{\nabla}c. \tag{5.2.3}$$

Alors l'équation de transport (5.2.1) se réécrit

$$R\omega\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}\ (\mathbf{r} + \mathbf{u}c) + R\omega\lambda c = 0 \quad \text{sur} \quad \Omega, \tag{5.2.4}$$

5.3 Formulation discrète

L'équation de transport sera discrétisée à l'aide d'une méthode de volumes finis centrée sur les mailles, car ces méthodes sont les mieux adaptées pour traiter des milieux hétérogènes, l'argument étant le même que pour le calcul du champ de vitesse. En temps, on se contentera d'une discrétisation d'ordre un.

Le calcul du champ de diffusion-dispersion $\mathbf{r} = -\mathbf{D}\vec{\nabla}c$ se fera à l'aide de la méthode des éléments finis mixtes (EFM). Cette méthode dépend du choix du type de maillage : pour un maillage de tétraèdres où de parallelepipèdes on peut utiliser les éléments de Raviart-Thomas-Nédélec [53, 58, 11], alors que pour un maillage formé d'hexaèdres généraux on utilisera les éléments de Kuznetsov-Repin [39] (voir chapitre 3). Par contre, contrairement au calcul de l'écoulement, il n'est pas utile de recourir à la formulation mixte-hybride car la présence du terme de dérivée en temps rend la matrice définie positive. Le terme de diffusion-dispersion sera traité de façon implicite en temps. Ainsi nous n'aurons pas de problème de stabilité provenant de la discrétisation de ce terme, et la grandeur des pas de temps ne sera limitée que par la précision.

Pour le terme d'advection on utilisera une discrétisation d'ordre un, décentrée amont en espace et explicite en temps. Le choix du décentrage amont permet de traiter des vitesses de toutes grandeurs. Un tel schéma implique que le pas de temps doit satisfaire une condition CFL mais présente deux avantages. D'abord, le schéma d'Euler d'ordre un explicite en temps, bien que diffusif, l'est bien moins que le schéma d'Euler d'ordre un implicite en temps. Ensuite, un schéma explicite en temps permet de conserver la symétrie de la matrice du système linéaire à résoudre à chaque pas de temps.

Cependant comme nous l'avons mentionné, le schéma d'Euler explicite en temps nous impose un choix de pas de temps satisfaisant la condition CFL, ce qui peut nous conduire à devoir utiliser des petits pas de temps en comparaison des pas de temps requis pour une discrétisation précise du champ de diffusion-dispersion. Tel quel le schéma sera particulièrement coûteux car à chaque pas de temps la partie coûteuse des calculs est la résolution du système linéaire provenant du terme de diffusion-dispersion. C'est pourquoi nous utiliserons une méthode de séparation d'opérateurs qui nous permettra d'utiliser plusieurs pas de temps d'advection pour un pas de temps de diffusion-dispersion.

D'autres choix auraient pu être possible pour le traitement de l'advection, comme les méthodes de caractéristiques [6, 21, 25] et leurs descendantes, les méthodes ELLAM [65, 67, 59]. Cependant ces méthodes sont difficiles à rendre conservatives et rencontrent des difficultés dans les situations où il y a des vitesses très petites, ce qui est le cas pour le problème de stockage des radionucléides présenté au chapitre 2.

Soit $\mathcal{T}_h$ une discrétisation du domaine Ω en héxaèdres T. On notera $|T|$ le volume de la maille. Soit $\mathcal{A}_h$ l'ensemble des faces du maillage où h représente le diamètre du maillage i.e. $h = \max_{T \in \mathcal{T}_h} \mathrm{diam}(T)$. Nous aurons besoin dans la suite de définir un sens positif de traversée de chaque arête F défini par la normale unitaire $\mathbf{n}_F$. Pour les faces sur le bord de Ω, ce sens positif coïncide avec celui de la normale extérieure à $\Omega, \mathbf{n}_\Omega$. On note, pour toutes les

faces F de $\mathcal{A}_h$

$$\xi_{TF} = \mathbf{n}_T \cdot \mathbf{n}_F = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad \mathbf{n}_F \text{ sort de T,} \\ -1 & \text{si} \quad \mathbf{n}_F \text{ rentre dans T.} \end{cases}$$

La concentration c est approchée par la fonction $c_h \in \mathcal{M}_h$, l'espace des fonctions constantes par morceaux en temps et en espace. Le degré de liberté c_T représente une approximation de la valeur moyenne de la concentration dans la maille T. Les fonctions de base de $\mathcal{M}_h$ étant les fonctions caractéristiques 1_T des mailles $T \in \mathcal{T}_h$ on écrit $c_h = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} c_T 1_T$.

Le champ de diffusion-dispersion $\mathbf{r}$ est approché par $\mathbf{r}_h \in \mathcal{W}_h$, l'espace des éléments finis mixtes de Kuznetsov-Repin introduit et étudié au chapitre 3. Les fonctions de bases de cet espace sont données dans l'annexe B. Evidemment si le maillage ne comporte que des héxaèdres parallélépipèdiques on peut se contenter des éléments finis mixtes de Raviart-Thomas-Nédélec, mais ce ne sera pas le cas pour les calculs que nous avons eu à faire. Le champ de vitesse de Darcy est calculé dans le même espace $\mathcal{W}_h$. Comme les degrés de libertés des fonctions de cet espace sont les débits à travers les faces de $\mathcal{A}_h$, on note r_F le flux diffusif approché qui représente une approximation de $\int_F \mathbf{r} \cdot \mathbf{n}_F$ et u_F le débit d'eau à travers la face F calculé comme au chapitre 3. Avec ces notations on a

$$\mathbf{r}_h = \sum_{F \in \mathcal{A}_h} r_F \mathbf{w}_F, \qquad \mathbf{u}_h = \sum_{F \in \mathcal{A}_h} u_F \mathbf{w}_F,$$

où $\mathbf{w}_F$ est la fonction de base de l'espace $\mathcal{W}_h$ associée à la face F et dont l'expression est donnée dans l'annexe B.

L'intervalle de temps $[0, t_{\max}]$ est discrétisé en N_t sous intervalles $[t_n, t_{n+1}]$ tels que

$$0 = t_0 \leq ... \leq t_n \leq ... \leq t_N = t_{\max}, \quad \Delta t = t_{n+1} - t_n.$$

Les fonctions inconnues sont discrétisées en temps comme des fonctions constantes par intervalle de temps, leur valeur à l'instant t_n étant notée par l'indice supérieur n.

Comme indiqué dans l'introduction on utilise un schéma d'Euler en temps implicite pour la diffusion-dispersion et explicite décentré amont pour l'advection.

Pour que le schéma soit stable, le pas de discrétisation en temps doit satisfaire une condition CFL :

$$\Delta t \leq \min_{T \in \mathcal{T}_h} \frac{|T|}{\sum_{F^- \subset \partial T} \int_{F^-} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{F^-}} \tag{5.3.1}$$

où F^- est une face de l'hexaèdre T par laquelle le flux est entrant.

Pour obtenir une forme discrète de l'équation de transport (5.2.4) on intègre sur chaque maille T et on intègre par partie les termes en divergence pour obtenir pour $n = 0, \cdots, N-1$ la formulation volumes finis centrés sur les mailles suivante :

$$\int_T R\omega \frac{c_h^{n+1} - c_h^n}{\Delta t} + \int_{\partial T} \mathbf{r}_h^{n+1} \cdot \mathbf{n}_T + \int_{\partial T} c_h^{n,\star} \mathbf{u}_h \cdot \mathbf{n}_T + \int_T R\omega\lambda c_h^{n+1} = 0, \quad T \in \mathcal{T}_h, \tag{5.3.2}$$

où $c^0 = 0$ et où $c^{n,\star}$ est la valeur amont de la concentration sur chaque face du bord ∂T de la maille T.

En terme de degrés de liberté cette équation se réécrit

$$|T|R\omega_T \frac{c_T^{n+1} - c_T^n}{\Delta t} + \sum_{F \subset \partial T} \xi_{TF}(r_F^{n+1} + c^{n,\star} u_F) + |T|R\omega_T \lambda c_T^{n+1} = 0, \quad T \in \mathcal{T}_h \tag{5.3.3}$$

On doit maintenant exprimer $\mathbf{r}_h^{n+1}$ et ses degrés de liberté r_F^{n+1} en fonction de la concentration c_h^{n+1}. Pour cela on considére l'équation (5.2.3) que l'on écrit pour les fonctions approchées $\mathbf{r}_h^{n+1}$, c_h^{n+1}, on la multiplie par l'inverse du tenseur de diffusion puis par une fonction de base $\mathbf{w}_F$ de l'espace $\mathcal{W}_h$, on intègre sur le domaine Ω et on intègre par partie. On obtient

$$\int_\Omega \mathbf{D}^{-1}\mathbf{r}_h^{n+1} \cdot \mathbf{w}_F - \int_\Omega c_h^{n+1} \text{div } \mathbf{w}_F = -\int_{\partial\Omega} c_d \mathbf{w}_F \cdot \mathbf{n}_\Omega, \quad \forall F \in \mathcal{A}_h. \tag{5.3.4}$$

En exprimant cette équation en terme de degrés de liberté on obtient :

$$\begin{aligned} \sum_{F' \in \mathcal{A}_h} r_{F'}^{n+1} \int_\Omega \mathbf{D}^{-1}\mathbf{w}_{F'} \cdot \mathbf{w}_F - \sum_{T \in \mathcal{T}_h} c_T^{n+1} \int_{\partial T} \mathbf{w}_F \cdot \mathbf{n}_T \quad &= \\ -\int_{\partial\Omega} c_d \mathbf{w}_F \cdot \mathbf{n}, \quad \forall F \in \mathcal{A}_h. \end{aligned} \tag{5.3.5}$$

On note $T_1(F)$ et $T_2(F)$ les deux mailles voisines d'une face F intérieure à Ω, et $T_1(F)$ la seule maille voisine d'une face F sur le bord de Ω. Alors, compte tenu de la définition des fonctions de bases de $\mathcal{W}_h$ (voir annexe B), de l'équation (5.3.5) se réécrit

$$\begin{aligned} &\sum_{F' \in \mathcal{A}_h} r_{F'}^{n+1} \int_\Omega \mathbf{D}^{-1}\mathbf{w}_{F'} \cdot \mathbf{w}_F - (\xi_{T_1(F)\,F}\, c_{T_1(F)}^{n+1} + \xi_{T_2(F)\,F}\, c_{T_2(F)}^{n+1}) = 0 \; \forall F \notin \partial\Omega, \\ &\sum_{F' \in \mathcal{A}_h} r_{F'}^{n+1} \int_\Omega \mathbf{D}^{-1}\mathbf{w}_{F'} \cdot \mathbf{w}_F - c_{T_1(F)}^{n+1} = -c_d \; \forall F \in \partial\Omega. \end{aligned} \tag{5.3.6}$$

On se rappelera que $\xi_{T_1(F)\,F} = -\xi_{T_2(F)\,F} = \pm 1 \quad \forall F = T_1 \cap T_2$.

Le tenseur de diffusion-dispersion (5.2.2) dépend de la vitesse de Darcy. Il est approché comme une constante par maille, cette constante étant sa valeur au barycentre de la maille. La vitesse doit donc être calculée au barycentre en utilisant l'expression de la vitesse comme une combinaison linéaire des fonction de base de l'espace $\mathbf{W}_h$ (voir annexe B). On note $\mathbf{D}_h$ le tenseur de diffusion-dispersion approché.

On introduit la matrice de masse $A = (A_{F\,F'})_{F,F' \in \mathcal{A}_h}$ telle que

$$A_{F\,F'} = \int_\Omega \mathbf{D}_h^{-1}\mathbf{w}_F \cdot \mathbf{w}_{F'}$$

Comme $\mathbf{D}$ et donc $\mathbf{D}_h$ sont symétriques, la matrice A est symétrique. Elle est aussi définie-positive si on suppose que le coefficient de diffusion moléculaire D_e est strictement positif.

Etant donné qu'une face n'a au plus que deux mailles adjacentes, la formulation discrète des équations (5.3.4) s'écrit :

$$
\begin{aligned}
&A_{F,F}\, r_F^{n+1} + \sum_{\substack{F' \neq F \\ F' \subset \partial T_1(F) \cup \partial T_2(F)}} A_{F,F'}\, r_{F'}^{n+1} - (\xi_{T_1(F)\,F}\, c_{T_1(F)}^{n+1} + \xi_{T_2(F)\,F}\, c_{T_2(F)}^{n+1}) = 0 \;\forall F \notin \partial\Omega, \\
&A_{F,F}\, r_F^{n+1} + \sum_{\substack{F' \neq F \\ F' \subset \partial T_1(F)}} A_{F,F'}\, r_{F'}^{n+1} \quad - (c_{T_1(F)}^{n+1} - c_d) = 0 \;\forall F \in \partial\Omega.
\end{aligned}
\tag{5.3.7}
$$

Ainsi la matrice A a au plus 11 coefficients non-nuls par ligne.

Pour calculer $c^{n+1}, \mathbf{r}^{n+1}$ on doit donc résoudre le système d'équations (5.3.2),(5.3.4) ou leurs formulations discrètes équivalentes. Contrairement au cas stationnaire, grâce au terme d'accumulation de l'équation de transport, la matrice de ce système d'équations est définie-positive et il n'est donc pas utile de recourir à la formulation mixte-hybride. Pour réduire la dimension du système il suffit d'éliminer la concentration. En effet l'équation (5.3.3) implique

$$
c_T^{n+1} = (1 - \lambda\Delta t) c_T^n - \frac{\Delta t}{|T| R \omega_T} \sum_{F \subset \partial T} \xi_{TF} (c^{n,\star} u_F + r_F^{n+1}).
$$

En reportant cette expression de c_T^{n+1} dans les équations (5.3.7) on obtient un système linéaire dont les inconnues sont les degrés de liberté de $\mathbf{r}^{n+1}$ et dont la dimension est égale

au nombre de faces de la discrétisation :

$$\left(A_{F,F} + \frac{\Delta t}{|T_1(F)|R\omega_{T_1(F)}} + \frac{\Delta t}{|T_2(F)|R\omega_{T_2(F)}}\right) r_F^{n+1} +$$
$$\sum_{\substack{F' \subset \partial T_1(F) \\ F \neq F'}} \left(A_{F,F'} + \frac{\Delta t}{|T_1(F)|R\omega_{T_1(F)}} \xi_{T_1(F)\,F'}\, \xi_{T_1(F)\,F}\right) r_{F'}^{n+1} +$$
$$\sum_{\substack{F' \subset \partial T_2(F) \\ F \neq F'}} \left(A_{F,F'} + \frac{\Delta t}{|T_2(F)|R\omega_{T_2(F)}} \xi_{T_2(F)\,F'}\, \xi_{T_2(F)\,F}\right) r_{F'}^{n+1} =$$
$$(1-\lambda\Delta t)\xi_{T_1(F)\,F} c^n_{T_1(F)} - \frac{\Delta t}{|T_1(F)|R\omega_{T_1(F)}} \sum_{F' \subset \partial T_1(F)} \xi_{T_1(F)\,F'}\, c^{n,\star} u_{F'} +$$
$$(1-\lambda\Delta t)\xi_{T_2(F)\,F} c^n_{T_2(F)} - \frac{\Delta t}{|T_2(F)|R\omega_{T_2(F)}} \sum_{F' \subset \partial T_2(F)} \xi_{T_2(F)\,F'}\, c^{n,\star} u_{F'} \quad \forall F \notin \partial\Omega, F = T_1 \cap T_2,$$
$$\left(A_{F,F} + \frac{\Delta t}{|T_1(F)|R\omega_{T_1(F)}}\right) r_F^{n+1} +$$
$$\sum_{\substack{F' \subset \partial T_1(F) \\ F \neq F'}} \left(A_{F,F'} + \frac{\Delta t}{|T_1(F)|R\omega_{T_1(F)}} \xi_{T_1(F)\,F'}\right) r_{F'}^{n+1} =$$
$$-c_d + (1-\lambda\Delta t) c^n_{T_1(F)} - \frac{\Delta t}{|T_1(F)|R\omega_{T_1(F)}} \sum_{F' \subset \partial T_1(F)} \xi_{T_1(F)\,F'}\, c^{n+1,\star} u_{F'} \quad \forall F = T \cap \partial\Omega.$$

Remarque 1 *Dans le code de calcul le stockage est représenté par un sous-domaine où la concentration est constamment égale à 1.*

5.4 Séparation d'opérateurs

L'opérateur de transport est la somme de plusieurs opérateurs : la diffusion-dispersion, l'advection, la décroissance radioactive et éventuellement la chimie. La technique de séparation d'opérateurs permet de ramener le problème de transport à la résolution d'une suite de problèmes correspondant à chacun des opérateurs. Ceci nous permettra en particulier d'utiliser des pas de temps différents pour la diffusion-dispersion et pour l'advection de sorte que ces pas de temps correspondent à l'échelle de temps de ces différents phénomènes.

La méthode de séparation d'opérateurs a fait l'objet d'une large littérature [36, 35, 63, 17, 41, 43, 68, 14, 33]. Nous nous contenterons d'une décomposition d'odre 1, tous les essais d'utiliser des décompositions d'ordre 2, en particulier dans les cas avec la chimie, n'ayant pas été très convaincants jusqu'ici.

Le pas de temps Δt servira de pas de temps de diffusion et il sera divisé en M pas de temps d'advection Δt_c tels que $\Delta t = M\Delta t_c$ avec $M \geq 1$, l'échelle de temps d'advec-

tion étant en général plus petite que celle de diffusion-dispersion. En fait le pas de temps d'advection sera controlé par une condition CFL (5.3.1) qui déterminera la valeur de M. En procédant ainsi on pourra faire plusieurs pas de temps d'advection pour un pas de temps de diffusion, ce qui conduira à d'importants gains de temps de calcul, les pas de temps de diffusion-dispersion étant beaucoup plus coûteux que ceux d'advection puisqu'ils impliquent la résolution d'un système linéaire de grande taille.

En reprenant les techniques de discrétisation spatiale présentée ci-dessus, la décomposition d'opérateur s'écrit pour notre problème comme ci-dessous pour un pas de temps de (t_n, t_{n+1}).

Etape d'advection dans un sous-domaine

On note par $c_h^{n,m}$ l'approximation de c a l'instant $t_{n,m}$ avec $c^{n,0} = c^n$.
Le schéma d'Euler décentré amont explicite pour l'équation d'advection s'écrit

$$\int_T R\omega \frac{c_h^{n,m+1} - c_h^{n,m}}{\Delta t_c} + \int_{\partial T} c_h^{n,m\,\star} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_T = 0, \quad m = 0, \ldots, M-1$$

où $c_h^{n,m\,\star}$ est la concentration amont. Ceci se récrit encore

$$|T| R\omega_T \frac{c_T^{n,m+1} - c_T^{n,m}}{\Delta t_c} + \sum_{F \subset \partial T} c_F^{n,m\,\star} \xi_{TF} u_F = 0.$$

En sommant sur m on obtient :

$$c_T^{n,M} = c_T^{n,0} - \frac{\Delta t}{R\omega |T|} \sum_{F \subset \partial T} [\frac{1}{M} \sum_{m=0}^{M-1} c_F^{n,m\,\star}]\, \xi_{TF} u_F = 0. \tag{5.4.1}$$

Etape de diffusion dans un sous-domaine

Etant donné $c_h^{n,M}$ obtenu dans l'étape d'advection, on calcule $c_h^{n+1} \in \mathcal{M}_h$ et $\mathbf{r}^{n+1} \in \mathbf{W}_h$ tels que :

$$\int_T R\omega \frac{c^{n+1} - c^{n,M}}{\Delta t} + \int_{\partial T} \mathbf{r}^{n+1} \cdot \mathbf{n} + \int_T R\omega\lambda c^{n+1} = 0, \quad T \in \mathcal{T}_h,$$

$$\int_\Omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{r}^{n+1} \cdot \mathbf{w} - \int_\Omega c^{n+1} \mathrm{div}\ \mathbf{w} = -\int_{\Gamma_D} c_d\, \mathbf{r}^{n+1} \cdot \mathbf{n}_\Omega, \quad \mathbf{w} \in \mathcal{W}_h.$$

La première équation donne

$$c_T^{n+1} = \frac{1}{(1+\lambda\Delta t)} c_T^{n,M} - \frac{\Delta t}{(1+\lambda\Delta t)} \frac{1}{|T| R\omega} \sum_{F \subset \partial T} \xi_{TF} r_F^{n+1}.$$

Si F est une face intérieure interface entre les mailles T_1 et T_2 :

$$A_{F,F} + \sum_{\substack{F' \neq F \\ F' \subset \partial T_1(F) \cup \partial T_2(F)}} A_{F,F'}\, r_{F'}^{n+1}\, r_F^{n+1} - (\xi_{T_1(F)\,F}\, c_{T_1(F)}^{n+1} + \xi_{T_2(F)\,F}\, c_{T_2(F)}^{n+1}) = 0.$$

En remplaçant c_T^{n+1} par sa valeur on obtient

$$\left(A_{F,F} + \frac{\Delta t}{(1+\lambda\Delta t)}\frac{1}{|T_1(F)|R\omega_{T_1(F)}} + \frac{\Delta t}{(1+\lambda\Delta t)}\frac{1}{|T_2(F)|R\omega_{T_2(F)}}\right) r_F^{n+1} +$$
$$\sum_{\substack{F' \subset \partial T_1(F) \\ F \neq F'}} \left(A_{F,F'} + \frac{\Delta t}{(1+\lambda\Delta t)}\frac{1}{|T_1(F)|R\omega_{T_1(F)}}\xi_{T_1(F)\,F'}\,\xi_{T_1(F)\,F}\right) r_{F'}^{n+1} +$$
$$\sum_{\substack{F' \subset \partial T_2(F) \\ F \neq F'}} \left(A_{F,F'} + \frac{\Delta t}{(1+\lambda\Delta t)}\frac{1}{|T_2(F)|R\omega_{T_2(F)}}\xi_{T_2(F)\,F'}\,\xi_{T_2(F)\,F}\right) r_{F'}^{n+1} =$$
$$\frac{1}{(1+\lambda\Delta t)}(\xi_{T_1(F)\,F} c_{T_1(F)}^{n,M} + \xi_{T_2(F)\,F} c_{T_2(F)}^{n,M}).$$

Si $F \subset \Gamma_D$:

$$\left(A_{F,F} + \frac{\Delta t}{(1+\lambda\Delta t)}\frac{1}{|T_1(F)|R\omega_{T_1(F)}}\right) r_F^{n+1} +$$
$$\sum_{\substack{F' \subset \partial T_1(F) \\ F \neq F'}} \left(A_{F,F'} + \frac{\Delta t}{(1+\lambda\Delta t)}\frac{1}{|T_1(F)|R\omega_{T_1(F)}}\xi_{T_1(F)\,F'}\right) r_{F'}^{n+1} = -c_d^{n+1} + \frac{1}{(1+\lambda\Delta t)} c_{T_1(F)}^{n,M}.$$

Remarque 2 **Si** $F \subset \partial S$ *: faces frontières de la zone du stockage orientées vers l'intérieur de la source*

$$\left(A_{F,F} + \frac{\Delta t}{(1+\lambda\Delta t)}\frac{1}{|T_1(F)|R\omega_{T_1(F)}}\right) r_F^{n+1} +$$
$$\sum_{\substack{F' \subset \partial T_1(F) \\ F \neq F'}} \left(A_{F,F'} + \frac{\Delta t}{(1+\lambda\Delta t)}\frac{1}{|T_1(F)|R\omega_{T_1(F)}}\xi_{T_1(F)\,F'}\right) r_{F'}^{n+1} = -1 + \frac{1}{(1+\lambda\Delta t)} c_{T_1(F)}^{n,M}.$$

Si $F \subset \partial S$ *: Faces frontières de la zone du stockage orientées vers l'extérieure de la source*

$$\left(A_{F,F} + \frac{\Delta t}{(1+\lambda\Delta t)}\frac{1}{|T_2(F)|R\omega_{T_2(F)}}\right) r_F^{n+1} +$$
$$\sum_{\substack{F' \subset \partial T_2(F) \\ F \neq F'}} \left(A_{F,F'} + \frac{\Delta t}{(1+\lambda\Delta t)}\frac{1}{|T_2(F)|R\omega_{T_2(F)}}\xi_{T_1(F)\,F'}\right) r_{F'}^{n+1} = 1 - \frac{1}{(1+\lambda\Delta t)} c_{T_1(F)}^{n,M}.$$

Si $F^\circ \subset S$:

$$\begin{aligned} & c_{T_2} = 1 \\ & A_{F,F}\, r_F^{n+1} + \sum_{\substack{F' \neq F \\ F' \subset \partial T_1(F) \cup \partial T_2(F)}} A_{F,F'}\, r_{F'}^{n+1} = 0. \end{aligned}$$

5.5 Résultats numériques

On s'intéresse principalement au problème du stockage des déchets radioactifs en couches géologiques profondes. Nous présenterons une simulation réaliste du déplacement d'iode dans le domaine Ω décrit au chapitre 2. Le stockage S est considéré comme une source où la concentration est constante et égale à un à chaque pas de temps.

Nous rappelons que le domaine se compose de plusieurs couches géologiques qui présentent de très fortes hétérogénéités. De plus, les coefficients des tenseurs de diffusion-dispersion varient de plusieurs ordres de grandeurs d'une couche géologiques à l'autre. Le maillage de calcul est de le même que celui utilisé pour le calcul de la vitesse voir figure 2.2.1. Il est composé d'environ 500 000 hexaèdres et c'est la vitesse calculéé avec ce maillage que nous avons utilisé pour le transport. Le système linéaire à résoudre à chaque pas de temps est symétrique et mal conditionné. L'inversion de ce système est effectuée grâce à la librairie **Aztec**, [2], par la méthode de gradient conjugué précondionné par la méthode LU incomplète. Typiquement on fait environ 15 itérations quand on résout sur l'ensemble du domaine.

Pour économiser les temps de calcul, nous avons en fait étendu les domaines de calcul, couche géologique par couche géologique, au fur et à mesure que le domaine contaminé grandissait, avec au départ seulement la couche collavo-oxfordien comme domaine de calcul. Nous avons utilisé un pas de temps de diffusion-dispersion égale à $\Delta t = 100$ ans pour effectuer les calculs dans toutes les couches géologiques du domaine. Le pas de temps d'advection Δt_c est calculé sous-domaine par sous-domaine en satisfaisant la condition CFL, et donné dans le tableau 5.1. Cependant il est toujours tel que $\Delta t_c \leq \Delta t$ et dans les couches où la vitesse est très faible on a en fait $\Delta t_c = \Delta t$.

Les concentrations d'iode sont montrées dans les figures suivantes, au fur et à mesure que le domaine contaminé grandissait, aux instants t = 100 000, 130 000, 246 000, 400 000 et 460 000 années. Pour chacun de ces instants on montre une section horizontale et une section verticale.

Couche	zone	SD	Δt_c	nstep SD
Tithonien	Reg.	13	60 jours	6038
Tithonien	Loc.	12	6 jours	5632
Kimmér.	Partie affleurée.	11	6 heures	136914
Kimmér.	Reg.	10	100 ans	1
Kimmér.	Loc.	9	100 ans	1
Ox. L2a-L2b	Reg.	8	1 année	81
Ox. L2a-L2b	Loc.	7	100 ans	1
Ox. Hp1-Hp4	Reg.	6	13 ans	8
Ox. Hp1-Hp4	Loc.	5	100 ans	1
Ox. C3a-C3b	Reg.	4	100 ans	1
Ox. C3a-C3b	Loc.	3	100 ans	1
C-Ox.	Reg.	2	100 ans	1
C-Ox.	Loc.	1	100 ans	1

TAB. 5.1 – Pas de temps d'advection et nombre d'itérations calculés pour chaque sous-domaine

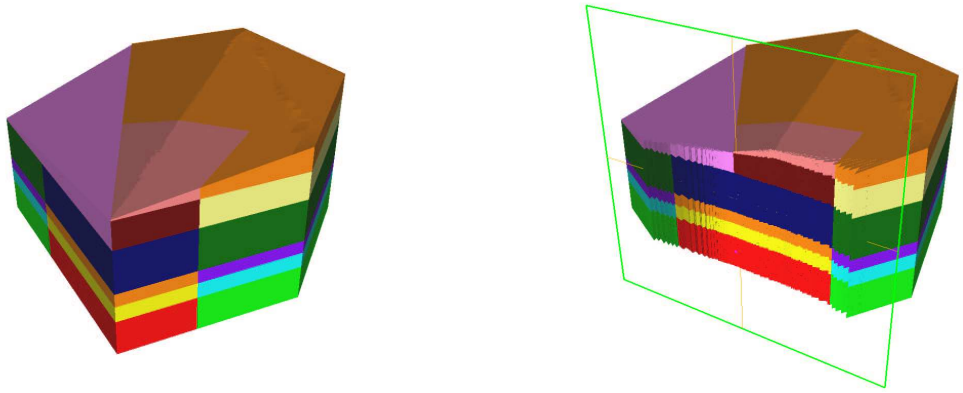

FIG. 5.5.1 – Droite : domaine Ω' obtenu par dilatation du domaine réel d'un facteur de 30 selon l'axe Oz. Gauche : une coupe verticale du domaine. Cette coupe traverse tous les sous-domaines et le stockage qui se situe dans le sous-domaine rouge.

Résolution à l'instant t= 100 000 ans

Le faible effet des coefficients de diffusion-dispersion permettent à l'iode de sortir de la couche du collavo-oxfordien, au bout de cent mille ans environ (voir figure 5.5.2), et malgré sa décroissance radioactive, elle finit par atteindre la surface du sol. Nous présentons sur la figure 5.5.1 à gauche le domaine Ω'. La figure 5.5.1 à droite représente une coupe verticale du domaine Ω' qui traverse les couches géologiques et le stockage qui se situe dans la couche du collavo-oxfordien coloré en rouge. Dans la suite nous allons visualiser les valeurs de la concentration sur cette coupe.

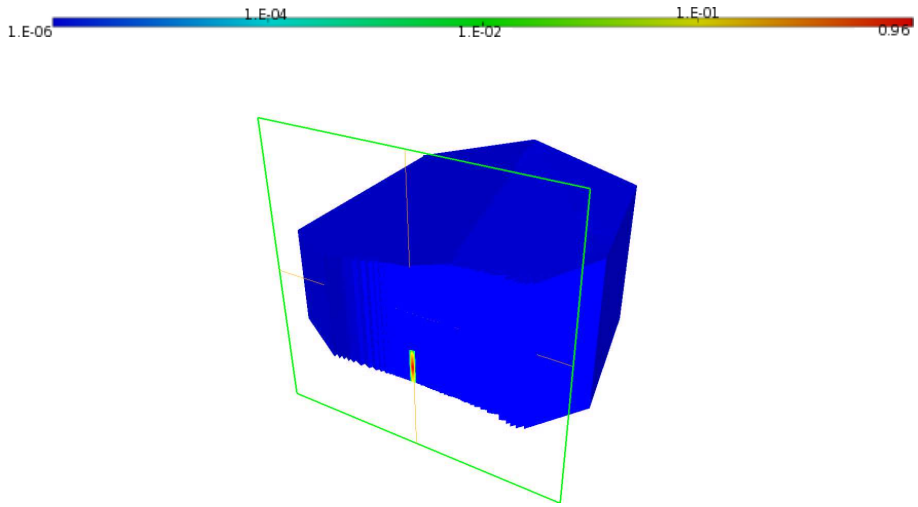

Fig. 5.5.2 – Visualisation des concentrations sur une coupe verticale du domaine calculées à l'instant t = 100 000 années.

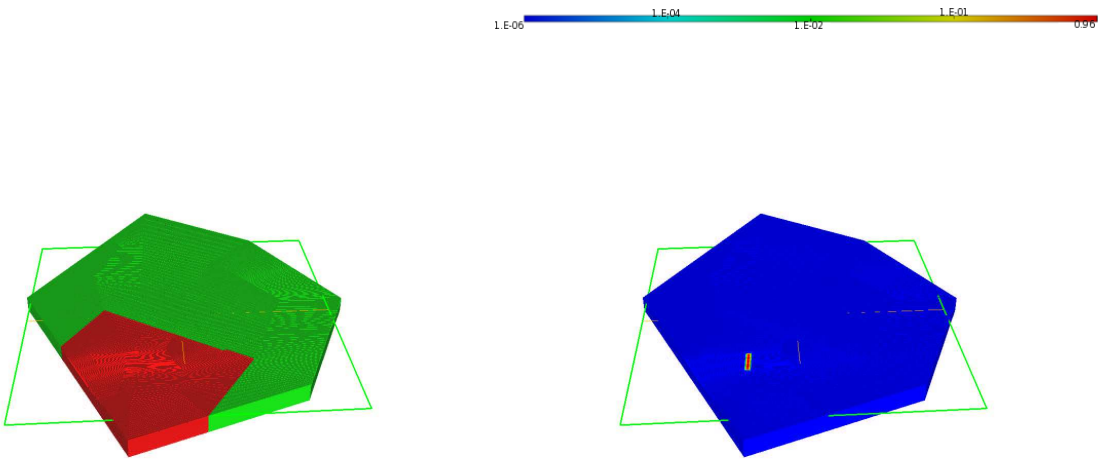

FIG. 5.5.3 – Gauche : une coupe d'équation $0.0062x+0.0098y-z-1.4e+04 = 0$ du domaine, cette coupe traverse la couche du collavo-oxfordien. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 100 000 années.

La figure 5.5.2 montre des résultats sur une coupe verticale (voir figure 5.5.1 à gauche) du domaine, calculés dans la couche collavo-oxfordien par la méthode de séparation d'opérateurs au bout de 100 000 années. Cette couche est très imperméable voir tableau 2.2 car elle contient le stockage de radionucléides. Le pas de temps d'advection est choisi égale au pas de temps de diffusion-dispersion $\Delta t_c = 100$ ans. Le résultat est obtenu au bout de 100 itérations.

Nous visualisons les résultats des concentrations (voir figure 5.5.3 à droite) sur une coupe d'équation $0.0062x + 0.0098y - z - 1.4e + 04 = 0$ (voir figure 5.5.3 à gauche) de la couche du collavo-oxfordien. Cette couche est divisée en deux zones, la zone locale colorée en rouge et la zone régionale colorée en vert. Le sous-domaine rouge contient le site de stockage.

Résolution à l'instant t = 130 000 ans

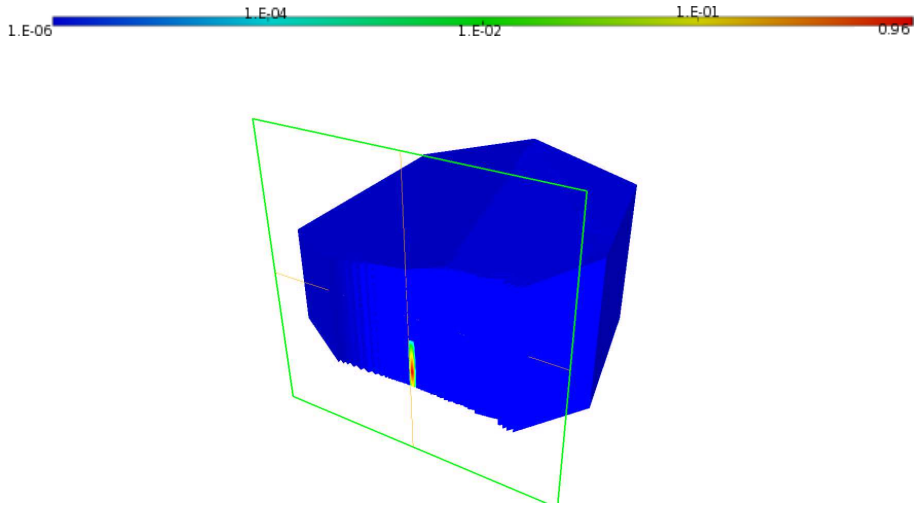

FIG. 5.5.4 – Visualisation des concentrations sur une coupe verticale du domaine calculées à l'instant t = 130 000 années

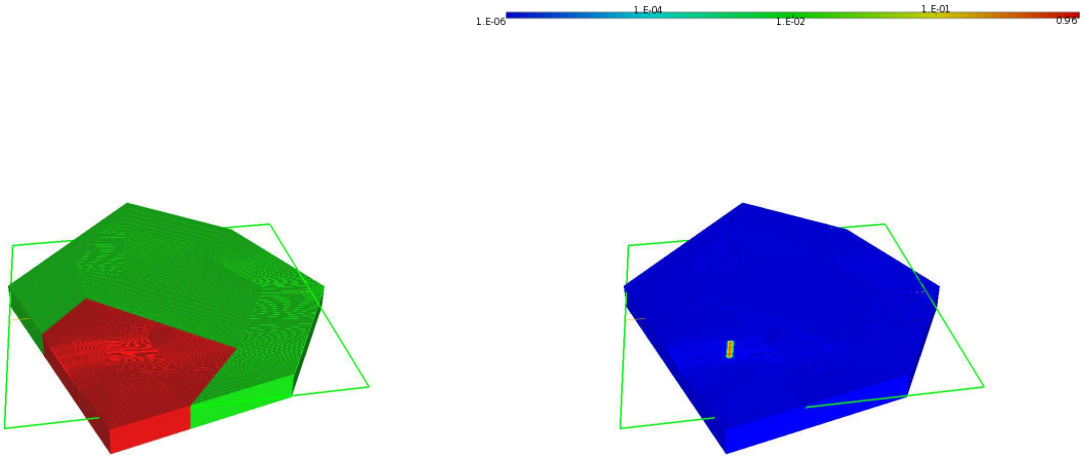

FIG. 5.5.5 – Gauche : une coupe d'équation $-0.0079x + 0.0096y - z + 1.2e + 03 = 0$ du domaine , cette coupe traverse la couche du collavo-oxfordien. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 130 000 années.

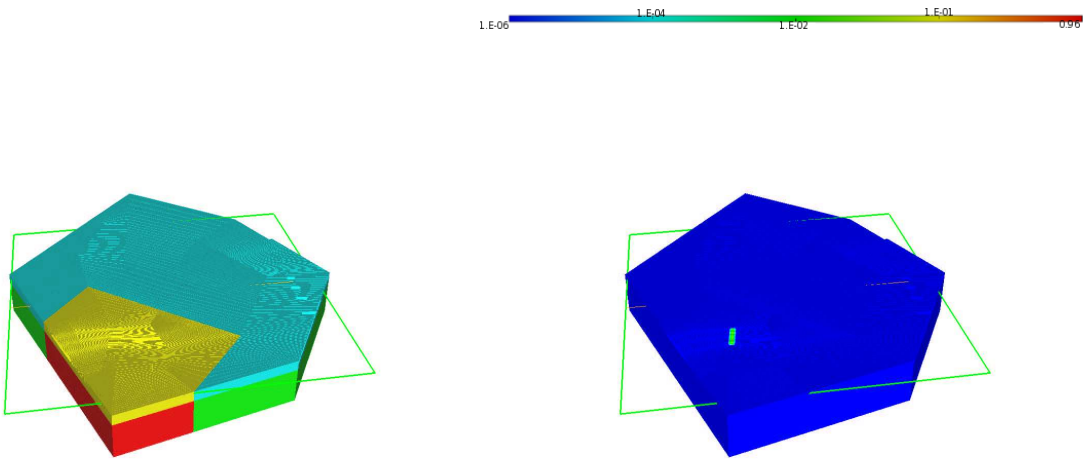

FIG. 5.5.6 – Gauche : une coupe d'équation $-0.0079x + 0.0096y - z + 9.7e + 02 = 0$ du domaine, cette coupe traverse la couche du C3a-C3b. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 130 000 années.

Ensuite, nous avons effectué les calculs dans la couche collavo-oxfordien et la couche C3a-C3b à l'instant t= 130 000 années en utilisant un pas de temps d'advection égale au pas de temps de diffusion-dispersion $\Delta t = \Delta t_c = 100$ ans.

Sur la figure 5.5.4 on observe le résultat de concentration sur une coupe verticale (voir figure 5.5.1 à gauche) du domaine. Nous visualisons aussi les concentrations sur deux coupes (voir figures 5.5.5 et 5.5.6 à droite). La première coupe traverse la couche du collavo-oxfordien (voir figure 5.5.5 à gauche) et la deuxième coupe traverse la couche du C3a-C3b (voir 5.5.6 à gauche). On observe comment les contaminants tendent vers les couches supérieurs.

Résolution à l'instant t = 246 000 ans

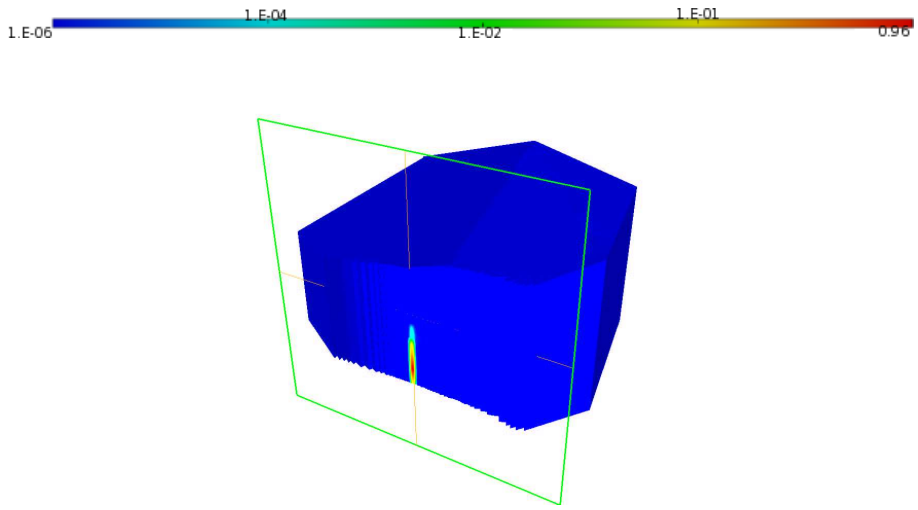

FIG. 5.5.7 – Visualisation des concentrations sur une coupe verticale du domaine calculées à l'instant t = 246 000 années

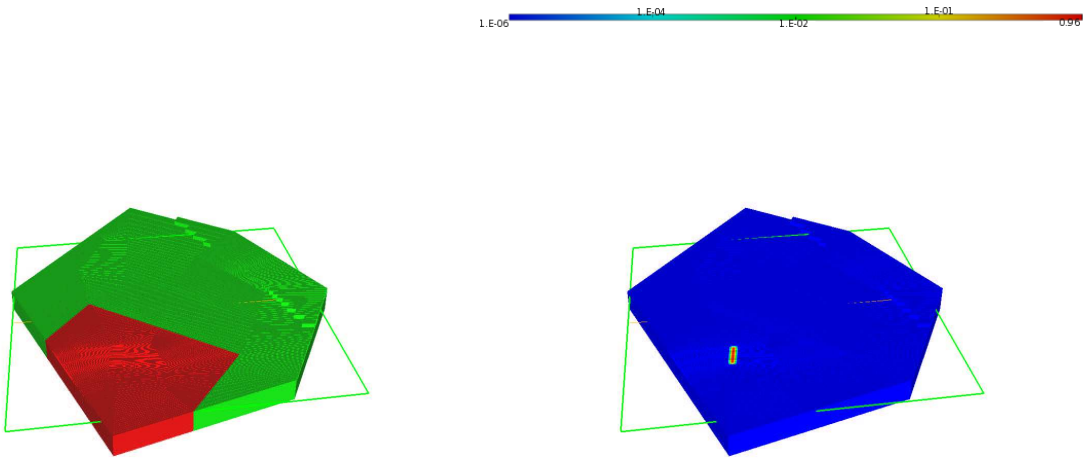

FIG. 5.5.8 – Gauche : une coupe d'équation $-0.012x + 0.0096y - z + 4.5e + 03 = 0$ du domaine, cette coupe traverse la couche du collavo-oxfordien. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 246 000 années.

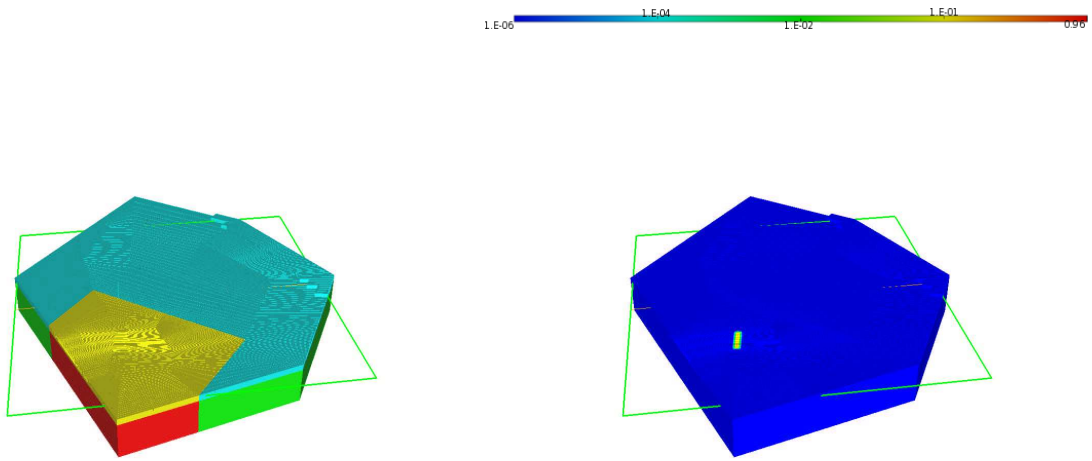

FIG. 5.5.9 – Gauche : une coupe d'équation $-0.012x + 0.0096y - z + 6.6e + 03 = 0$ du domaine , cette coupe traverse la couche du C3a-C3b. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 246 000 années.

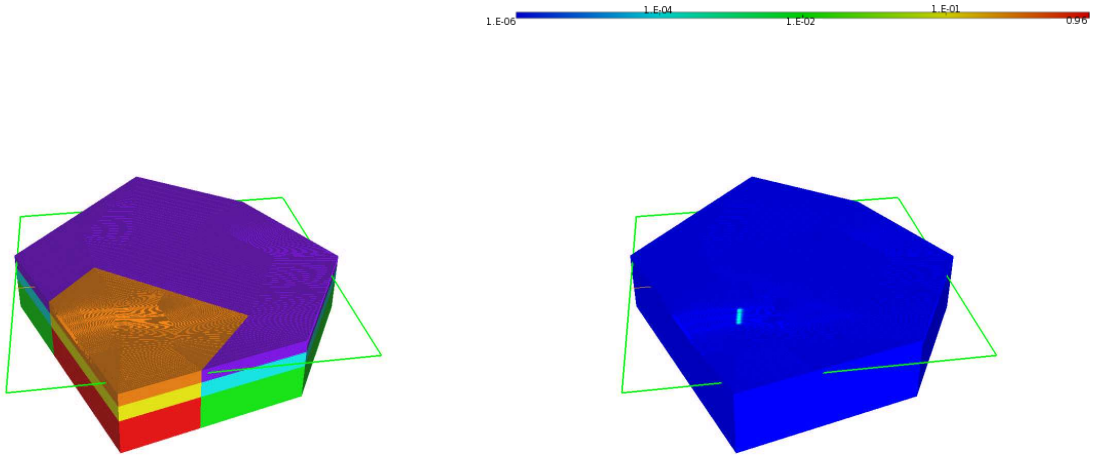

FIG. 5.5.10 – Gauche : une coupe d'équation $-0.012x + 0.0096y - z + 8.9e + 03 = 0$ du domaine, cette coupe traverse la couche du Hp1-Hp4. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 246 000 années.

Nous avons effectué les calculs dans la couche collavo-oxfordien, la couche C3a-C3b et la couche du Hp1-Hp4 au bout de 264 000 années. Le pas de temps d'advection calculé dans ces trois couches est 8 fois plus petit que le pas de temps de diffusion-dispersion i.e. $\Delta t_c = 13$ ans. Nous observons les résultats des concentrations premièrement sur la coupe verticale 5.5.7, ensuite sur trois coupes (voir figures 5.5.8, 5.5.9 et 5.5.10 à droite).

La première coupe traverse la couche du collavo-oxfordien (voir figure 5.5.8 à gauche), la deuxième coupe traverse la couche du C3a-C3b (voir 5.5.9 à gauche) et la troisième coupe traverse la couche du Hp1-Hp4 (voir 5.5.10 à gauche).

Résolution à l'instant t = 460 000 ans

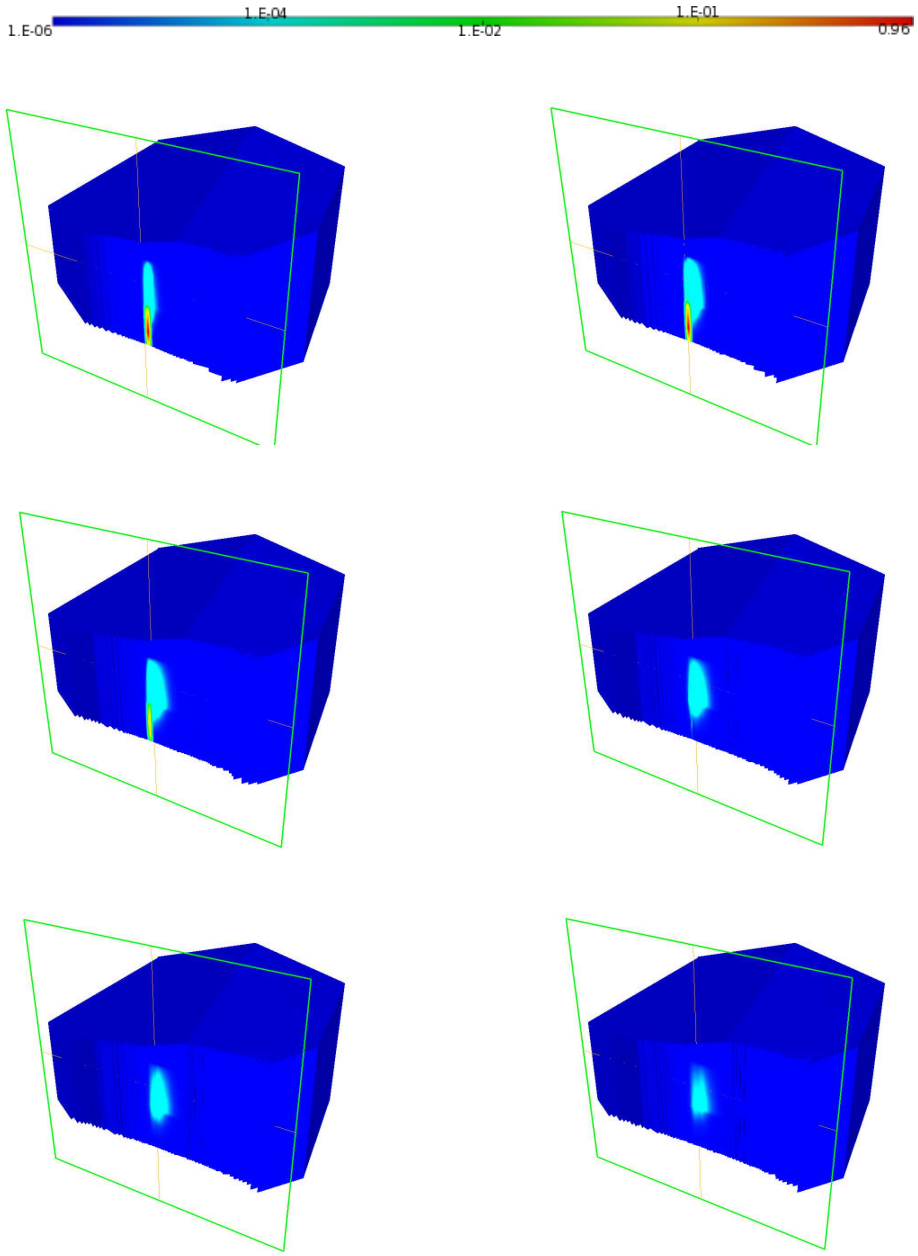

FIG. 5.5.11 – Concentrations calculées à la date t= 460 000 années présentées sur six coupes verticales parallèles qui traversent les zones locales du domaine.

Nous avons effectué les calculs dans la couche collavo-oxfordien, la couche C3a-C3b, la couche du Hp1-Hp4 et la couche L2a-L2b à l'instant t = 460 000 années. Le pas de temps d'advection calculé dans ces quatres couches est 81 fois plus petit que le pas de temps de diffusion-dispersion i.e. $\Delta t_c = 1$ année.

L'évolution des concentrations à l'instant t = 460 000 années sur six coupes verticales parallèles qui traversent les zones locales du domaine sont illustrées sur la figure 5.5.11. On observe comment les contaminants se convectent et se diffusent dans les zones locales des couches Hp1-Hp4 et L2a-L2b en se dirigeant vers les zones régionales. Le coefficient de diffusion-dispersion est très important dans la couche du Hp1-Hp4 par rapport aux autres couches géologiques.

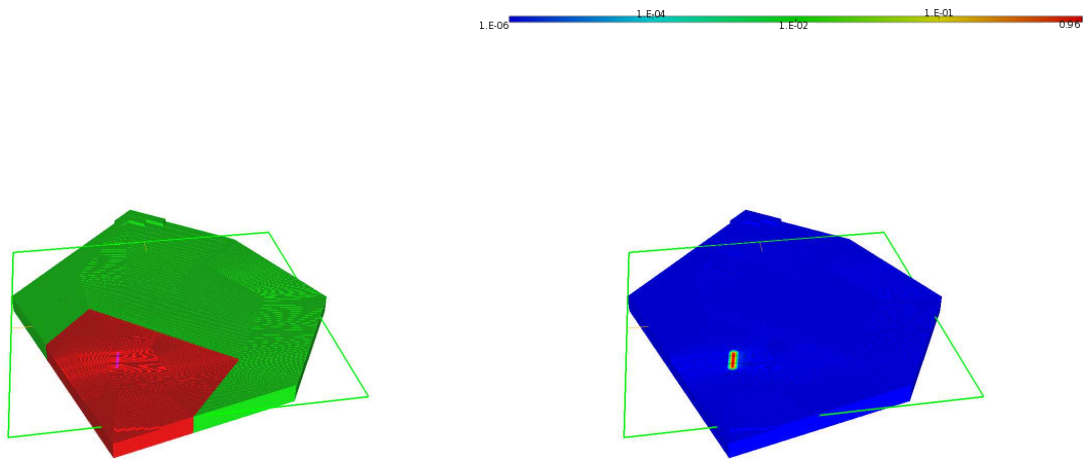

FIG. 5.5.12 – Gauche : une coupe d'équation $-0.0056x - 0.0039y - z + 1.1e + 04 = 0$ du domaine, cette coupe traverse la couche du collavo-oxfordien. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 460 000 années.

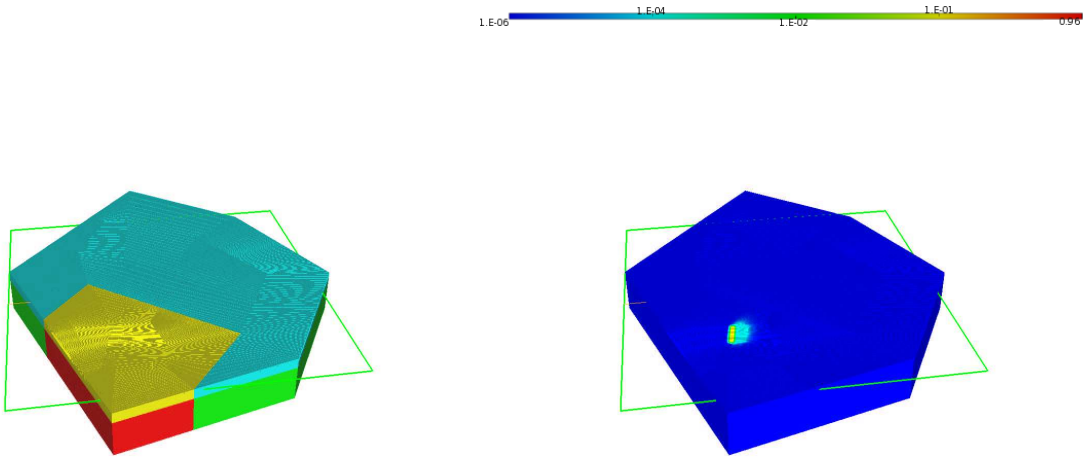

FIG. 5.5.13 – Gauche : une coupe d'équation $-0.0056x - 0.0039y - z + 1.4e + 04 = 0$ du domaine, cette coupe traverse la couche du C3a-C3b. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 460 000 années.

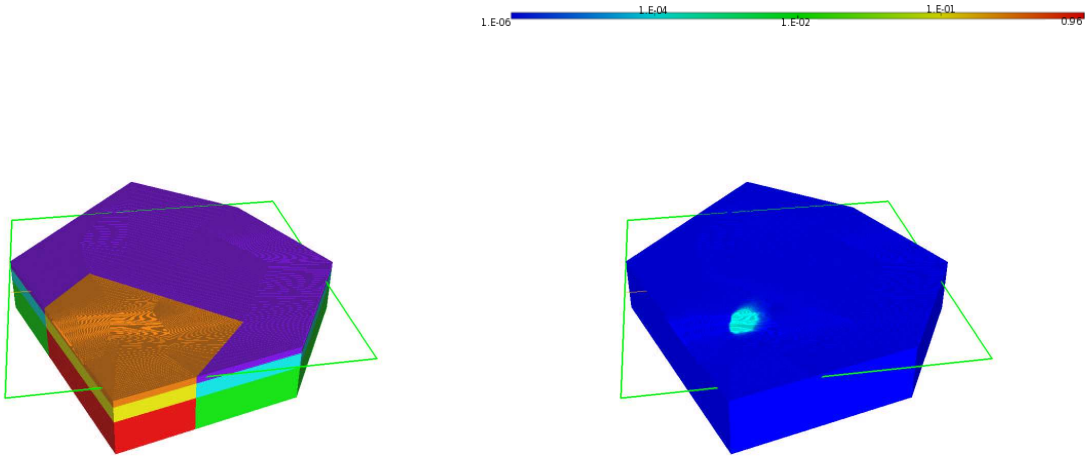

FIG. 5.5.14 – Gauche : une coupe d'équation $-0.0056x - 0.0039y - z + 1.5e + 04 = 0$ du domaine , cette coupe traverse la couche du Hp1-Hp4. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 460 000 années.

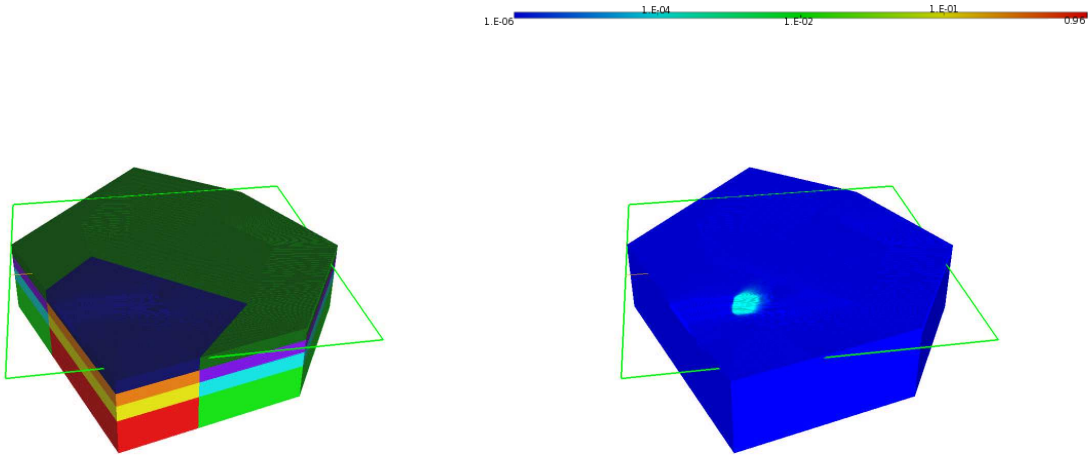

FIG. 5.5.15 – Gauche : une coupe d'équation $-0.0056x - 0.0039y - z + 1.7e + 04 = 0$ du domaine , cette coupe traverse la couche du L2a-L2b. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 460 000 années.

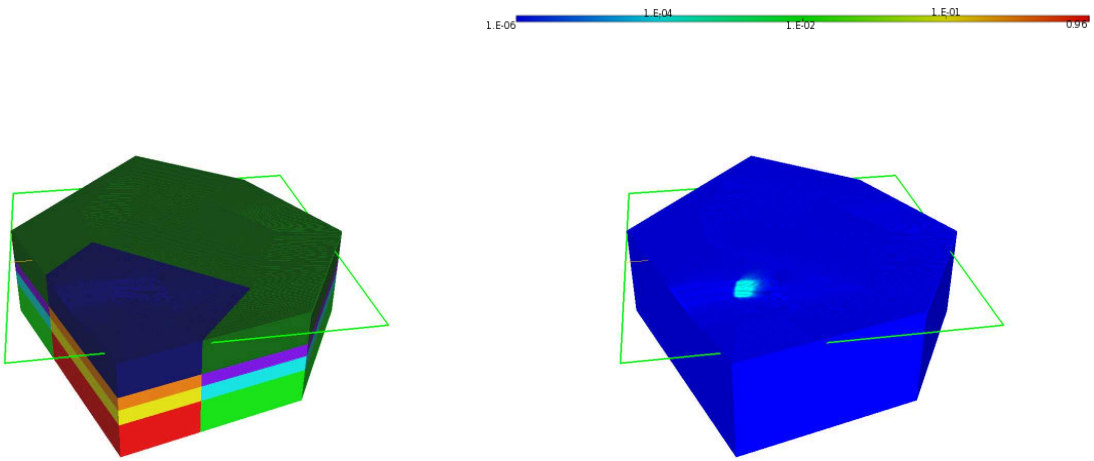

FIG. 5.5.16 – Gauche : une coupe d'équation $-0.0056x - 0.0039y - z + 2e + 04 = 0$ du domaine , cette coupe traverse la couche du L2a-L2b. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 460 000 années.

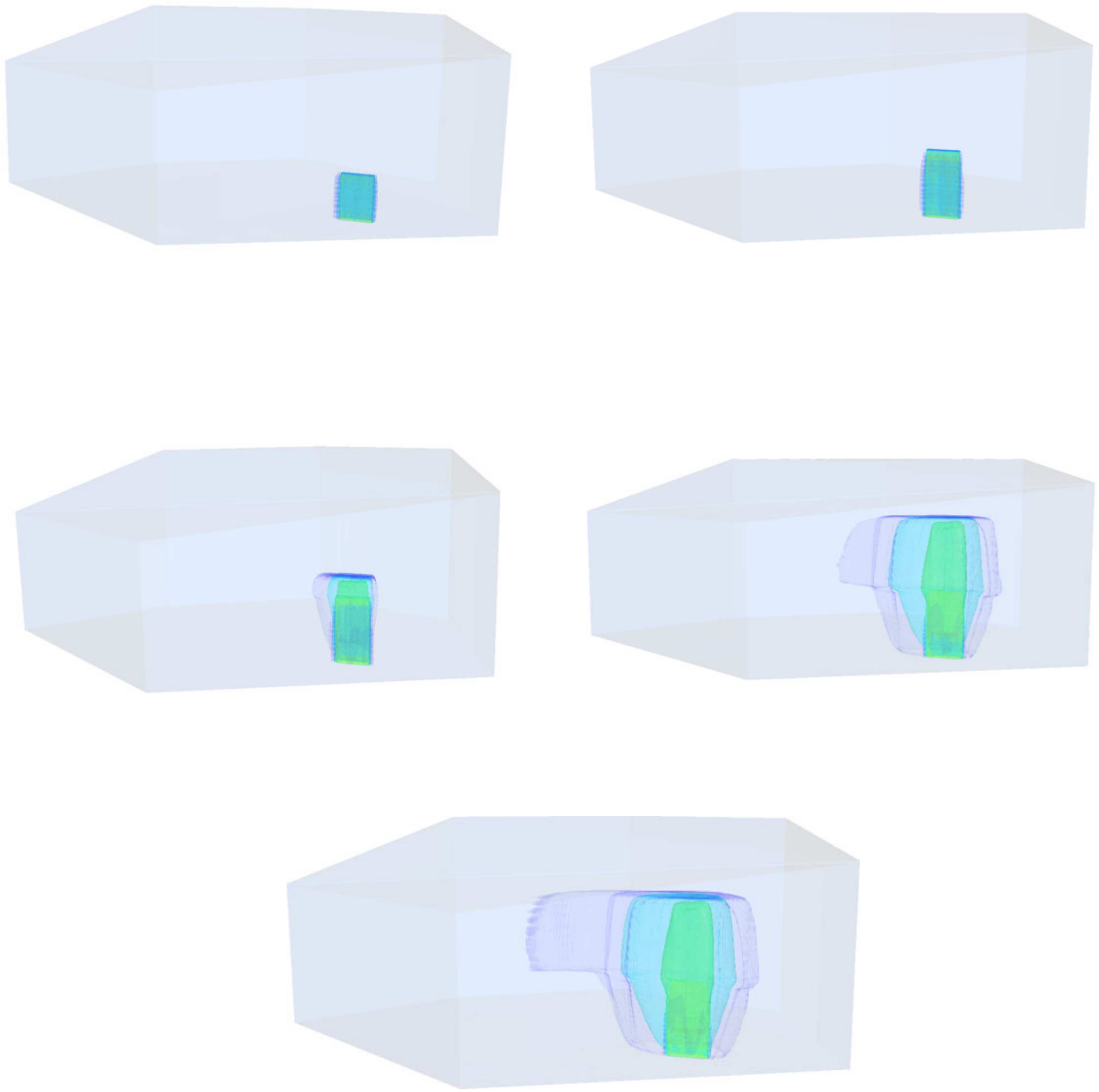

FIG. 5.5.17 – Isosurfaces de la concentration données à t = 100 000 ans, t = 130 000 ans, t = 246 000 ans, t = 400 000 ans et à t = 460 000 ans. Les isovaleurs 10^{-6}, 10^{-4}, 10^{-2}, 0.96 sont utilisées

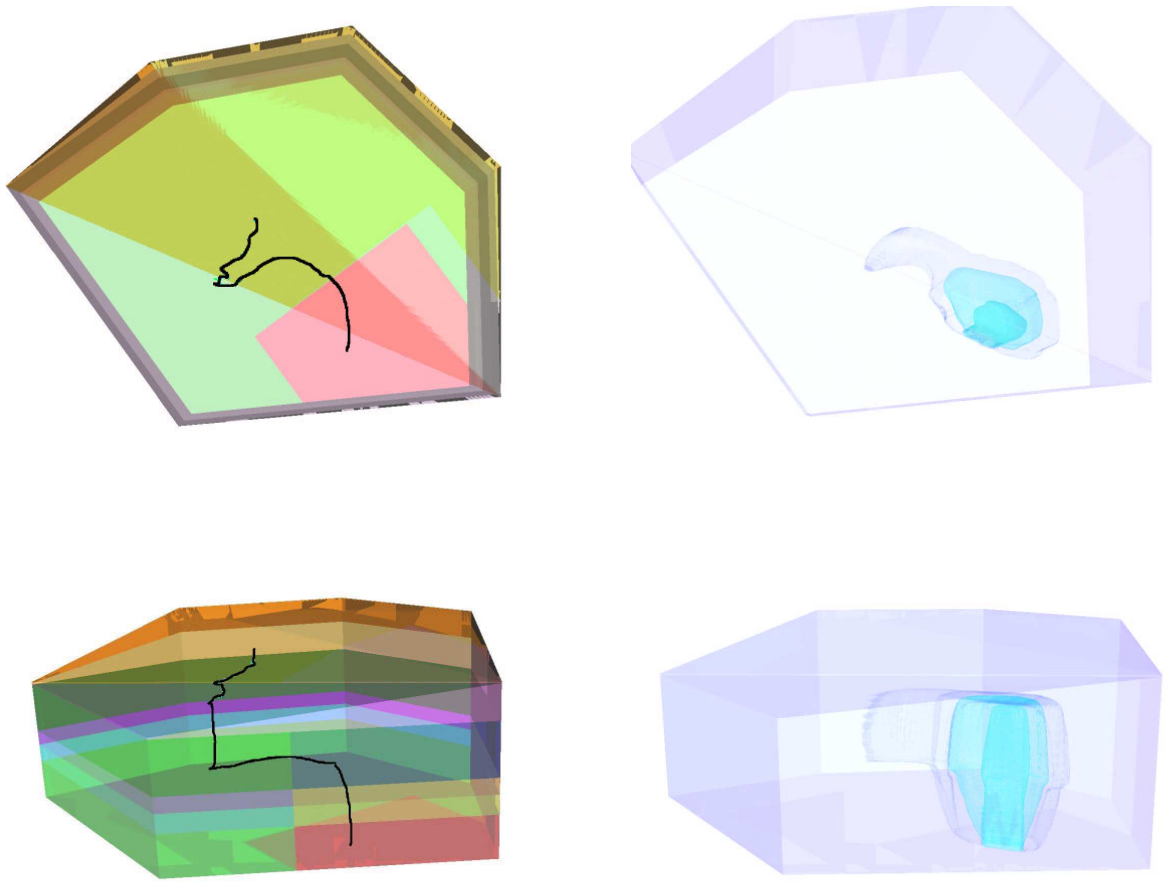

Fig. 5.5.18 – Gauche : Vues horizontale et verticale d'une ligne de courant correspondante au sens de l'écoulement de l'eau. Droite : Vues horizontale et verticale des isosurfaces de la concentration données à t = 460 000 ans.

La figure 5.5.17 montre l'évolution de la concentration aux instant respectifs t = 130 000 ans, t = 246 000 ans, t = 400 000 ans et t = 460 000 ans. Les effets de la diffusion sont observés dans tout le domaine et surtout dans la couche géologique du Hp1-Hp4 car le coefficient de diffusion-dispersion est très important par rapport aux autres couches géologiques voir tableau 2.2. L'effet de l'advection est très important dans la couche du Hp1-Hp4 où il entraîne un mouvement de la droite vers la gauche comme on peut l'observer dans la figure 5.5.18. Les contaminants sont transportés par la vitesse de l'ecoulement de l'eau.

Nous avons arrêté la simulation à l'instant t = 460 000 ans car les contaminants commencent à arriver à la surface et la condition de concentrations nulle sur le bord du domaine de calcul n'est plus réaliste.

De plus dans le Kimméridgien les vitesses de Darcy sont beaucoup plus grandes et le pas de temps d'advection devient très petit voir tableau 5.1, d'autant plus que le maillage est raffiné au voisinage de la surface. Le calcul de l'advection devient alors très cher. La solution que nous proposons pour résoudre ce problème est d'utiliser des pas de temps par sous-domaine, ce qui permettrait d'utiliser les petits pas de temps que dans les régions où cela est nécessaire. Une autre solution serait évidemment de résoudre implicitement l'advection, mais cela se fera au détriment de la précision.

Chapitre 6

Conclusions et Perspectives

Dans cette thèse, les simulations de l'écoulement souterrain et du transfert de contaminants en milieu poreux saturé sont traitées. Trois aspects différents ont été abordés.

Dans la première partie, nous nous sommes intéressés au développement, à l'analyse et à l'implémentation d'une nouvelle méthode d'éléments finis mixtes sur des maillages tridimensionnels d'hexaèdres déformés. L'approche classique concernant l'utilisation de la méthode des éléments finis mixtes standard sur les maillages d'hexaèdres déformés ne permet pas de conserver les champs de vitesse uniformes [49]. Des expériences numériques ont été réalisées montrant l'accord de la théorie avec l'expérience de cette nouvelle méthode, ce qui n'est pas le cas pour les méthodes classiques. Cette méthode est inspirée des travaux de Kuznetsov et Repin [38, 39].

Cette méthode n'est pas adaptée sur des maillages formés d'hexaèdres avec des faces qui ne sont pas planes.

Dans la deuxième partie, nous nous sommes intéressés aux schémas de discrétisation en temps pour le transport. Nous présentons une méthode de discrétisation en temps pour un transport advectif en dimension deux telles que des pas de temps différents sont utilisés dans différents sous-domaines en espace. L'équation est discrétisée par un schéma d'Euler explicite ou implicite décentré amont. Le raccord entre les grilles en temps est réalisé de sorte que le schéma numérique reste conservatif. Dans le cas des deux schémas, les résultats numériques ont montré que la méthode de discrétisation en temps pourrait remplacer une méthode utilisant un pas de temps unique, sans perte de précision.

Ces résultats permettent d'espérer des gains de temps de calcul importants dans des situations complexes en trois dimensions car ils ouvrent la possibilité d'adapter les pas de temps aux échelles de temps des sous-domaines, ces échelles peuvent varier de plusieurs ordres de grandeur d'un milieu géologique à un autre.

En dernière partie, nous avons résolu l'équation de transport en milieu poreux saturé et hétérogène. Notre modèle de transport des radionucléides prend en compte les phénomènes de diffusion-dispersion, advection, adsorption (par l'intermédiaire du coefficient de retard) et de décroissance radioactive. Nous avons résolu le problème de transport sur un exemple réaliste fourni par l'**Andra** pour simuler le comportement d'un stockage profond des déchets radioactifs. Les simulations du transport des contaminants dans cette

situation conduit à des temps de calcul très importants. Pour tenir compte de ce que les échelles de temps pour la diffusion et l'advection ne sont pas liées entre elles, et afin d'économiser du temps de calcul, nous utilisons la méthode de séparation d'opérateurs.

Par ailleurs, dans des milieux hétérogènes les échelles de temps peuvent varier de façon considérable d'une région à l'autre du domaine de calcul, et on voudrait donc pouvoir utiliser des pas de temps par sous-domaines pour l'advection comme cela a été montré au chapitre 4 ou des schémas numériques locaux, et pour la diffusion-dispersion ce qui implique l'utilisation de méthode de décomposition de domaines.

Annexe A

The Piola transformation

We define by F the diffeomorphism application which transform the reference element $\hat{K}$ on the current element K, i.e. F($\hat{K}$)=K. We give the transformation F in the following cases :

✓ for triangles

$$G\begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0 + a_1\hat{x} + a_2\hat{y} \\ b_0 + b_1\hat{x} + b_2\hat{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

where the the coefficients a_0, a_1, a_2, b_0, b_1 et b_2 are defined by :

$$G\begin{pmatrix} x_{\hat{A}} \\ y_{\hat{A}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_A \\ y_A \end{pmatrix}$$

and

$$G\begin{pmatrix} x_{\hat{B}} \\ y_{\hat{B}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_B \\ y_B \end{pmatrix}$$

and

$$G\begin{pmatrix} x_{\hat{C}} \\ y_{\hat{C}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_C \\ y_C \end{pmatrix}$$

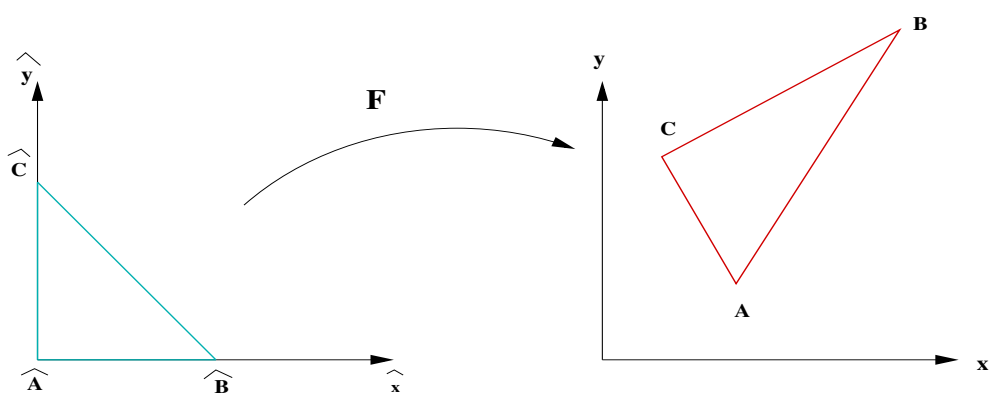

Fig. A.0.1 – The transformation G in the triangle case

✓ for tetrahedra :

$$G\begin{pmatrix}\hat{x}\\ \hat{y}\\ \hat{z}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_0+a_1\hat{x}+a_2\hat{y}+a_3\hat{z}\\ b_0+b_1\hat{x}+b_2\hat{y}+b_3\hat{z}\\ c_0+c_1\hat{x}+c_2\hat{y}+c_3\hat{z}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix}$$

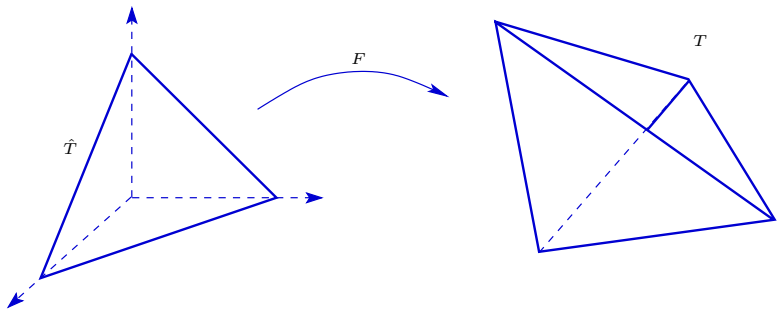

FIG. A.0.2 – The transformation G in the tetrahedron case

✓ for quadrelaterals :

$$G\begin{pmatrix}\hat{x}\\ \hat{y}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_0+a_1\hat{x}+a_2\hat{y}+a_3\hat{x}\hat{y}\\ b_0+b_1\hat{x}+b_2\hat{y}+b_3\hat{x}\hat{y}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}$$

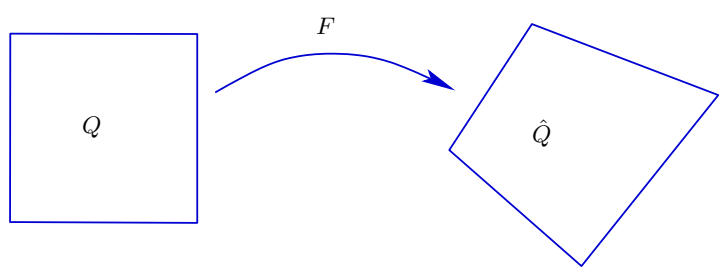

FIG. A.0.3 – The transformation G in the quadrelateral case

✓ for hexahedera :

$$\begin{aligned} G\begin{pmatrix}\hat{x}\\ \hat{y}\\ \hat{z}\end{pmatrix} &= \begin{pmatrix}a_0+a_1\hat{x}+a_2\hat{y}+a_3\hat{z}+a_4\hat{x}\hat{y}+a_5\hat{y}\hat{z}+a_6\hat{x}\hat{z}+a_7\hat{x}\hat{y}\hat{z}\\ b_0+b_1\hat{x}+b_2\hat{y}+b_3\hat{z}+b_4\hat{x}\hat{y}+b_5\hat{y}\hat{z}+b_6\hat{x}\hat{z}+b_7\hat{x}\hat{y}\hat{z}\\ c_0+c_1\hat{x}+c_2\hat{y}+c_3\hat{z}+c_4\hat{x}\hat{y}+c_5\hat{y}\hat{z}+c_6\hat{x}\hat{z}+c_7\hat{x}\hat{y}\hat{z}\end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix} \end{aligned} \tag{A.0.1}$$

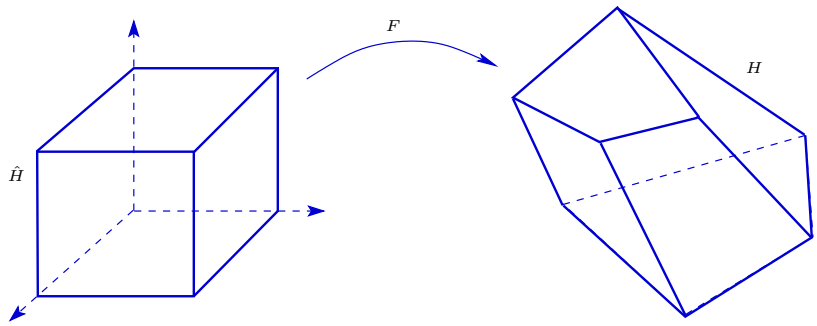

FIG. A.0.4 – The transformation G in the hexahedron case

The transformation G induces a mapping, the Piola transformation, which is given by

$$\begin{array}{rcl} F^{\star} & : & \mathbf{H}(\text{div}\,;\hat{K}) \longrightarrow \mathbf{H}(\text{div}\,;K) \\ & & \hat{\mathbf{u}} \quad \mapsto \quad \mathbf{u}, \end{array}$$

Let DG the jacobian matrix defined by $DG_{ij} = \dfrac{\partial G^i}{\partial \hat{x}_j}$ We denote by J the determinant of DG, then we have that The Piola transformation is defined by

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = F^{\star}(\hat{\mathbf{u}})(\mathbf{x}) = \frac{1}{J} DG(\hat{\mathbf{x}})\hat{\mathbf{u}}(\hat{\mathbf{x}}) \quad \text{with} \quad \mathbf{x} = G(\hat{\mathbf{x}})$$

With a tetrahedral mesh G is affine then the Piola transformation yields a bijection between $\mathbf{RTN}_0(\hat{K})$ and $\mathbf{RTN}_0(K)$ and the vectors fields are given by the following expressions

$$\hat{\mathbf{u}}_{h|\hat{K}} = \begin{pmatrix} a\hat{x} + b_1 \\ a\hat{y} + b_2 \\ a\hat{z} + b_3 \end{pmatrix} \quad \mapsto \quad \mathbf{u}_{h|K} = \begin{pmatrix} a'x + b'_1 \\ a'y + b'_2 \\ a'z + b'_3 \end{pmatrix}$$

With a hexahedral mesh G is not affine but trilinear so there is no reason for $F^*(\mathbf{RTN}_0(\hat{H}))$ to form a reasonable approximation space.
In particular $F^*(\mathbf{RTN}_0(\hat{H}))$ need not contain the constant functions.

The following useful properties about Piola transformation can be found in [11, 58]

1. We have the identity div $\mathbf{u} = \dfrac{1}{\mid J \mid}$div $\hat{\mathbf{u}} \quad \forall \mathbf{u} \in \mathbf{H}(\text{div}; \Omega)$
2. let $\hat{\phi}$ the scalair function on $\hat{K}$. We defined ϕ on K by :

   $$\phi(\mathbf{x}) = \hat{\phi}(\hat{\mathbf{x}}) = \hat{\phi}(G^{-1}(\hat{\mathbf{x}}))$$

   then

   $$\int_K \phi \text{ div } \mathbf{u} dx = \int_{\hat{K}} \hat{\phi} \hat{\text{div}} \ \hat{\mathbf{u}} d\hat{x}$$

3.
$$\int_K \phi \, \vec{\nabla} \mathbf{u} dx = \int_{\hat{K}} \hat{\phi} \, \hat{\vec{\nabla}} \hat{\mathbf{u}} d\hat{x}$$

4.
$$\int_{\partial K} \phi \, \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} d\sigma = \int_{\partial \hat{K}} \hat{\phi} \, \hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{n}} d\hat{\sigma}$$

where $\mathbf{n}$ is the unit normal on ∂K and $\hat{\mathbf{n}}$ is the unit normal on $\partial \hat{K}$.

Annexe B

Notes on the program for difformed hexahedrons

B.1 Geometry

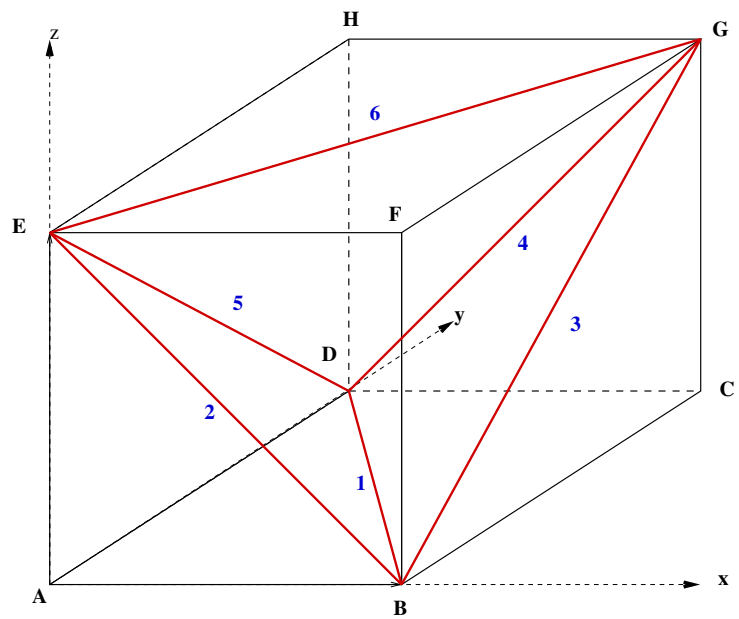

Fig. B.1.1 – Reference hexaedron divided into 5 tetrahedrons

Vertices	A	B	C	D	E	F	G	H
Vertex number	1	2	3	4	5	6	7	8
Vertex index in C++	0	1	2	3	4	5	6	7

TAB. B.1 – Vertex numbering in the reference hexahedron of Fig. B.1.1

.

The faces of the hexahedron are denoted $FH_i, i = 1, \ldots .6$. Their numbering is shown in blue on Fig. B.1.1 and their area is denoted by $|FH_i|$. The volume of the hexahedron H is denoted by $|H|$. Note that this volume is calculated by dividing the hexahedron into 24 tetrahedrons, adding one point at the barycenter and one at the barycenter of each face. Then the area of the faces are calculated by dividing each hexahedron face into 4 planar triangular faces joining at the face barycenters.

Tetrahedron 1	Vertices	A	B	D	E
	Vertex numbers	1	2	4	5
	Vertex indices in C++	0	1	3	4
Tetrahedron 2	Vertices	F	G	B	E
	Vertex numbers	6	7	2	5
	Vertex indices in C++	5	6	1	4
Tetrahedron 3	Vertices	C	D	B	G
	Vertex numbers	3	4	2	7
	Vertex indices in C++	2	3	1	6
Tetrahedron 4	Vertices	H	G	E	D
	Vertex numbers	8	7	5	4
	Vertex indices in C++	7	6	4	3
Tetrahedron 5	Vertices	B	D	E	G
	Vertex numbers	2	4	5	7
	Vertex indices in C++	1	3	4	6

TAB. B.2 – Definition of the 5 tetrahedrons in the division shown in Fig. B.1.1

.

Very important : To take care of difformed hexahedrons, each hexahedron is divided into 24 tetrahedrons using the barycenter of the hexahedron and the barycenters of the faces in addition to the vertices. When we refer to the volume of the hexahedron H, denoted by $|H|$ we mean the sum of the volumes of these 24 hexahedrons. An integral over the hexahedron is are calculated as the sums of the integrals over these 24 tetrahedrons.

When we refer to a face FH of the hexahedron, we mean that we add the barycenter of this face to its 4 vertices and the face is actually the union of the 4 triangles built on these 5 points. Then the area of the face is the sum of the areas all integrals over a face are calculated as the sums of the integrals over these 4 triangles.

B.2 Basis functions

In each tetrahedron $T_\ell, \ell = 1, \cdots, 5$, the faces are denoted $FT_{\ell,i}, i = 1, \ldots, 4$ and numbered in order that it has the same number as the vertex facing it. Therefore, if we denote $\mathbf{s}^{\ell,i}, i = 1, \ldots, 4$, the vertices of the tetrahedron T_ℓ, the RTN_0 basis in this tetrahedron is

$$\mathbf{w}_{T_\ell,i} = \frac{|FT_{\ell,i}|}{3|T_\ell|}(\mathbf{x} - \mathbf{s}^{\ell,i}), \quad i = 1, \ldots, 4, \ell = 1, \cdots, 5$$

where $|FT_{\ell,i}|$ denotes the area of the face $FT_{\ell,i}$ and $|T_\ell|$ the volume of the tetrahedron T_ℓ. These basis functions are such that

$$\mathbf{w}_{T_\ell,i} \cdot \mathbf{n}_j = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, 3, 4$$

where $\mathbf{n}_j$ denotes the unit outward normal to the face $FT_{\ell,j}$. Therefore they satisfy also

$$\text{div } \mathbf{w}_{T_\ell,i} = \frac{|FT_{\ell,i}|}{|T_\ell|}, \quad i = 1, \ldots, 4, \ell = 1, \cdots, 5$$

The basis functions for the new KP basis are denoted, for a given hexahedron H, by $\mathbf{w}_{Hi}, i = 1, \ldots, 6$ and are such that

$$\int_{FH_j} \mathbf{w}_{Hi} \cdot \mathbf{n}_j = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \cdots, 6.$$

They must be written tetrahedron by tetrahedron and the restriction of $\mathbf{w}_{Hi}$ to the ℓth tetrahedron is denoted by $\mathbf{w}_{Hi,\ell}, i = 1, \ldots, 6, \ell = 1, \ldots, 5$. These functions can be written as

Tetrahedron 1 :

$$\begin{aligned}
\mathbf{w}_{H1,1} &= \left(\mathbf{w}_{T_1,4} + \frac{|T_1||FH_1| - |FT_{1,4}||H|}{|FT_{1,1}||H|}\mathbf{w}_{T_1,1}\right)/|FH_1| \\
\mathbf{w}_{H2,1} &= \left(\mathbf{w}_{T_1,3} + \frac{|T_1||FH_2| - |FT_{1,3}||H|}{|FT_{1,1}||H|}\mathbf{w}_{T_1,1}\right)/|FH_2| \\
\mathbf{w}_{H3,1} &= \frac{|T_1|}{|FT_{1,1}||H|}\mathbf{w}_{T_1,1} \\
\mathbf{w}_{H4,1} &= \frac{|T_1|}{|FT_{1,1}||H|}\mathbf{w}_{T_1,1} \\
\mathbf{w}_{H5,1} &= \left(\mathbf{w}_{T_1,2} + \frac{|T_1||FH_5| - |FT_{1,2}||H|}{|FT_{1,1}||H|}\mathbf{w}_{T_1,1}\right)/|FH_5| \\
\mathbf{w}_{H6,1} &= \frac{|T_1|}{|FT_{1,1}||H|}\mathbf{w}_{T_1,1}
\end{aligned}$$

Tetrahedron 2 :

$$
\begin{aligned}
\mathbf{w}_{H1,2} &= \frac{|T_2|}{|FT_{2,1}||H|}\mathbf{w}_{T_2,1} \\
\mathbf{w}_{H2,2} &= \left(\mathbf{w}_{T_2,2} + \frac{|T_2||FH_2| - |FT_{2,2}||H|}{|FT_{2,1}||H|}\mathbf{w}_{T_2,1}\right)/|FH_2| \\
\mathbf{w}_{H3,2} &= \left(\mathbf{w}_{T_2,4} + \frac{|T_2||FH_3| - |FT_{2,4}||H|}{|FT_{2,1}||H|}\mathbf{w}_{T_2,1}\right)/|FH_3| \\
\mathbf{w}_{H4,2} &= \frac{|T_2|}{|FT_{2,1}||H|}\mathbf{w}_{T_2,1} \\
\mathbf{w}_{H5,2} &= \frac{|T_2|}{|FT_{2,1}||H|}\mathbf{w}_{T_2,1} \\
\mathbf{w}_{H6,2} &= \left(\mathbf{w}_{T_2,3} + \frac{|T_2||FH_6| - |FT_{2,3}||H|}{|FT_{2,1}||H|}\mathbf{w}_{T_2,1}\right)/|FH_6|
\end{aligned}
$$

Tetrahedron 3 :

$$
\begin{aligned}
\mathbf{w}_{H1,3} &= \left(\mathbf{w}_{T_3,4} + \frac{|T_3||FH_1| - |FT_{3,4}||H|}{|FT_{3,1}||H|}\mathbf{w}_{T_3,1}\right)/|FH_1| \\
\mathbf{w}_{H2,3} &= \frac{|T_3|}{|FT_{3,1}||H|}\mathbf{w}_{T_3,1} \\
\mathbf{w}_{H3,3} &= \left(\mathbf{w}_{T_3,2} + \frac{|T_3||FH_3| - |FT_{3,2}||H|}{|FT_{3,1}||H|}\mathbf{w}_{T_3,1}\right)/|FH_3| \\
\mathbf{w}_{H4,3} &= \left(\mathbf{w}_{T_3,3} + \frac{|T_3||FH_4| - |FT_{3,3}||H|}{|FT_{3,1}||H|}\mathbf{w}_{T_3,1}\right)/|FH_4| \\
\mathbf{w}_{H5,3} &= \frac{|T_3|}{|FT_{3,1}||H|}\mathbf{w}_{T_3,1} \\
\mathbf{w}_{H6,3} &= \frac{|T_3|}{|FT_{3,1}||H|}\mathbf{w}_{T_3,1}
\end{aligned}
$$

Tetrahedron 4 :

$$
\begin{aligned}
\mathbf{w}_{H1,4} &= \frac{|T_4|}{|FT_{4,1}||H|}\mathbf{w}_{T_4,1} \\
\mathbf{w}_{H2,4} &= \frac{|T_4|}{|FT_{4,1}||H|}\mathbf{w}_{T_4,1} \\
\mathbf{w}_{H3,4} &= \frac{|T_4|}{|FT_{4,1}||H|}\mathbf{w}_{T_4,1} \\
\mathbf{w}_{H4,4} &= \left(\mathbf{w}_{T_4,3} + \frac{|T_4||FH_4| - |FT_{4,3}||H|}{|FT_{4,1}||H|}\mathbf{w}_{T_4,1}\right)/|FH_4| \\
\mathbf{w}_{H5,4} &= \left(\mathbf{w}_{T_4,2} + \frac{|T_4||FH_5| - |FT_{4,2}||H|}{|FT_{4,1}||H|}\mathbf{w}_{T_4,1}\right)/|FH_5| \\
\mathbf{w}_{H6,4} &= \left(\mathbf{w}_{T_4,4} + \frac{|T_4||FH_6| - |FT_{4,4}||H|}{|FT_{4,1}||H|}\mathbf{w}_{T_4,1}\right)/|FH_6|
\end{aligned}
$$

Tetrahedron 5 :

$$
\begin{aligned}
\mathbf{w}_{H1,5} &= \Bigg(-\frac{|T_1||FH_1| - |FT_{1,4}||H|}{|FT_{5,4}||H|}\mathbf{w}_{T_5,4} - \frac{|T_2||FH_1|}{|FT_{5,2}||H|}\mathbf{w}_{T_5,2} \\
&\quad - \frac{|T_3||FH_1| - |FT_{3,4}||H|}{|FT_{5,3}||H|}\mathbf{w}_{T_5,3} - \frac{|T_4||FH_1|}{|FT_{5,1}||H|}\mathbf{w}_{T_5,1}\Bigg)/|FH_1| \\
\mathbf{w}_{H2,5} &= \Bigg(-\frac{|T_1||FH_2| - |FT_{1,3}||H|}{|FT_{5,4}||H|}\mathbf{w}_{T_5,4} - \frac{|T_2||FH_2| - |FT_{2,2}||H|}{|FT_{5,2}||H|}\mathbf{w}_{T_5,2} \\
&\quad - \frac{|T_3||FH_2|}{|FT_{5,3}||H|}\mathbf{w}_{T_5,3} - \frac{|T_4||FH_2|}{|FT_{5,1}||H|}\mathbf{w}_{T_5,1}\Bigg)/|FH_2| \\
\mathbf{w}_{H3,5} &= \Bigg(-\frac{|T_1||FH_3|}{|FT_{5,4}||H|}\mathbf{w}_{T_5,4} - \frac{|T_2||FH_3| - |FT_{2,3}||H|}{|FT_{5,2}||H|}\mathbf{w}_{T_5,2} \\
&\quad - \frac{|T_3||FH_3| - |FT_{3,2}||H|}{|FT_{5,3}||H|}\mathbf{w}_{T_5,3} - \frac{|T_4||FH_3|}{|FT_{5,1}||H|}\mathbf{w}_{T_5,1}\Bigg)/|FH_3| \\
\mathbf{w}_{H4,5} &= \Bigg(-\frac{|T_1||FH_4|}{|FT_{5,4}||H|}\mathbf{w}_{T_5,4} - \frac{|T_2||FH_4|}{|FT_{5,2}||H|}\mathbf{w}_{T_5,2} \\
&\quad - \frac{|T_3||FH_4| - |FT_{3,3}||H|}{|FT_{5,3}||H|}\mathbf{w}_{T_5,3} - \frac{|T_4||FH_4| - |FT_{4,3}||H|}{|FT_{5,1}||H|}\mathbf{w}_{T_5,1}\Bigg)/|FH_4| \\
\mathbf{w}_{H5,5} &= \Bigg(-\frac{|T_1||FH_5| - |FT_{1,2}||H|}{|FT_{5,4}||H|}\mathbf{w}_{T_5,4} - \frac{|T_2||FH_5|}{|FT_{5,2}||H|}\mathbf{w}_{T_5,2} \\
&\quad - \frac{|T_3||FH_5|}{|FT_{5,3}||H|}\mathbf{w}_{T_5,3} - \frac{|T_4||FH_5| - |FT_{4,3}||H|}{|FT_{5,1}||H|}\mathbf{w}_{T_5,1}\Bigg)/|FH_5| \\
\mathbf{w}_{H6,5} &= \Bigg(-\frac{|T_1||FH_6|}{|FT_{5,4}||H|}\mathbf{w}_{T_5,4} - \frac{|T_2||FH_6| - |FT_{2,3}||H|}{|FT_{5,2}||H|}\mathbf{w}_{T_5,2} \\
&\quad - \frac{|T_3||FH_6|}{|FT_{5,3}||H|}\mathbf{w}_{T_5,3} - \frac{|T_4||FH_6| - |FT_{4,4}||H|}{|FT_{5,1}||H|}\mathbf{w}_{T_5,1}\Bigg)/|FH_6|
\end{aligned}
$$

B.3 Error calculation

p is the exact solution, $\pi_h p$ is the L^2-projection of p in the approximation space, p_h is the calculated solution in the approximation space : $\pi_h p = \sum_i p^* \chi_i, p_h = \sum_i p_i \chi_i$ with χ_i the basis function for (the characteristic function of) the element H_i. p_i^* is the average of p over this element and p_i is the corresponding calculated degree of freedom. Therefore

$$\mathrm{err}_p^2 = \|p_h - \pi_h p\|_0^2 = \int_\Omega |\sum_i |p_i - p_i^*|\chi_i|^2 = \sum_i |p_i - p_i^*|^2 |H_i|.$$

For the velocity, $\mathbf{u}$ is the exact solution, $\Pi_h \mathbf{u}$ is the L^2-projection of $\mathbf{u}$ in the approximation space, $\mathbf{u}_h$ is the calculated solution in the approximation space : $\Pi_h \mathbf{u} = \sum_i u^* \mathbf{w}_i,\ \mathbf{u}_h = \sum_i u_i \mathbf{w}_i$ with $\mathbf{w}_i$ the basis function of the approximation space (a subset of H(div,Ω). u_i^* is the average flux of $\mathbf{u}$ across the face i and u_i is the corresponding calculated degree of freedom. Therefore

$$\begin{aligned}
\mathrm{err}_u^2 &= \|\mathbf{u}_h - \Pi_h \mathbf{u}\|_0^2 = \sum_\ell \int_{H_\ell} |\mathbf{u}_\ell - \mathbf{u}_\ell^*|^2 = \sum_\ell \int_{H_\ell} |\sum_{i=1,\ldots,6} (u_{\ell,i} - u_{\ell,i}^*) \mathbf{w}_{\ell,i}|^2 \\
&= \sum_{1 \le i,j \le 6} (u_{\ell,i} - u_{\ell,i}^*)(u_{\ell,j} - u_{\ell,j}^*) \int_{H_\ell} \mathbf{w}_{\ell,i} \cdot \mathbf{w}_{\ell,j} = \sum_\ell {}^t(U_\ell - U_\ell^*) AA_\ell (U_\ell - U_\ell^*)
\end{aligned}$$

where U_ℓ and U_ℓ^* are the vectors of $\mathbb{R}^6$ of the average fluxes across the faces of H_ℓ and AA_ℓ is the elementary matrix of H_ℓ : $AA(l,m) = \int_{H_\ell} \mathbf{w}_{\ell,l} \cdot \mathbf{w}_{\ell,m},\ 1 \le l, m \le 6$.

For the divergence we have

$$\mathrm{err}_{\mathrm{div}\ u}^2 = \|\mathrm{div}\ \mathbf{u}_h - \mathrm{div}\ \Pi_h \mathbf{u}\|_0^2 = \sum_\ell |\mathrm{div}\ \mathbf{u}_\ell - \mathrm{div}\ \mathbf{u}_\ell^*|^2 |H_i|$$

with div $\mathbf{u}_\ell = \sum_{i=1,\cdots,6} u_{\ell,i}/|H_\ell|$.

Liste des tableaux

2.1 Cotes des points délimitant le domaine Ω du modèle oxfordien. Le substratum ("Subs."), qui modélise la frontière inférieure, est donné en mètres, tandis que les coordonnées horizontales sont exprimées en kilomètres. . . . 16

2.2 Caractéristiques physiques de chaque sous-domaine : couche géologique (Tithonien, Kimméridgien, Oxfordien, Callovo-Oxfordien), zone (régionale ou locale), numéro du sous-domaine, épaisseur de la couche, coefficients de perméabilité selon l'horizontale et la verticale. 23

2.3 Données physiques des couches géologiques : la porosité, le coefficient de diffusion moléculaire, le coefficient longitudinal et transversal de dispersion, sont donnés dans chaque couche. 24

3.1 Pressure and velocity errors for the RTN and the KR mixed finite elements on the sequence of cubic meshes. 47

3.2 Pressure and velocity errors for the RTN and the KR mixed finite elements on the sequence of deformed meshes 1. 49

3.3 Pressure and velocity errors for the RTN and the KR mixed finite elements on the sequence of deformed meshes 2 49

3.4 Pressure and velocity errors for the RTN and the KR mixed finite elements on the sequence of deformed meshes 3 49

5.1 Pas de temps d'advection et nombre d'itérations calculés pour chaque sous-domaine 81

B.1 Vertex numbering in the reference hexahedron of Fig. B.1.1 103

B.2 Definition of the 5 tetrahedrons in the division shown in Fig. B.1.1 103

Table des figures

2.1.1 Vues extérieures du domaine 3D du modèle oxfordien. Gauche : domaine Ω à échelle réelle. Droite : domaine Ω', obtenu par dilatation du domaine Ω d'un facteur 30 selon l'axe Oz. Visualisation grâce à (outil de visualisation de maillage de l'Inria, [26]). On observe les différents sous-domaines dessinés avec des couleurs distinctes. Les sous-domaines sont stratifiés par couches horizontales. Dans chaque couche géologique, deux sous-domaines sont accolés : le premier, à l'avant sur la figure, est la zone dite "locale" qui s'encastre dans le second, la zone "régionale", dont on voit les faces latérales à gauche et à droite du premier. Le sous-domaine rouge contient le site de stockage. Visualisation grâce à (outil de visualisation de maillage de l'Inria, [26]) 14

2.1.2 Vue de dessus de la géométrie du modèle oxfordien. On distingue les deux zones, régionale et locale (hachurée en rouge), possédant des propriétés physiques différentes. L'emplacement du laboratoire de Bure est positionné au niveau de la croix verte. Le trait discontinu bleu O_1O_3 marque la limite Sud de l'affleurement du Tithonien. La ligne O_5P montre le plan de coupe de la figure 2.1.4. 15

2.1.3 Coupes horizontales des couches de Kimmeridgian et de Tithonian 16

2.1.4 Schéma simplifié d'une coupe verticale selon O_5P du modèle oxfordien, cf. figure 2.1.2. Les quatre strates hydrogéologiques principales sont indiquées. L'oxfordien se scinde en trois sous-couches. Sur les bords, dessinés en rouge, des conditions de type Dirichlet sont imposées pour le problème de l'écoulement. Sur les bords bleus, ce sont des conditions de type Neumann homogène (flux nul). Les échelles réelles ne sont évidemment pas respectées. 17

2.2.1 Un stockage est possible dans la partie rouge de la couche inférieure. 18

2.2.2 Vue de dessus du maillage du modèle oxfordien. Visualisation avec **Medit**, [26]. 19

2.2.3 Vue de dessous du maillage de la zone locale du modèle oxfordien. Echelle différente de la figure 2.2.4. Visualisation avec **Medit**, [26]. 20

2.2.4 Vue de dessous du maillage de la zone régionale du modèle oxfordien. Visualisation avec **Medit**, [26]. 21

3.1.1 A hexahedron in the form of a truncated pyramid and a constant flow field 29

3.1.2 Difficulty for a mesh of non parallelepiped hexahedra 30

3.3.1 One partition of the reference hexaedron into 5 tetrahedra 34
3.5.1 Sections $z = kh_z$, $z = (k+1)h_z$ in a deformed mesh. 47
3.5.2 An $8\times 8 \times 8$ cubic mesh with 3 deformed meshes with increasing deformation from this cubic mesh. 48
3.5.3 The domain of calculation (top) and the calculated pressure field (bottom) 50
3.5.4 Horizontal cross section of the norm of the Darcy velocity for the RTN (left) and KR (right) mixed finite elements. 51

4.2.1 Notations utilisées pour les normales et les arêtes dans les deux mailles $T_{j,k}$ et $T_{j+1,k}$ 55
4.2.2 Vitesse de Darcy dans un domaine de perméabilité constante ($\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_x > 0, \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_y > 0$) 56
4.3.1 partition du domaine : définition des sous domaines et des interfaces : $\Gamma_{12} = \Gamma_{12}^+ \cup \Gamma_{12}^-$ et $\Gamma = \Gamma_+ \cup \Gamma_-$ 57
4.3.2 La vitesse du fluide dans le cas où $K_1 = 100$ et $K_2 = 1$ 58
4.3.3 La vitesse du fluide dans le cas où $K_1 = 1$ et $K_2 = 100$ 58
4.3.4 Discrétisation en temps sur Γ_{12}^- $(M = 5)$. 60
4.3.5 Discrétisation en temps sur Γ_{12}^+ $(M = 5)$. 60
4.4.1 Concentrations dans le cas homogène $K = 1$ calculées par la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine (à gauche) et par la méthode utilisant un seul pas de temps (à droite) à l'instant $t = 30$ 61
4.4.2 Comparaison des concentrations calculées le long de la diagonale du domaine à l'instant $t = 30$ avec la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine ($\star$) et celle utilisant un seul pas de temps unique ($\diamond$). 61
4.4.3 La différence des concentrations calculées par la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine et par la méthode utilisant un seul pas de temps à l'instant $t = 30$ 62
4.4.4 Concentrations dans le cas hétérogène ($K_1 = 10$) calculées par la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaines $t = 4$, $t = 10$, $t = 20$ et $t = 30$ avec $M = 19$ 62
4.4.5 Comparaison des concentrations calculées le long de la diagonale du domaine à l'instant $t = 15$ avec la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine ($\star$) et celle utilisant un seul pas de temps unique ($\diamond$). 63
4.4.6 La différence des concentrations calculées par les deux méthodes sur chaque maille du domaine à l'instant $t = 15$ 63
4.4.7 Concentrations dans le cas hétérogène ($K_1 = 100$) calculées par la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine aux instants $t = 1$ et $t = 3$ . . 64
4.4.8 Comparaison des concentrations calculées le long de la diagonale du domaine à l'instant $t = 3$ avec la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine ($\star$) et celle calculée avec un pas de temps unique ($\diamond$). 64
4.4.9 La différence des concentrations calculées par les deux méthodes sur chaque maille du domaine à l'instant $t = 3$ 64

4.4.10 Erreurs L2 (à gauche) et L1 (à droite) en échelle logarithmique à $t = 10s$ entre la solution de référence calculée avec $h = 1/640$ et les solutions calculées avec $h = 1/10, 1/20, 1/40, 1/80$, $1/160$, $1/320$ dans le cas hétérogène $K_1 = 10, K_2 = 1$ par la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine ($\star$) et celle utilisant un seul pas de temps ($\diamond$). Cas du schéma explicite. . . 65
4.4.11 Erreurs L2 (à gauche) et L1 (à droite) en échelle logarithmique à $t = 10s$ entre la solution de référence calculée avec $h = 1/640$ et la solution calculée avec $h = 1/10$, $1/20$, $1/40$, $1/80$, $1/160$ et $1/320$ dans le cas hétérogène $K_1 = 10, K_2 = 1$ par la méthode utilisant un pas de temps par sous-domaine ($\star$) et celle utilisant un seul pas de temps ($\diamond$). Cas du schéma implicite. . . 65
4.5.1 partition du domaine : définition des sous-domaines et des interfaces : $\Gamma_{12} = \Gamma_{12}^{+} \cup \Gamma_{12}^{-}$ et $\Gamma = \Gamma_{+} \cup \Gamma_{-}$ 66
4.5.2 Le domaine de calcul et le champ de vitesse aux interfaces des sous-domaines 67

5.5.1 Droite : domaine Ω' obtenu par dilatation du domaine réel d'un facteur de 30 selon l'axe Oz. Gauche : une coupe verticale du domaine. Cette coupe traverse tous les sous-domaines et le stockage qui se situe dans le sous-domaine rouge. 81
5.5.2 Visualisation des concentrations sur une coupe verticale du domaine calculées à l'instant t = 100 000 années. 82
5.5.3 Gauche : une coupe d'équation $0.0062x + 0.0098y - z - 1.4e + 04 = 0$ du domaine, cette coupe traverse la couche du collavo-oxfordien. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 100 000 années. 83
5.5.4 Visualisation des concentrations sur une coupe verticale du domaine calculées à l'instant t = 130 000 années 84
5.5.5 Gauche : une coupe d'équation $-0.0079x + 0.0096y - z + 1.2e + 03 = 0$ du domaine , cette coupe traverse la couche du collavo-oxfordien. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 130 000 années. 84
5.5.6 Gauche : une coupe d'équation $-0.0079x + 0.0096y - z + 9.7e + 02 = 0$ du domaine, cette coupe traverse la couche du C3a-C3b. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 130 000 années. 85
5.5.7 Visualisation des concentrations sur une coupe verticale du domaine calculées à l'instant t = 246 000 années 86
5.5.8 Gauche : une coupe d'équation $-0.012x + 0.0096y - z + 4.5e + 03 = 0$ du domaine, cette coupe traverse la couche du collavo-oxfordien. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 246 000 années. 86
5.5.9 Gauche : une coupe d'équation $-0.012x + 0.0096y - z + 6.6e + 03 = 0$ du domaine , cette coupe traverse la couche du C3a-C3b. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 246 000 années. 87
5.5.10 Gauche : une coupe d'équation $-0.012x + 0.0096y - z + 8.9e + 03 = 0$ du domaine, cette coupe traverse la couche du Hp1-Hp4. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 246 000 années. 87

5.5.11 Concentrations calculées à la date t= 460 000 années présentées sur six coupes verticales parallèles qui traversent les zones locales du domaine. . . 89
5.5.12 Gauche : une coupe d'équation $-0.0056x - 0.0039y - z + 1.1e + 04 = 0$ du domaine, cette coupe traverse la couche du collavo-oxfordien. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 460 000 années. 90
5.5.13 Gauche : une coupe d'équation $-0.0056x - 0.0039y - z + 1.4e + 04 = 0$ du domaine, cette coupe traverse la couche du C3a-C3b. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 460 000 années. 90
5.5.14 Gauche : une coupe d'équation $-0.0056x - 0.0039y - z + 1.5e + 04 = 0$ du domaine , cette coupe traverse la couche du Hp1-Hp4. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 460 000 années. 91
5.5.15 Gauche : une coupe d'équation $-0.0056x - 0.0039y - z + 1.7e + 04 = 0$ du domaine , cette coupe traverse la couche du L2a-L2b. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 460 000 années. 91
5.5.16 Gauche : une coupe d'équation $-0.0056x - 0.0039y - z + 2e + 04 = 0$ du domaine , cette coupe traverse la couche du L2a-L2b. Droite : Concentrations calculées à l'instant t = 460 000 années. 92
5.5.17 Isosurfaces de la concentration données à t = 100 000 ans, t = 130 000 ans, t = 246 000 ans, t = 400 000 ans et à t = 460 000 ans. Les isovaleurs 10^{-6}, 10^{-4}, 10^{-2}, 0.96 sont utilisées 93
5.5.18 Gauche : Vues horizontale et verticale d'une ligne de courant correspondante au sens de l'écoulement de l'eau. Droite : Vues horizontale et verticale des isosurfaces de la concentration données à t = 460 000 ans. 94

A.0.1 The transformation G in the triangle case 98
A.0.2 The transformation G in the tetrahedron case 99
A.0.3 The transformation G in the quadrelateral case 99
A.0.4 The transformation G in the hexahedron case 100

B.1.1 Reference hexaedron divided into 5 tetrahedrons 102

Bibliographie

[1] *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems.* Cambridge University Press, 2002.

[2] Ray S. Tuminaro Mike Heroux Scott A.Hutchinson and John N. Shadid. Official aztec user's guide vesion 2.1. *Technical ReportSAND99-8801J, Sandia*, 1999.

[3] Stephan Schmacher Alain Bourgeat, Michel Kern and Jean Talandier. The coulplex test cases : Nuclear waste disposal simulation. special issue : Simulation of transport around a nuclear waste disposal site : The couplex test cases (editors : Alain bourgeat, michel kern). *Computational Geosciences*, 8 :83–98, 2004.

[4] A. Sboui andJ. Jaffré and J.E. Roberts. A mixed finite macroelement for distorted hexahedral grids, in preparation.

[5] D.N. Arnold and F. Brezzi. Mixed and nonconforming finite element methods : implementation, postprocessing and error estimates. *M2AN*, 19 :7–32, 1985.

[6] M. Bercovier, O. Pironneau, and V. Sastri. Finite elements and characteristics for some parabolic-hyperbolic problems. *Appl. Math. Modelling*, 7 :89–96, 1983.

[7] F. Brezzi. On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from lagrangian multipliers. *Rev. Française Automat. Informat. Recherche Operationnelle Sér. Rouge*, 8 :129–151, 1974.

[8] F. Brezzi, J. Douglas Jr, R. Duran, and M. Fortin. Mixed finite elements for second order elliptic problems in three variables. *Numer. Math.*, 51 :237–250, 1987.

[9] F. Brezzi, J. Douglas Jr, M. Fortin, and D. Marini. Efficient rectangular mixed finite elements for second order elliptic problems in two and three variables. *M2AN*, 51 :581–604, 1987.

[10] F. Brezzi, J. Douglas Jr, and D. Marini. Two families of mixed finite elements for second order elliptic problems. *Numer. Math.*, 47 :217–235, 1985.

[11] F. Brezzi and M. Fortin. *Mixed and Hybrid Finite Element Methods.* Springer-Verlag, New York, 1991.

[12] G. Chavent and J. Jaffré. *Mathematical Models ans Finite Elements for Reservoir Simulation.* 1986.

[13] G. Chavent and J. Roberts. A unified physical presentation of mixed, mixed-hybrid finite elements and standard finite difference approximations for the determination of velocities in waterflow problems. *Advances in Water Ressources*, 14(6) :329–348, 1991.

[14] C. Dawson and W. Wheeler. Time splitting methods for advection-diffusion-reaction equations arising in contaminant transport. *Industrial and Applied Mathematics, Siam*, 1992.

[15] Clint Dawson and Robert Kirby. High resolution schemes for conservation laws with locally varying time steps. *SIAM J. Sci. Comput.*, 22 :2256–2281, 2001.

[16] B. Fraeijs de Veubeke. Stress functions approach. In *World Congress on Finite Element Methods in Structural Mechanics 1, Bournemouth, England*, pages J.1–J.51, 1975.

[17] S. Descombes. Convergence of a splitting method of high order for reaction diffusion systems. *Math. Comp*, 2001.

[18] D.Boffi D.N Arnold and R.S.Falk. Approximation by quadrilateral finite elements. *Mathematics of computation 71, pp. 909-922*, 2002.

[19] D.Boffi D.N Arnold and R.S.Falk. Quadrilateral h(div) finite elements. *SIAM J. Numer. Anal.*, 42 :2429–2451, 2005.

[20] J. Douglas and J-E. Roberts. Global estimates for mixed methodes for second order elliptic equations. *Math. Comp.*, 44 :39–52, 1985.

[21] J. Douglas, Jr. 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 :871–885, 1982.

[22] J. J. Dongarra J. Du Cros I. S. Duff and S. Hammarling. Algorithm 679 : A set of level 3 basic linear algebra subprograms. *ACM Trans. Math. Soft., 16 :18-28*, 1990.

[23] J. Rodriguez E. Bécache, P. Joly. Space-time mesh refinement for elastodynamics. numerical results. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 194 :355–366, 2005.

[24] H. Hoteit R. Mosé B. Philippe Ph. Ackerer J. Erhel. About the maximum principle violations of the mixed-hybrid finite-element method applied to diffusion equations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 55 :1373–1390, 30 December 2002.

[25] R. E. Ewing, T. F. Russell, and M. F. Wheeler. Convergence analysis of an approximation of miscible displacement in porous media by mixed finite elements and a modified method of characteristics. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 47 :73–92, 1984.

[26] Pascal J. Frey. Medit : an interactive mesh visualisation software. Technical report 0253, Inria, Rocquencourt, France, Dec. 2001.

[27] Y. Maday. G. Bal. A parareal time discretization for non-linear pde's with application to the pricing of an american put, lect. *Notes Comput. Sci. Eng. Springer, Berlin MR1962689*, 23, 2002.

[28] B. Vialay et D. Perraud G. Pépin. Cahier des charges relatif à la réalisation de calculs de transport de radionucléides avec le code catem 2000. *Cahier des charges, Andra*, March 2001.

[29] V. Girault and P.A. Raviart. *Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1986.

[30] Georges Hansel. *Passeport pour C++ : concepts et mise en pratique*. Vuibert, Paris, 1999. In French.

[31] H. Hoteit, J. Erhel, R. Mosé, B. Philippe, and P. Ackerer. Numerical reliability for mixed methods applied to flow problems in porous media. *Computational Geosciences*, 6 :161–194, 2002.

[32] Hussein Hoteit. *Simulation d'écoulements et de transport de polluants en milieu poreux : Application à la modélisation de la sûreté des dépôts de déchets radioactifs*. PhD thesis, Université de Rennes 1, 2002.

[33] W. Hundsdorfer and J.G. Verwer. *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*. Springer Series in Comput. Math. 33, 2003.

[34] J.Shen. Mixed finite element methods on distorted rectangular grids. *Technical report Institute for Scientific Computation, Texas A&M University, College Station, TX*, 1994.

[35] S. Evje K. Karlsen K. Brusdal H. Dahle and K. Lie. The corrected operator splitting approach applied to a nonlinear advection-diffusion problem. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 1998.

[36] K. Karlsen and K. Risebo. An operator splitting method for convection diffusion equations. *Numer. Math*, 1997.

[37] Robert Kirby. On the convergence of high resolution methods with multiple time scales for hyperbolic conservation laws. *Mathematics of computation*, 72 :1239–1250, 2002.

[38] Yu. Kuznetzov and S. Repin. New mixed finite element method on polygonal and polyhedral meshes. *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling*, 18 :261–278, 2003.

[39] Yu. Kuznetzov and S. Repin. Convergence analysis and error estimates for mixed finite element method on distorted meshes. *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling J. Numer. Math.*, 13 :33–51, 2005.

[40] R. Luce and J.-M. Thomas. Quadrilateral and hexahedral mixed finite elements, in preparation.

[41] W. Kinton M. F. Wheeler and C. Dawson. Time-splitting for advection dominated parabolic problems in one space variable. *Comm. Appl. Numer. Methods*, 1988.

[42] M. Kern M. Gander, L. Halpern. A schwarz waveform relaxation method for advection-diffusion-reaction problems with discontinuous coefficients and non-matching grids. *A apraître dans Domain Decomposition Methods in Science and Engineering, Series : Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, 2006.

[43] G. Marchuk. Splitting and alternating direction methods. 1990.

[44] Fabien Marpeau. *Analyse mathématique et numérique de phénomènes de transport réactif en milieu poreux et en dynamique des populations*. PhD thesis, Université Bordeaux 1, 19 juillet 2005.

[45] Jerrold E. Marsden and Thomas J.R Hughes. *Mathematical Foundations of ELASITICITY*. PRENTICE-HALL, New jersey, 1983.

[46] G. De Marsily. *Hydrogéologie quantitative*. Masson, 2000.

[47] E. Anderson Z. Bai C. Bischof S. Blackford J. Demmel J. Dongarra J. Du Croz A.Greenbaum S. Hammarling A. McKenney and D. Sorensen. Lapack user's guide. *SIAM*, 1990.

[48] U. Meissner. A mixed finite element model for use in potential flow problem. *Int. J. Numer. Methods Eng*, 6 :467–473, 1973.

[49] R. L. Naff, T. F. Russell, and J. D. Wilson. Shape functions for velocity interpolation in general hexahedral cells. *Comput. Geosci.*, 6(3-4) :285–314, 2002. Locally conservative numerical methods for flow in porous media.

[50] R.L. Naff, T.F. Russell, and J.D. Wilson. Test functions for three-dimensional control-volume mixed finite-element methods on irregular grids. In et al. Bentley, L.R., editor, *Proceedings of the XIII Int. Conf. on Computational Methods in Water Resources, Calgary, Alberta, Canada*, pages 667–684, 2000.

[51] R.L. Naff, T.F. Russell, and J.D. Wilson. Shape functions for three-dimensional control-volume mixed finite-element methods on irregular grids. In S.M. et al. Hassanizadeh, editor, *Proceedings of the XIV Int. Conf. on Computational Methods in Water Resources, Delft, The Netherlands*, pages 359–366, 2002.

[52] J.-C. Nedelec. Mixed finite elements in R^3. *Numer. Math.*, 35 :315–341, 1980.

[53] J.-C. Nedelec. A new mixed finite elements in R^3. *Numer. Math.*, 50 :57–81, 1986.

[54] Stanley Osher and Richard Sanders. Numerical approximations to nonlinear conservation laws with locally varying time and space grids. *Mathematics of computation*, 41 :321–33, October 1983.

[55] J. Rodriguez P. Joly. A new space-time mesh refinement method for elastodynamics. *Proceedings of the 4th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, Eccomas2004. Jyväskylä, Finland*, July 24 - July 28, 2004.

[56] Alfio Quarteroni and Alberto Valli. *Domain decomposition methods for partial differential equations*. The Clarendon Press Oxford University Press, New York, 1999. Oxford Science Publications.

[57] P.-A. Raviart and J.-M. Thomas. A mixed finite element method method for second order elliptic problems. In I. Galligani and E. Magenes, editors, *Mathematical Aspects of Finite Element Methods ; Lecture Notes in Mathematics 606*, pages 292–315. Springer-Verlag, Berlin, 1977.

[58] J.E. Roberts and J.-M. Thomas. Mixed and hybrid methods. In P.G. Ciarlet and J.L. Lions, editors, *Handbook of Numerical Analysis Vol.II*, pages 523–639. North Holland, Amsterdam, 1991.

[59] T. F. Russell and M. A. Celia. An overview of research on eulerian-lagrangian localized adjoint methods (ellam). *Advances in Water Resources*, 25 :1215–1231, 2002.

[60] B. Larrouturou S. Piperno, C. Farhat. Partitioned procedures for the transient solution of coupled aeroelastic problems part i : Model problem, theory, and two-dimensional application. *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg*, 124 :79–112, 1995.

[61] C. Farhat S. Piperno. Partitioned procedures for the transient solution of coupled aeroelastic problems part ii : Energy transfer analysis and three-dimensional applications. *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg*, 190 :3147–3170, 2001.

[62] A. Sboui, J. Jaffré, and J.E. Roberts. Mixed hexahedral finite element for darcy flow calculation. *CMWR XVI "Computational Methods in Water ressources XVI International Conference"*, Copenhagen, Denmark June 2006.

[63] B. Sportisse. An analysis of operator splitting techniques in the stiff case. *J. Compt. Phys*, 1998.

[64] Bjarne Stroustrup. *The C++ programming language, 3rd edition.* Adison-Wesley, Reading, Massachussets, 1997.

[65] M.F. Wheeler T. Arbogast. A characteristics-mixed finite element method for advection dominated transport problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 32 :404–424, 1995.

[66] J.M. Thomas. *Sur l'Analyse Numérique des Méthodes d'Elément Finis Hybrides et Mixtes.* PhD thesis, Universit e de Pierre et Marie Curie, 1977.

[67] H. Wang, R. E. Ewing, and T. F. Russell. Eulerian-lagrangian localized adjoint methods for convection-diffusion equations and their convergence analysis. *IMA J. Numer. Anal.*, 15 :405–459, 1995.

[68] N. Yanenko. The method pf fractional steps. the solutions of problems of mathematical physics in several variables. *New York*, 1971.