



HAL
open science

Schémas volumes finis sur maillages généraux en milieux hétérogènes anisotropes pour les écoulements polyphasiques en milieux poreux

Cindy Guichard

► **To cite this version:**

Cindy Guichard. Schémas volumes finis sur maillages généraux en milieux hétérogènes anisotropes pour les écoulements polyphasiques en milieux poreux. Mathématiques générales [math.GM]. Université Paris-Est, 2011. Français. NNT : 2011PEST1024 . tel-00674503

HAL Id: tel-00674503

<https://theses.hal.science/tel-00674503>

Submitted on 27 Feb 2012

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

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

THÈSE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PARIS-EST

École doctorale : MSTIC

Discipline : MATHÉMATIQUES

présentée et soutenue publiquement par

Cindy Guichard

le 29 novembre 2011

**Schémas volumes finis sur maillages généraux
en milieux hétérogènes anisotropes pour les
écoulements polyphasiques en milieux poreux**

devant le jury composé de

François Bouchut	- Examineur
Claire Chainais-Hillairet	- Rapporteur
Yves Coudière	- Rapporteur
Robert Eymard	- Directeur de thèse
Roland Masson	- Codirecteur de thèse
Pierre Samier	- Examineur

Remerciements - Acknowledgements

Sans l'ombre d'une hésitation, avec de la conviction à foison, mes premiers remerciements s'adressent à mes deux encadrants : Robert Eymard et Roland Masson. Travailler durant trois années aux côtés de ces concentrés de qualités et, à mon esprit, trois mots viennent se distinguer : chance, réjouissance et reconnaissance. Leur libre expérience, complétée de leur créativité génératrice, forment la base idoine d'une dualité non bornée dont ce travail n'est qu'une projection. Leurs orientations du sujet ont toujours permis de diriger cette thèse sur un chemin qui, selon moi, n'était pas de croix. Mon aventure de doctorante ainsi finie, au moment de leur dire merci, un brin de nostalgie m'envahit, rapidement apaisé par cette proche réalité du postdoc annoncé.

L'opportunité m'est alors donnée de remercier Claire Chainais-Hillairet et Yves Coudière pour avoir accepté d'endosser ce double rôle de lecteur-contrôleur qu'est celui de rapporteur. Ma reconnaissance se tourne également vers François Bouchut et Pierre Samier pour leur présence au sein du jury.

Je ne peux manquer de saluer Raphaële Herbin dont la contribution aux résultats présentés dans ce mémoire est inestimable.

Ce travail de thèse fut l'occasion de moult rencontres dont la liste ne peut malheureusement qu'être incomplète. Aussi il est important pour moi de remercier Eric Flaureau, d'une part pour son encadrement initial et, d'autre part, pour ses judicieux commentaires faisant suite à sa relecture estivale du manuscrit. Me vient alors une grande pensée, non sans émotion, pour tous les doctorants rencontrés, qu'ils conjuguent docteur dans un passé composé ou un futur proche, mais jamais à l'imparfait, voilà mon souhait. J'en profite pour glisser un clin d'œil à mes deux camarades de bureau. D'un côté Xavier, pour sa grande répartie qui bien des fois m'a laissée sans voix mais jamais sans un sourire. Et de l'autre, bien sûr, Florian pour son soutien dans l'élagage de l'arbre de mon jardin et son précieux savoir-faire pour transformer ses fruits en confiture ; nul doute que notre amitié construite au fil de ces dernières années sera continuée malgré les kilomètres installés.

A few words in English in order to thank Ivar Aavatsmark for his invitation to work several months at the CIPR, university of Bergen, and also Haakon Haegland for our collaboration during this stay in such a beautiful country named Norway.

Ces remerciements seraient inachevés sans un mot pour mes proches, famille et amis : mes parents et mon frère pour leur soutien inconditionnel ; Yasuo, super tonton correcteur d'orthographe pour l'occasion ; Brigitte dont les qualités culinaires se sont illustrées au pot de thèse ; Anne et Céline pour leur enthousiasme spontané à visiter le musée du pétrole de Stavanger ; Ivan et Mathilde pour ces vacances autrichiennes bénéfiques à bien des niveaux ; Jean-Marie dont la présence à la soutenance, en dépit d'une absence auprès de Betty et Mathys (que j'embrasse au passage), m'a beaucoup touchée, tout comme celle de Sébastien et Nadège qui ont switché d'université le temps d'une journée...

A tous un grand merci, vous savez mieux que moi tout ce que je vous dois.

Table des matières

I	Introduction et présentation du manuscrit	11
1	Introduction	13
1.1	Simulation numérique en ingénierie pétrolière	14
1.2	Contexte et objectifs de la thèse	15
1.3	Plan du manuscrit	16
II	Méthodes numériques pour des problèmes d'ingénierie pétrolière	19
2	Schémas pour l'ingénierie pétrolière	21
2.1	Motivation et Contexte	22
2.1.1	Problème Modèle	23
2.1.2	Formulation Volumes Finis	24
2.2	Les schémas disponibles dans la plate-forme Arcane	25
2.2.1	O-schéma	25
2.2.2	L-schéma et G-schéma	29
2.2.3	Schéma GradCell	30
2.3	Discussion	31
2.4	Nouveaux schémas gradient	31
2.4.1	Notion de schéma gradient	31
2.4.2	Schéma VAG	32
2.4.3	Schéma HAG	35
2.5	Résultats numériques	37
2.5.1	Simulation proche puits	37
2.5.2	Bassin sédimentaire	42
2.5.3	Benchmark 3D	45
2.5.4	Hétérogénéité et Anisotropie	53
2.6	Conclusion	57
3	Simulation des écoulements compositionnels polyphasiques en milieux poreux	59
3.1	Motivation et Contexte	60
3.2	Formulation du modèle d'écoulement	60
3.2.1	Discussion	60

3.2.2	Formulation de type Coats	61
3.3	Discrétisation du modèle	66
3.3.1	Jeu d'inconnues et équations discrètes	66
3.3.2	Algorithme de résolution du système	72
3.4	Application au schéma VAG	77
3.4.1	Présentation de la méthode	77
3.4.2	Bilan	82
3.5	Résultats numériques	83
3.5.1	Propagation de front de type traceur	83
3.5.2	Injection de CO ₂ immiscible dans un réservoir hétérogène	85
3.5.3	Injection de CO ₂ miscible sur grille proche puits	88
3.5.4	Assèchement et précipitation de sel par injection de CO ₂	91
3.6	Conclusion	95
3.7	Annexe – Flash thermodynamique	96
3.7.1	Flash diphasique	97
3.7.2	Flash triphasique	99
Bibliographie		105
 III Etude mathématique		 109
4	Small stencil 3D schemes for diffusive flows in porous media	111
4.1	Introduction	112
4.2	Approximate gradient schemes	115
4.2.1	Definition and properties	115
4.2.2	Examples	119
4.3	A small-stencil hybrid vertex scheme	121
4.3.1	Construction of the scheme	121
4.3.2	Implementation of the scheme	123
4.3.3	Mathematical properties	123
4.4	A small-stencil cell-centred scheme	129
4.4.1	Harmonic averaging points	129
4.4.2	Definition of the scheme	130
4.4.3	Mathematical analysis	135
4.5	Numerical results	136
4.5.1	Randomly distorted Cartesian meshes	137
4.5.2	Near-well meshes	139
4.6	Conclusion	141
	Bibliography	141
5	Grid Orientation Effect in coupled Finite Volume Schemes	145
5.1	Introduction	146
5.2	Mesh, stencils and fluxes	148
5.2.1	Construction of the new fluxes	148
5.2.2	Example: construction of a 9-point stencil scheme	151
5.2.3	Properties of the new fluxes	152

5.3	Convergence analysis in a simplified case	153
5.3.1	Approximation by an upstream weighting scheme	154
5.3.2	Estimates	155
5.3.3	Convergence study	158
5.4	Numerical results	164
5.4.1	A 2D case with radial symmetry	164
5.4.2	A 3D test case with three layers	168
5.5	Conclusion	169
	Bibliography	170

IV Conclusion du manuscrit et perspectives futures 173

6 Conclusion et perspectives 175

6.1	Bilan	176
6.2	Perspectives	177

Première partie

Introduction et présentation du manuscrit

Chapitre **1**

Introduction

Sommaire

1.1	Simulation numérique en ingénierie pétrolière	14
1.2	Contexte et objectifs de la thèse	15
1.3	Plan du manuscrit	16

1.1 Simulation numérique en ingénierie pétrolière

La modélisation de bassin et de réservoir sont des techniques clefs dans l'industrie pétrolière. D'un côté, la modélisation de bassin permet de décrire l'évolution des systèmes pétroliers, à des échelles d'espace et de temps géologique, pour ainsi déterminer le remplissage sédimentaire des bassins afin de jauger au mieux la localisation, la composition et le volume d'huile piégée. De son côté, la simulation de réservoir aide à la mise en place d'un schéma d'exploitation afin d'optimiser la production à moindre coût.

Au delà des stratégies pétrolières, de multiples mesures et engagements politiques internationaux sont pris afin de réduire les émissions de gaz à effet de serre. L'une des solutions envisagées est le stockage géologique du gaz carbonique ou dioxyde de carbone (CO_2). Pour assurer la faisabilité, et surtout la sécurité à long terme de tels projets, il est nécessaire d'être capable de simuler les effets d'une injection massive de CO_2 ainsi que son stockage en sous-sol sur une longue période.

Ces trois grands défis industriels, à savoir la modélisation des bassins, des réservoirs et du stockage géologique du CO_2 , illustrent la nécessité de savoir simuler des écoulements compositionnels polyphasiques en milieux poreux hétérogènes anisotropes. On entend par écoulement compositionnel polyphasique un écoulement formé de plusieurs phases et de plusieurs constituants. A titre d'exemple, la conception et le monitoring d'un site de stockage géologique du CO_2 nécessite de savoir simuler, dans un milieu poreux par nature hétérogène anisotrope, des écoulements polyphasiques (eau, huile, gaz) aux échelles proches puits, réservoir et bassin afin de prédire l'injectivité des puits, la migration du CO_2 et sa dissolution dans les phases eau et huile. Une telle simulation numérique est une tâche ardue qui repose sur une discrétisation idoine d'un domaine décrit par de fortes contraintes naturelles, et sur la conception de schémas numériques adaptés à la fois aux équations régissant ces écoulements, au maillage, et aussi aux propriétés du milieu poreux.

La discrétisation spatiale des réservoirs et des bassins pétroliers est ainsi contrainte de suivre les couches géologiques de façon à représenter avec précision les hétérogénéités majeures. Dès lors les maillages peuvent contenir des faces non nécessairement planes, ni convexes. Les mailles peuvent être très aplaties et déformées pour suivre la géométrie des couches géologiques, voir même dégénérées localement dans le cas d'érosions comme illustré sur la Figure 1.1 Au voisinage des puits, la singularité de la pression oblige à raffiner localement. En conclusion, les méthodes numériques employées doivent pouvoir s'appliquer à des maillages non structurés pouvant inclure des mailles polyédriques quelconques.

Dès lors, une méthode numérique de simulation compositionnel polyphasique vise à déterminer en tout point du maillage et à tout instant des grandeurs caractéristiques de l'écoulement. La modélisation doit, par exemple, permettre de décrire la variation spatiale et temporelle des pressions et saturations des phases présentes, ainsi que la disparition et l'apparition de celles-ci. La formulation du modèle est ainsi régi par un système d'équations non linéaires aux dérivées partielles faisant intervenir des lois de conservation et des relations thermodynamiques. L'un des verrous majeurs de ce genre de modèle est la complexité de sa discrétisation et les temps de simulation qui en découlent. La précision, la stabilité et le coût de telles simulations dépendent de façon essentielle du choix d'approximation des flux de diffusion darcéens du système d'équations.

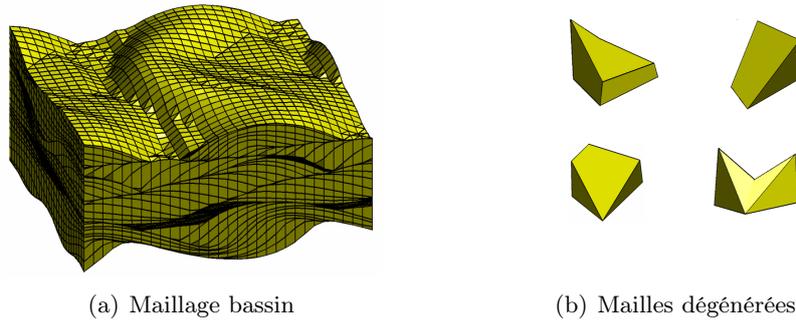


FIGURE 1.1 – Exemple d’un maillage avec érosions.

1.2 Contexte et objectifs de la thèse

L’industrie pétrolière a depuis plusieurs années étudié et développé des techniques de modélisation utilisant la méthode des volumes finis pour discrétiser des flux diffusifs de type Darcy. L’une des premières techniques utilisée est le schéma dit ”à deux points”, noté schéma TPFA pour Two Point Flux Approximation [30], qui tient son nom de l’approximation du flux à travers une face à l’aide des valeurs discrètes aux centres de ses deux mailles adjacentes. Cette approche, simple et naturelle, présente néanmoins une carence de convergence sur maillages généraux pouvant introduire d’importantes erreurs de simulation. Malgré cela, le schéma TPFA reste encore très utilisé actuellement pour son faible coût et sa robustesse, et surtout par défaut de méthodologies alternatives améliorant la précision avec un surcoût raisonnable en termes de temps calcul et de robustesse. Toutefois, les travaux récents de la communauté ont mis l’accent sur la construction de nombreux nouveaux schémas. Les plus prometteurs ont été sélectionnés et mis au point sur la plate-forme Arcane [39].

L’objectif de cette thèse est d’étendre les connaissances actuelles sur le comportement de certains schémas volumes finis et plus particulièrement dans le cadre des écoulements polyphasiques en milieux poreux hétérogènes anisotropes. La finalité de notre travail a donc été d’améliorer par rapport à l’état de l’art actuel la précision des schémas numériques d’approximation des flux de diffusion pour des applications en contexte polyphasique compositionnel en milieux poreux hétérogènes anisotropes, tout en garantissant,

- une solution précise, même dans le cas de fortes anisotropies et de discontinuités avec possibilité de très forts contrastes d’hétérogénéité d’une maille à l’autre,
- la performance des calculs en termes de temps CPU et de parallélisation associé à la robustesse et l’efficacité de la résolution des systèmes non linéaires et linéaires des modèles polyphasiques. L’exigence d’efficacité sur ces sujets est très forte dans le domaine des géosciences,
- une approximation des flux stable, compacte, de préférence linéaire (pour ne pas amplifier la non-linéarité issue du modèle polyphasique), et convergente même dans le cas de mailles très aplaties, déformées et non convexes,

- l’emploi d’un modèle d’écoulements compositionnels polyphasiques d’une conception générique vis à vis des flux discrets, et tenant compte de toute la gamme de miscibilité possible des composants dans les phases ainsi que la disparition et de l’apparition de celles-ci.

Dans le cadre de cette thèse, nous nous sommes intéressés tout particulièrement aux applications dans les régions proches puits. En effet, en ingénierie de réservoir ou dans le cadre du stockage géologique du CO_2 , la prise en compte des puits est déterminante pour la précision de la simulation. Les zones proches puits sont caractérisées par une variation logarithmique de la pression et un problème d’échelle entre le rayon du puits, de l’ordre d’une dizaine de centimètres, et les mailles du réservoir, de l’ordre d’une centaine de mètres. Les méthodes actuelles sont basées sur des solutions analytiques monophasiques proches puits et des indices de productivité développés par D. Peaceman [42, 43]. Malgré les hypothèses d’une grille rectangulaire uniforme en milieu homogène, l’approche de D. Peaceman reste très largement utilisée dans l’industrie pétrolière. Cependant, cette technique ne peut être utilisée pour la prise en compte précise des hétérogénéités comme cela est notamment le cas pour les puits déviés et les hétérogénéités stratifiées. De plus, les procédés d’aujourd’hui utilisent des puits à géométrie complexe. Construire un modèle numérique robuste implique donc de prendre en compte ces spécificités. Une approche possible est de construire un maillage idoine, maillage dont la géométrie implique l’utilisation de méthodes numériques adaptées. De précédents travaux ont été effectués dans le cadre de la thèse de S.S. Mundal [40, 41] dans un contexte 2D. Il sera ici question d’étendre l’étude à la dimension 3 ainsi qu’au cadre polyphasique. L’objectif étant de déterminer le meilleur couple maillage-schéma pour la simulation proche puits.

Du fait de la nature indicative du sujet, les résultats obtenus au cours de cette thèse peuvent s’appliquer aussi bien à la simulation bassins et réservoirs mais également au stockage géologique du CO_2 .

1.3 Plan du manuscrit

Ce manuscrit s’organise en deux grandes parties contenant chacune deux chapitres.

Partie I. La première partie est consacrée à des méthodes numériques utilisées pour des problèmes d’ingénierie pétrolière.

Le premier chapitre présente différents schémas applicables à la discrétisation des flux darcéens. Ainsi, après avoir introduit un problème modèle caractéristique, nous présentons dans un premier temps les schémas volumes finis multi-points centrés aux mailles disponibles dans la plate-forme Arcane. Il s’ensuit une brève discussion sur l’état de l’art actuel en matière de méthode de discrétisation. Dans un second temps, nous exposons les nouveaux schémas gradient, nommés HAG et VAG. Le schéma HAG est un schéma centré aux mailles alors que le second est centré aux nœuds et dont plusieurs versions sont détaillées. Pour clore ce chapitre, nous montrons à travers une large gamme de cas tests monophasiques les propriétés numériques de ces schémas.

Le second chapitre est axé sur la simulation des écoulements compositionnels polyphasiques en milieux poreux. Nous exposons la formulation et la discrétisation de tels écoulements dans un cadre général, à nombres de phases et de constituants quelconques. Le code prototype ainsi associé a été implémenté sur la base de flux numériques darcéens linéaires avec inconnues aux mailles comme cela est le cas des schémas présents sous Arcane. Cependant nous avons pu aisément utiliser ce même code pour la mise en œuvre de la méthode VAG. Cette constatation nous a ainsi permis de conclure ce chapitre par des tests numériques comparatifs entre le O-schéma, méthode volume fini multi-point centré aux mailles, et la nouvelle méthode VAG, schéma gradient centré aux nœuds. Les cas tests mis en place dans ce manuscrit sont issus de problématiques liées au stockage géologique du CO_2 .

Partie II. La seconde partie, rédigée en anglais, est consacrée à une étude théorique de méthodes employées au cours de cette thèse.

Le premier chapitre se fonde sur un article accepté pour publication dans la revue M2AN écrit avec Robert Eymard et Raphaële Herbin. Ce papier introduit la notion de schéma gradient, méthode de discrétisation des flux darcéens. Un cadre théorique est présenté pour établir, sous des hypothèses explicitées, la preuve de convergence de telles méthodes. Puis les nouveaux schémas HAG et la première version de VAG sont présentés. Des tests numériques concluent ce papier.

Le second chapitre consiste en un article soumis pour publication et écrit avec Robert Eymard et Roland Masson. La problématique étudiée ici est celle de l'effet d'axe ou GOE (Grid Orientation Effect). L'effet d'axe est un phénomène de digitation numérique qui se produit lors de la simulation de deux fluides de viscosités différentes sur des maillages à dominante structurée tels que les maillages CPG (Corner Point Geometry) utilisés en ingénierie de réservoir. La méthode proposée ici pour réduire ce phénomène est basée sur la modification du stencil des flux à l'aide de la notion de chemin. Une estimation L^∞ ainsi qu'une preuve de convergence basée sur une inégalité BV-faible sont présentées. Des tests numériques illustrent l'efficacité de la méthode.

Deuxième partie

Méthodes numériques pour des problèmes d'ingénierie pétrolière

Chapitre 2

Schémas pour l'ingénierie pétrolière

Sommaire

2.1	Motivation et Contexte	22
2.1.1	Problème Modèle	23
2.1.2	Formulation Volumes Finis	24
2.2	Les schémas disponibles dans la plate-forme Arcane	25
2.2.1	O-schéma	25
2.2.2	L-schéma et G-schéma	29
2.2.3	Schéma GradCell	30
2.3	Discussion	31
2.4	Nouveaux schémas gradient	31
2.4.1	Notion de schéma gradient	31
2.4.2	Schéma VAG	32
2.4.3	Schéma HAG	35
2.5	Résultats numériques	37
2.5.1	Simulation proche puits	37
2.5.2	Bassin sédimentaire	42
2.5.3	Benchmark 3D	45
2.5.4	Hétérogénéité et Anisotropie	53
2.6	Conclusion	57

2.1 Motivation et Contexte

Ces travaux s'intéressent tout particulièrement à la classe de schémas dits de volumes finis pour approximer un flux diffusif de type Darcy. L'esprit d'une méthode dite de volume fini est de subdiviser le domaine en volumes de contrôle et à intégrer une équation de conservation sur ces derniers. La finalité de cette technique est d'évaluer les flux sur les bords de ces volumes. Dès lors, le flux entrant dans un volume donné est identique au flux sortant du volume adjacent, ces méthodes sont donc dites **conservatives**.

L'introduction a souligné l'importance pour les applications pétrolières de développer des outils numérique de simulation capables de tenir compte des fortes contraintes imposées par le milieu naturel. Un schéma numérique ad-hoc doit donc respecter le cahier des charges suivant :

- **Stabilité et Robustesse.** Produire une solution discrète stable en norme L^2 , robuste vis-à-vis de la variation de caractéristiques tel que le ratio d'anisotropie d'aspect et/ou de perméabilité, tout en évitant de générer des singularités algébriques.
- **Convergence.** Disposer d'un cadre théorique démontrant la convergence du schéma sur cas généraux pour garantir une solution précise en dépit de fortes valeurs d'hétérogénéités, ratios d'anisotropie et d'aspect.
- **Performance.** Avoir un stencil compact. L'expression du flux numérique ne doit faire intervenir qu'un nombre limité d'inconnues discrètes afin de réduire au mieux l'occupation mémoire et minimiser les échanges pour les applications parallèles.
- **Linéarité.** Une expression linéaire des flux est préférable pour la mise en œuvre des écoulements polyphasiques.

Chronologiquement, l'une des premières techniques utilisée est le schéma TPFA pour Two Point Flux Approximation [30]. Le flux à travers la face d'un volume de contrôle donné est exprimé à l'aide des valeurs discrètes des deux mailles adjacentes. L'approche TPFA satisfait les conditions de **linéarité** et de **performance**, performance qu'il est d'ailleurs difficile d'égaliser tant l'expression du flux est minimale. Cependant, son principal défaut, la **convergence** qui est établie sous réserve stricte d'orthogonalité du maillage avec les directions du tenseur de perméabilité, hypothèse faisant fréquemment défaut face à la complexité des maillages bassins et réservoirs. A titre d'exemple on peut citer les réservoirs fracturés, les érosions sédimentaires ou les grilles localement raffinées près des puits. De multiples travaux de recherches ont ainsi permis, en l'absence de méthode universelle, la genèse d'une vaste gamme de nouveaux schémas volumes finis visant à remplir pleinement ce cahier des charges mais rendant vain tout objectif d'exhaustivité. Nous ne présentons donc, dans la section suivante, que les méthodes sélectionnées sous la plate-forme Arcane [39] et qui feront par la suite l'objet de tests numériques.

2.1.1 Problème Modèle

Le problème introduit ci-après est qualifié de problème modèle pour son adéquation avec l'équation de Darcy intervenant dans la formulation des écoulements compositionnels polyphasiques en milieux poreux exposée dans le chapitre 3.

Modèle continu

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un domaine polyédrique borné, où d est la dimension, et $f \in L^2(\Omega)$ un terme source. On cherche une approximation du potentiel \bar{u} (pression, température, ...) solution faible du problème,

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\Lambda \nabla \bar{u}) = f & \text{sur } \Omega \\ \bar{u} = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases}, \quad (2.1)$$

où Λ est une fonction mesurable de Ω dans $\mathbf{M}_d(\mathbb{R})$, ensemble des matrices de taille $d \times d$, et tel que ses valeurs propres soient incluses dans l'intervalle $[\underline{\lambda}, \bar{\lambda}]$ avec $0 < \underline{\lambda} \leq \bar{\lambda}$.

On introduit la forme bilinéaire suivante,

$$\forall \bar{u}, \bar{v} \in H_0^1(\Omega), \quad a(\bar{u}, \bar{v}) = \int_{\Omega} \Lambda(\mathbf{x}) \nabla \bar{u}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \bar{v}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}. \quad (2.2)$$

Alors \bar{u} est solution faible du problème (2.1) si,

$$\begin{cases} \bar{u} \in H_0^1(\Omega) \\ a(\bar{u}, \bar{v}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \bar{v}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \quad \forall \bar{v} \in H_0^1(\Omega). \end{cases} \quad (2.3)$$

L'existence et l'unicité d'une telle solution est un résultat connu [30].

Modèle discret

Une discrétisation admissible de l'espace Ω au sens des volumes finis, dénotée \mathcal{D} et illustrée sur la Figure 2.1, est donnée par le quadruplet $\mathcal{D} = (\mathcal{M}, \mathcal{F}, \mathcal{P}, \mathcal{V})$ où,

- \mathcal{M} est l'ensemble des volumes de contrôle recouvrant Ω . Pour tout K dans \mathcal{M} , on note $|K|$ sa mesure ;
- \mathcal{F} est l'ensemble des faces tel que $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{\text{int}} \cup \mathcal{F}_{\text{ext}}$ où \mathcal{F}_{int} est l'ensemble des faces internes et \mathcal{F}_{ext} est l'ensemble des faces frontières. Pour tout σ dans \mathcal{F} , on note $|\sigma|$ sa mesure. Pour une maille K de \mathcal{M} , on note par \mathcal{F}_K l'ensemble de ses faces, et $\mathbf{n}_{K,\sigma}$ la normale unitaire à la face σ de \mathcal{F}_K sortante de la maille K . Et $\mathcal{F}_{\mathbf{s}}$ désigne l'ensemble des faces connectées au sommet \mathbf{s} ;
- \mathcal{P} est l'ensemble des centres des mailles, $\mathcal{P} = (\mathbf{x}_K)_{K \in \mathcal{M}}$. On note alors $d_{K,\sigma}$ la distance euclidienne entre le centre \mathbf{x}_K et la face σ de la maille K ;

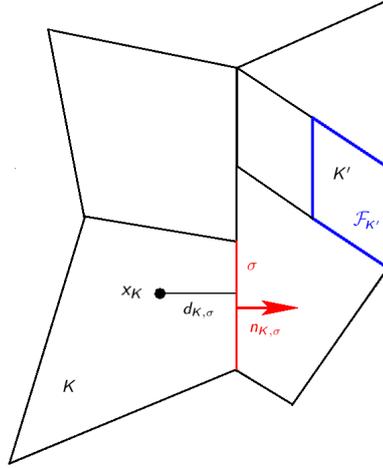


FIGURE 2.1 – Notation pour la discrétisation en espace.

- $\mathcal{V} = \mathcal{V}_{\text{int}} \cup \mathcal{V}_{\text{ext}}$ est l'ensemble des sommets du maillage. Pour une maille K de \mathcal{M} , on note alors \mathcal{V}_K l'ensemble de ses sommets. Et par analogie, pour une face σ de \mathcal{F} , on note par \mathcal{V}_σ , l'ensemble de ses sommets.

Les notations ci-dessus permettent de définir l'espace $X_{\mathcal{D}}$ des fonctions constantes par maille, espace contenant notre solution approchée. Pour $u \in X_{\mathcal{D}}$, on a $u(\mathbf{x}) = u_K$ pour tout $\mathbf{x} \in K$.

2.1.2 Formulation Volumes Finis

On cherche donc $u \in X_{\mathcal{D}}$, approximation de \bar{u} , à l'aide d'une méthode volumes finis. Pour se faire on intègre l'équation de diffusion (2.1) sur chaque volume de contrôle $K \in \mathcal{M}$. Puis on applique la formule de Green pour exprimer l'intégrale d'une divergence sur un volume comme intégrale sur un bord. Ainsi l'équation (2.1) sur le domaine discret s'écrit,

$$-\sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} \int_{\sigma} \Lambda \nabla \bar{u} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} ds = \int_K f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad \forall K \in \mathcal{M}, \quad (2.4)$$

où \mathcal{F}_K est, pour rappel, l'ensemble des faces appartenant à la maille K .

Un schéma volumes finis vise à expliciter un flux numérique, noté $F_{K,\sigma}$, partant de la maille K à travers la face $\sigma \in \mathcal{F}_K$, approximation de,

$$F_{K,\sigma}(u) \approx \int_{\sigma} \Lambda \nabla \bar{u} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} ds. \quad (2.5)$$

On peut à présent formuler le problème volumes finis comme suit,

$$\text{Trouver } u \in X_{\mathcal{D}} \text{ tel que } -\sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} F_{K,\sigma}(u) = \int_K f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad \forall K \in \mathcal{M}. \quad (2.6)$$

Comme souligné en préambule, les méthodes volumes finis sont **conservatives**, le flux numérique doit vérifier,

$$F_{K,\sigma}(u) + F_{L,\sigma}(u) = 0 \quad \text{pour } \sigma = K|L. \quad (2.7)$$

La **formulation faible** ou formulation variationnelle discrète, équivalente à (2.6)-(2.7), s'écrit alors,

$$\text{Trouver } u \in X_{\mathcal{D}} \text{ tel que } a_{\mathcal{D}}(u, v) = \sum_{K \in \mathcal{M}} \int_K f(\mathbf{x})v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \quad \forall v \in X_{\mathcal{D}}. \quad (2.8)$$

où $a_{\mathcal{D}}$ est une forme bilinéaire définie sur $X_{\mathcal{D}} \times X_{\mathcal{D}}$ par,

$$\begin{aligned} a_{\mathcal{D}}(u, v) &= \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} F_{K,\sigma}(u)(\gamma_{\sigma}(v) - v_K) \\ &= \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K \cap \mathcal{F}_L \subset \mathcal{F}_{\text{int}}} F_{K,\sigma}(u)(v_L - v_K) - \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K \cap \mathcal{F}_{\text{ext}}} F_{K,\sigma}(u)v_K \end{aligned} \quad (2.9)$$

où γ_{σ} est l'opérateur trace de reconstruction à la face σ ,

$$\gamma_{\sigma}(v) = \begin{cases} \frac{v_K d_{L,\sigma} + v_L d_{K,\sigma}}{d_{L,\sigma} + d_{K,\sigma}} & \text{si } \sigma \in \mathcal{F}_K \cap \mathcal{F}_L \subset \mathcal{F}_{\text{int}}, \\ 0 & \text{si } \sigma \in \mathcal{F}_{\text{ext}}. \end{cases} \quad (2.10)$$

2.2 Les schémas disponibles dans la plate-forme Arcane

Ces dernières années ont vu apparaître des nouveaux schémas visant à s'affranchir des carences du schéma TPFA. Cette section introduit les schémas volumes finis qui sont disponibles sur la plate-forme Arcane [39]. Ces méthodes appartiennent à la famille des schémas MPFA (Multi-Point Flux Approximation) et peuvent être perçues comme une extension du schéma TPFA ; extension dite *multi-points* car l'approximation du flux local à travers une face donnée fait intervenir des mailles additionnelles aux deux mailles adjacentes à la dite face. La notion de voisinage, dénommé stencil, est dépendante du schéma considéré. Cette classe de schémas présente de surcroît l'intérêt de ne faire intervenir que des inconnues aux mailles, caractéristique très recherchée dans l'industrie pétrolière. Le développement en 3D des schémas cités ci-après au sein de la plate-forme Arcane s'inscrit dans les travaux de thèse de Léo Agêlas [8].

2.2.1 O-schéma

Les idées relatives au O-schéma ont été introduites séparément par Aavatsmark et al. [1, 2, 3, 4] et Edwards et al. [27, 28] au milieu des années 90. En guise de préambule, la version historique du O-schéma est brièvement présentée, puis une version généraliste, plus récente, est décrite.

Le concept historique est de considérer un *volume d'interaction* entre mailles partageant un sommet donné. L'objectif est alors d'explicitier des sous-flux sur chaque sous-face incluse dans

ce volume. Le flux global à travers une face s'exprimera alors simplement comme la somme des sous-flux aux sous-faces concernées. Un sous-flux est déterminé à l'aide d'un gradient constant par sous-maille. Les sous-maillages sont esquissés pour former une partition du *volume d'interaction*. Ces gradients, et par conséquent les sous-flux, s'expriment en fonction d'inconnues discrètes à la fois aux centres des mailles, et sur les sous-faces. Ces valeurs aux sous-faces sont dites intermédiaires car, sous réserve que le problème soit algébriquement bien posé, elles sont éliminées par propriété de conservativité des sous-flux. Le O-schéma est donc bien un schéma *cell-centered*, les inconnues discrètes étant aux centres des mailles à partir desquelles s'expriment, linéairement, les flux.

En se référant aux notations de la Figure 2.2, la méthode précédemment décrite peut se schématiser comme suit,

1. définition d'un *volume d'interaction*, illustré en pointillés, entre mailles partageant le sommet \mathbf{s} ,
2. partition du *volume d'interaction* en sous-maillages $K^{\mathbf{s}}$,
3. construction du gradient $(\nabla u)_K^{\mathbf{s}}$ constant sur la sous-maille $K^{\mathbf{s}}$ à l'aide des valeurs discrètes, u_K au centre \mathbf{x}_K de la maille, et $u_\sigma^{\mathbf{s}}$ sur les sous-faces au point $\mathbf{x}_\sigma^{\mathbf{s}}$ de $\sigma \in \mathcal{F}_K \cap \mathcal{F}_{\mathbf{s}}$,
4. formulation du sous-flux $F_{K,\sigma}^{\mathbf{s}}(u)$ aux travers des sous-faces en fonction de $(\nabla u)_K^{\mathbf{s}}$,
5. élimination des $u_\sigma^{\mathbf{s}}$ par conservativité des sous-flux $F_{K,\sigma}^{\mathbf{s}}(u) + F_{L,\sigma}^{\mathbf{s}}(u) = 0$,
6. résolution du problème volumes finis (2.6) sur les inconnues $(u_K)_{K \in \mathcal{M}}$,

$$\text{Trouver } u \in X_{\mathcal{D}} \text{ tel que } - \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_\sigma} F_{K,\sigma}^{\mathbf{s}}(u) = \int_K f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \quad \forall K \in \mathcal{M}. \quad (2.11)$$

où $\mathcal{V}_\sigma \subset \mathcal{V}$ est l'ensemble des sommets de la face σ .

Cette approche du O-schéma n'est valable que pour des maillages usuels; la méthode étant bâtie sous l'hypothèse que chaque noeud $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K$, d'une maille $K \in \mathcal{M}$, est connecté à exactement d faces de la maille K , c'est à dire si $\text{card}(\mathcal{F}_K^{\mathbf{s}}) = d$ où $\mathcal{F}_K^{\mathbf{s}} = \mathcal{F}_K \cap \mathcal{F}_{\mathbf{s}}$ et d est la dimension du problème considéré.

Une généralisation à des maillages quelconques, avec preuve de convergence, le tout en trois dimensions, a été présentée par Agélas et al. [14, 13]. L'idée se fonde sur une approche hybride de la formulation variationnelle discrète (2.8) du problème volumes finis. Les grandes lignes de la méthode sont décrites ci-après.

Cette formulation étendue du O-schéma reprend le même processus géométrique, renvoyant ainsi aux notations de la Figure 2.2 pour sa description. Les paramètres de la méthode sont donc les suivants,

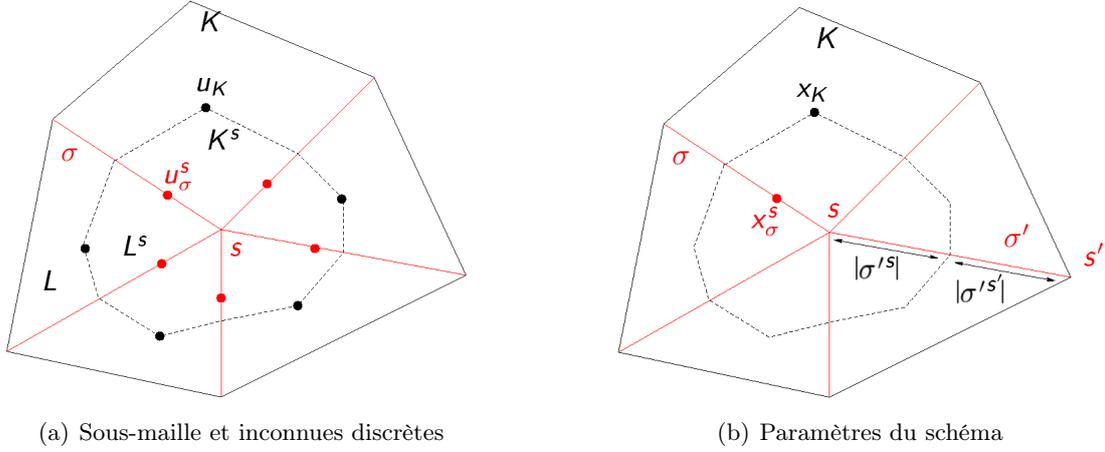


FIGURE 2.2 – Illustration des éléments géométriques pour le O-schéma.

- centre de maille \mathbf{x}_K et point de continuité \mathbf{x}_σ^s . Notons que ce choix peut influencer sur les propriétés de la méthode, à titre d'exemple, la symétrie sur maillage tétraédrique démontré notamment à la section 7 de [13]. Sur un tétraèdre, la symétrie est obtenue avec \mathbf{x}_K centre de gravité et \mathbf{x}_σ^s barycentre des trois noeuds de la face σ avec les poids $\frac{1}{2}$ au sommet \mathbf{s} et $\frac{1}{4}$ aux deux sommets restants de σ ,
- redistribution de la mesure d'une face σ , notée $|\sigma|$, entre ses sous-faces connectées aux sommets $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_\sigma$ vérifiant ainsi,

$$|\sigma| = \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_\sigma} |\sigma^s| \quad \text{avec} \quad |\sigma^s| > 0. \quad (2.12)$$

Il en découle que la mesure $|K|$ de la maille $K \in \mathcal{M}$ est également redistribuée,

$$|K| = \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} |K^s| \quad \text{avec} \quad |K^s| = \frac{1}{2} \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K^s} |\sigma^s| d_{K,\sigma}. \quad (2.13)$$

La définition du schéma volumes finis est alors basée sur la reconstruction de deux gradients constants par sous maille K^s pour $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K$. Le premier gradient $(\nabla_{\mathcal{D}} u)_K^s$ est consistant au sens où il est exact pour les fonctions affines,

$$(\nabla_{\mathcal{D}} u)_K^s = \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K^s} (u_\sigma^s - u_K) g_{K,\sigma}^s, \quad (2.14)$$

avec $g_{K,\sigma}^s \in \mathbb{R}^2$ des vecteurs ad-hoc donnés pour tous $\sigma \in \mathcal{F}_K^s$. Le second gradient $(\tilde{\nabla}_{\mathcal{D}} u)_K^s$ est quant à lui construit pour avoir une propriété de convergence faible,

$$(\tilde{\nabla}_{\mathcal{D}} u)_K^s = \frac{1}{|K^s|} \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K^s} |\sigma^s| (u_\sigma^s - u_K) \mathbf{n}_{K,\sigma}. \quad (2.15)$$

Ces gradients (2.14) et (2.15) permettent d'expliciter une forme bilinéaire $a_{\mathcal{D}}$ définie sur $H_{\mathcal{D}} \times H_{\mathcal{D}}$, où $H_{\mathcal{D}}$ est l'ensemble des fonctions constantes par mailles et, d'où le nom de formulation hybride, aux points de continuités,

$$a_{\mathcal{D}}(u, v) = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{s \in \mathcal{V}_K} |K^s| \left((\nabla_{\mathcal{D}} u)_K^s \cdot \Lambda_K (\tilde{\nabla}_{\mathcal{D}} v)_K^s + \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K \cap \mathcal{F}_s} R_{K,\sigma}^s(u) R_{K,\sigma}^s(v) \right), \quad (2.16)$$

où Λ_K est la valeur moyenne de Λ sur la maille K , $\Lambda_K = \frac{1}{|K|} \int_K \Lambda(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}$.

Dans (2.16), la forme bilinéaire est stabilisée par $R_{K,\sigma}^s$, fonction résiduelle du gradient (2.14), qui présente la propriété de s'annuler si $\text{card}(\mathcal{F}_K^s) = d$ permettant ainsi de prouver l'équivalence de cette formulation au O-schéma usuel présenté en préambule.

Le problème volumes finis s'écrit alors sous sa forme variationnelle (2.8),

$$\text{Trouver } u \in H_{\mathcal{D}} \text{ tel que } a_{\mathcal{D}}(u, v) = \sum_{K \in \mathcal{M}} \int_K f(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \quad \forall v \in H_{\mathcal{D}}. \quad (2.17)$$

Pour retrouver la formulation flux du problème, la forme bilinéaire (2.16) peut s'écrire de manière équivalente,

$$\begin{aligned} a_{\mathcal{D}}(u, v) &= \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K^s} \sum_{\sigma' \in \mathcal{F}_K^s} (T_K^s)_{\sigma,\sigma'} (u_{\sigma}^s - u_K) (v_{\sigma}^s - v_K) \\ &= \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} \sum_{s \in \mathcal{V}_{\sigma}} F_{K,\sigma}^s(u) (v_K - v_{\sigma}^s) \end{aligned} \quad (2.18)$$

où le sous-flux $F_{K,\sigma}^s$ s'exprime donc par,

$$F_{K,\sigma}^s(u) = \sum_{\sigma' \in \mathcal{F}_K^s} (T_K^s)_{\sigma,\sigma'} (u_K - u_{\sigma'}^s), \quad (2.19)$$

à l'aide des coefficients $(T_K^s)_{\sigma,\sigma'}$ dit de transmissivité. En reproduisant la méthodologie du O-schéma usuel, les valeurs discrètes aux points de continuité peuvent être, sous réserve que le problème soit bien posé, éliminées par conservativité des sous-flux. Le problème volumes finis admet alors uniquement des inconnues discrètes aux mailles et on retrouve la formulation flux du problème volumes finis explicitée en (2.11).

Le stencil d'une maille K est donné par l'ensemble des mailles connectées à un noeud de K ,

$$S_K = \{L \in \mathcal{M} \mid \mathcal{V}_K \cap \mathcal{V}_L \neq \emptyset\}.$$

Pour une grille topologiquement Cartésienne, le stencil du O-schéma est donc de 9 mailles en deux dimensions, et 27 mailles en trois dimensions.

2.2.2 L-schéma et G-schéma

Le G-schéma, détaillé par Agélas et al. [9], est une extension du MPFA L-schéma introduit par Aavatsmark et al. [6] et notamment discuté en trois dimensions dans [5]. Voici une esquisse des idées relatives à leurs constructions.

Considérons tout d'abord la famille \mathcal{G} de tous les groupes de faces possibles telle que pour $G \in \mathcal{G}$, G soit une paire de faces (σ, σ') , appartenant à une maille donnée K , appelée *maille primaire*, et reliée à un sommet s de K . Pour chaque élément G de \mathcal{G} , on note alors \mathcal{M}_G l'ensemble des mailles L vérifiant $\mathcal{F}_L \cap G \neq \emptyset$. A titre illustratif, sur la Figure 2.3(a), on a $G = \{\sigma, \sigma'\}$ et $\mathcal{M}_G = \{K, L_1, L_2\}$ avec K *maille primaire*.

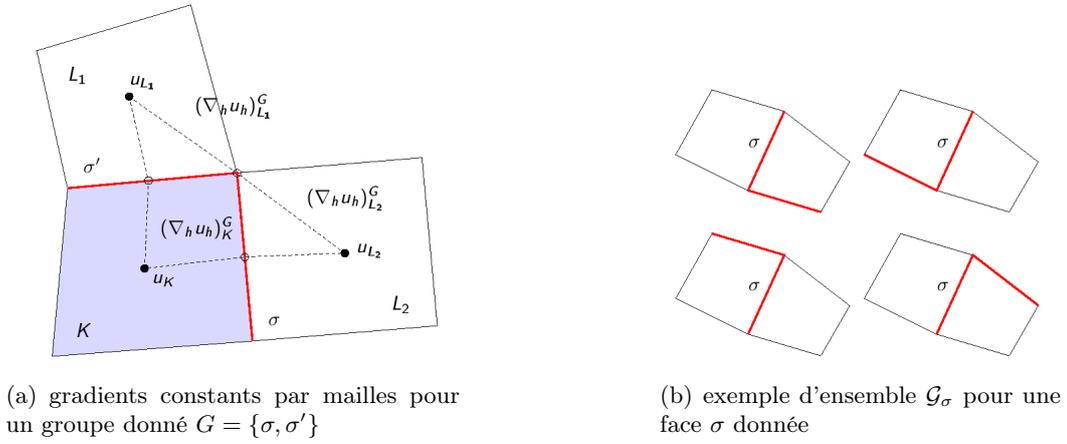


FIGURE 2.3 – Illustration des éléments géométriques pour le L- et G-schéma.

Pour un groupe donné $G \in \mathcal{G}$, un gradient constant par maille $(\nabla_{\mathcal{D}}u)_L^G$ est alors reconstruit sur chacune des mailles $L \in \mathcal{M}_G$ à l'aide d'une interpolation linéaire par morceaux qui vérifie la continuité du potentiel u ainsi que celle du flux à travers les faces $\sigma \in G$. En pratique cela revient à résoudre un système linéaire local sur le vecteur $(\nabla_{\mathcal{D}}u)_K^G$, pour la *maille primaire* K de \mathcal{M}_G ,

$$A^G(\nabla_{\mathcal{D}}u)_K^G = B^G, \quad (2.20)$$

sous réserve que la matrice A^G soit inversible. Les gradients $(\nabla_{\mathcal{D}}u)_L^G$ des mailles L de \mathcal{M}_G restantes sont alors déduits de $(\nabla_{\mathcal{D}}u)_K^G$. Des sous-flux conservatifs sont alors explicités comme suit pour toutes les mailles $L \in \mathcal{M}_G$,

$$F_{L,\sigma}^G(u) = |\sigma| \Lambda_L (\nabla_{\mathcal{D}}u)_L^G \cdot \mathbf{n}_{L,\sigma}. \quad (2.21)$$

Le flux numérique global $F_{K,\sigma}(u)$ est alors formulé comme une combinaison convexe linéaire des sous-flux $F_{K,\sigma}^G(u)$ sur l'ensemble $\mathcal{G}_\sigma \subset \mathcal{G}$ de tous les groupes possibles G contenant σ ,

$$F_{K,\sigma}(u) = \sum_{G \in \mathcal{G}_\sigma} \theta_\sigma^G F_{K,\sigma}^G(u). \quad (2.22)$$

Un exemple d'ensemble \mathcal{G}_σ est schématisé sur la Figure 2.3(b). Différentes stratégies peuvent être appliquées pour calculer les poids θ_σ^G . D'un côté, le L-schéma est obtenu à partir d'un seul

groupe G pour chaque face σ et chaque sommet \mathbf{s} de σ . La pondération est fixe à $\theta_\sigma^G = \frac{1}{N_\mathbf{s}}$ où $N_\mathbf{s}$ est le nombre de sommets de σ . Cette alternative a été choisie pour réduire la taille du stencil et améliorer la propriété de monotonie du L-schéma par rapport au O-schéma. De l'autre côté, le G-schéma considère tous les groupes G possibles et les poids θ_σ^G sont sélectionnés pour améliorer la propriété de coercivité du schéma.

2.2.3 Schéma GradCell

La construction du schéma GradCell, décrite par Agélas et al. [10], se base sur la formulation variationnelle (2.8) du problème volumes finis. La forme bilinéaire discrète du schéma, $a_\mathcal{D}$ définie sur $X_\mathcal{D} \times X_\mathcal{D}$, s'exprime à l'aide des deux gradients constants par mailles et de termes résiduels de stabilisation,

$$a_\mathcal{D}(u, v) = \sum_{K \in \mathcal{M}} |K| \Lambda_K (\nabla_\mathcal{D} u)_K \cdot (\tilde{\nabla}_\mathcal{D} v)_K + \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} \frac{|\sigma|}{d_{K,\sigma}} R_{K,\sigma}(u) R_{K,\sigma}(v). \quad (2.23)$$

Les gradients sont construits à l'aide de la formule de Green et de l'opérateur trace de reconstruction $\gamma_\sigma(\cdot)$ formulé en (2.10),

$$\begin{cases} (\nabla_\mathcal{D} u)_K = \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} |\sigma| (I_{K,\sigma}(u) - u_K) \mathbf{n}_{K,\sigma}, \\ (\tilde{\nabla}_\mathcal{D} u)_K = \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} |\sigma| (\gamma_\sigma(u) - u_K) \mathbf{n}_{K,\sigma}. \end{cases} \quad (2.24)$$

L'opérateur $\gamma_\sigma(\cdot)$, défini au point \mathbf{x}_σ , s'exprime linéairement à l'aide des valeurs u_K et u_L aux deux mailles adjacentes de $\sigma = K|L$. L'opérateur $I_{K,\sigma}(\cdot)$ calcule une interpolation de type-L au point \mathbf{x}_σ faisant intervenir les mailles partageant une face avec K .

Les flux sont alors déduits de la forme bilinéaire par (2.9). Cette méthodologie du schéma GradCell conduit à l'obtention d'un stencil utilisant les voisins des voisins d'une maille K . Pour une grille topologiquement Cartésienne, le stencil est donc de 13 mailles en deux dimensions comme reproduit sur la Figure 2.4, et 21 mailles en trois dimensions ce qui est moindre que le stencil à 27 points du O-schéma.

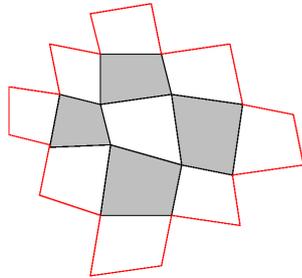


FIGURE 2.4 – Stencil du schéma GradCell sur une grille 2D topologiquement Cartésienne.

2.3 Discussion

Les schémas présentés précédemment appartiennent à la famille des schémas volumes finis dits *cell-centered* car ils présentent l'avantage de ne faire intervenir que des inconnues aux mailles. De surcroît, ces méthodes ont la caractéristique d'explicitier le flux darcéen comme fonction linéaire des inconnues. Ces particularités, centré, linéarité et compacité, rendent cette classe de méthode très appréciée au sein de la communauté pétrolière. Cependant ces schémas ne sont pas symétriques et donc conditionnellement coercifs et convergents.

Parallèlement on peut citer comme seconde classe de méthode celle des schémas symétriques et centrés mais c'est au prix de la perte de la compacité car ils présentent un stencil en voisin des voisins par les nœuds [38, 11, 31].

Enfin, il existe une troisième classe de méthode regroupant les schémas symétriques, compacts mais leur particularité est de comporter des inconnues supplémentaires aux faces ou aux nœuds ce qui explique leur faible écho dans la communauté pétrolière du fait de la taille accrue des systèmes à résoudre en polyphasique tout particulièrement. On retrouve dans cette famille les schémas Volumes Finis Hybrides (VFH) [36] connue aussi sous le nom de Mimetic Finite Difference schemes (MFD) [19], ou encore les schémas (DDFV), pour Discrete Duality Finite Volume [15, 25, 24].

Cet état des lieux, aussi rapide que partiel, pointe du doigt la difficulté de combiner centré, symétrie, linéarité et compacité. Il n'existe pas de schéma universel qui réunisse ces propriétés.

2.4 Nouveaux schémas gradient

Cette section s'articule autour d'un travail réalisé avec Robert Eymard et Raphaële Herbin où l'on introduit la notion de schéma gradient [32, 37] également détaillé au chapitre 4. Deux nouveaux schémas vérifiant ce concept y sont présentés et brièvement décrits ci-après. Le premier est nommé VAG pour *Vertex Approximate Gradient*, le second HAG pour *Harmonic Approximate Gradient*. Ces deux schémas concentrent les avantages des schémas type MPFA, en particulier le stencil compact, et les propriétés de symétrie et de convergence du schéma SUSHI [31].

2.4.1 Notion de schéma gradient

Pour illustrer cette notion de schéma gradient, on reprend le problème modèle décrit au début de ce chapitre et les notations associées, sous-section 2.1.1. On recherche donc une approximation de la fonction \bar{u} solution de,

$$\bar{u} \in H_0^1(\Omega) \text{ et } \forall v \in H_0^1(\Omega), \int_{\Omega} \Lambda(\mathbf{x}) \nabla \bar{u}(\mathbf{x}) \cdot \nabla v(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (2.25)$$

par un schéma gradient qui peut se lire,

$$\text{trouver } U \in X_{\mathcal{D}}, \forall V \in X_{\mathcal{D}}, \int_{\Omega} \Lambda(\mathbf{x}) \nabla_{\mathcal{D}} U(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathcal{D}} V(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \Pi_{\mathcal{D}} V(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (2.26)$$

où $\Pi_{\mathcal{D}} : X_{\mathcal{D}} \rightarrow L^2(\Omega)$ est un opérateur de reconstruction qui associe à $U \in X_{\mathcal{D}}$ une fonction $u_{\mathcal{D}} \in L^2(\Omega)$; $\nabla_{\mathcal{D}} : X_{\mathcal{D}} \rightarrow L^2(\Omega)^3$ est un opérateur de reconstruction d'un gradient discret à partir des valeurs $U \in X_{\mathcal{D}}$; l'index \mathcal{D} référant à la discrétisation de l'espace Ω .

2.4.2 Schéma VAG

Le schéma VAG est un schéma hybride qui considère à la fois des inconnues discrètes aux centres des mailles mais également des inconnues aux nœuds du maillage. En se basant sur la définition d'un schéma gradient (2.26), les principaux ingrédients du schéma VAG sont les suivants,

1. l'ensemble des inconnues discrètes $X_{\mathcal{D}}$ est l'espace des vecteurs réels de dimensions finis contenant toutes les familles de réels $U = ((u_K)_{K \in \mathcal{M}}, (u_{\mathbf{s}})_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}})$, tel que $u_{\mathbf{s}} = 0$ si $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_{\text{ext}}$; les inconnues aux mailles $(u_K)_{K \in \mathcal{M}}$ pouvant être éliminées localement, ce schéma possède un stencil compact;
2. l'opérateur $\Pi_{\mathcal{D}} : X_{\mathcal{D}} \rightarrow L^2(\Omega)$ associant à $U \in X_{\mathcal{D}}$ la fonction constante par morceaux $u_{\mathcal{D}} \in L^2(\Omega)$ égale à u_K sur chaque maille $K \in \mathcal{M}$;
3. la reconstruction du gradient discret $\nabla_{\mathcal{D}} : X_{\mathcal{D}} \rightarrow L^2(\Omega)^3$ dont différentes expressions ont été développées dans le cadre du benchmark 3D [33, 35] et sont exposées ci-après. Le premier gradient, construit à partir de la formule de Stokes, est constant sur chaque maille du maillage, nommé maillage primal en distinction des constructions suivantes, et requiert une stabilisation. Les second et troisième gradients sont définis constants sur des sous-mailles, respectivement des octaèdres puis des tétraèdres, et sont naturellement stables.

En préambule, pour chaque face σ , on définit le point \mathbf{x}_{σ} , qui est le barycentre d'une combinaison de poids non-négatifs $\beta_{\sigma, \mathbf{s}}$ des éléments \mathcal{V}_{σ} incluant tous les nœuds de la face, et la valeur discrète auxiliaire en ce point, noté u_{σ} , est définie par,

$$u_{\sigma} = \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_{\sigma}} \beta_{\sigma, \mathbf{s}} u_{\mathbf{s}} \text{ avec } \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_{\sigma}} \beta_{\sigma, \mathbf{s}} = 1.$$

Gradient stabilisé sur maillage primal

Pour une face $\sigma \in \mathcal{F}$, on note τ toute sous-face triangulaire admettant pour sommets \mathbf{x}_{σ} , \mathbf{s} et \mathbf{s}' , où \mathbf{s} et \mathbf{s}' sont deux nœuds consécutifs de σ . Le barycentre \mathbf{x}_{τ} d'une sous-face τ peut donc s'expliciter par la combinaison barycentrique suivante,

$$\mathbf{x}_{\tau} = \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_{\sigma}} \beta_{\tau, \mathbf{s}} \mathbf{s} \text{ avec } \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_{\sigma}} \beta_{\tau, \mathbf{s}} = 1,$$

où $\beta_{\tau, \mathbf{s}} \geq 0$ pour tout $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_{\sigma}$. Puis on définit $\beta_{\tau, \mathbf{s}} = 0$ pour tout $\mathbf{s} \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{V}_{\sigma}$. La valeur u_{τ} au point \mathbf{x}_{τ} est alors calculée par $u_{\tau} = \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_{\sigma}} \beta_{\tau, \mathbf{s}} u_{\mathbf{s}}$. Soit $K \in \mathcal{M}$ une maille donnée de la grille.

On note par \mathcal{T}_K l'ensemble de toutes les sous-faces des faces de K . Dans un premier temps, on définit, pour $U = ((u_K)_{K \in \mathcal{M}}, (u_s)_{s \in \mathcal{V}})$, une approximation du gradient sur la maille K par,

$$\nabla_K U = \frac{1}{|K|} \sum_{\tau \in \mathcal{T}_K} |\tau| (u_\tau - u_K) \mathbf{n}_{K,\tau} = \sum_{s \in \mathcal{V}_K} (u_s - u_K) \mathbf{b}_{K,s}, \quad (2.27)$$

avec,

$$\mathbf{b}_{K,s} = \frac{1}{|K|} \sum_{\tau \in \mathcal{T}_K} \beta_{\tau,s} |\tau| \mathbf{n}_{K,\tau},$$

et où $\mathbf{n}_{K,\tau}$ est la normale unitaire à la sous-face τ à travers K , et $|\tau|$, $|K|$ sont respectivement les aires et volumes de τ et K . Cependant ce gradient discret peut être nul sans que U soit constant, on doit donc le stabiliser. Pour ce faire, on considère $\{K_s, s \in \mathcal{V}_K\}$ une partition arbitraire de K , qui n'a nullement besoin d'être précisé, mais satisfaisant $|K_s| = \frac{|K|}{N_K}$, où N_K est le nombre de nœuds de K , on introduit,

$$R_{K,s} U = u_s - u_K - \nabla_K U \cdot (s - \mathbf{x}_K).$$

On définit alors, pour un réel $\gamma > 0$ donné, la constante $\nabla_{K,s} U$ sur la sous-maille K_s ,

$$\nabla_{K,s} U = \nabla_K U + \gamma R_{K,s} U \mathbf{b}_{K,s}.$$

Un gradient constant par sous-mailles K_s est alors explicité par,

$$\nabla_{\mathcal{D}} U(\mathbf{x}) = \nabla_{K,s} U \text{ pour tout } \mathbf{x} \in K_s.$$

C'est ce schéma qui a été initialement imaginé et qui répond au nom de "VAG".

Gradient constant par morceaux sur sous-mailles octaédriques

Pour une face donnée σ d'un volume de contrôle K et pour un nœud quelconque s de σ , on note respectivement par s^- et s^+ les nœuds précédent et suivant s sur la face σ (pour une orientation arbitraire de σ). On considère alors l'octaèdre, dénoté par $\mathbf{V}_{K,\sigma,s}$ et illustré sur la Figure 2.5(a), dont les nœuds sont $A_1 = \mathbf{x}_K$, $A_2 = \mathbf{x}_\sigma$, $A_3 = \frac{1}{2}(s^- + s)$, $A_5 = s$, $A_6 = \frac{1}{2}(s^+ + s)$ et $A_4 = \frac{1}{2}(\mathbf{x}_\sigma + s)$. Notons que tous les octaèdres sont disjoints et que la fermeture de leur union est $\bar{\Omega}$. Les valeurs discrètes de U aux nœuds de $\mathbf{V}_{K,\sigma,s}$ sont respectivement $u_1 = u_K$, $u_2 = u_\sigma$, $u_3 = \frac{1}{2}(u_{s^-} + u_s)$, $u_5 = u_s$, $u_6 = \frac{1}{2}(u_{s^+} + u_s)$ et $u_4 = \frac{1}{2}(u_\sigma + u_s)$. Les diagonales principales de $\mathbf{V}_{K,\sigma,s}$ sont donc (A_1, A_4) , (A_2, A_5) et (A_3, A_6) . On considère alors l'approximation du gradient suivante,

$$\nabla_{K,\sigma,s} U = \sum_{i=1}^3 (u_{i+3} - u_i) \frac{\overrightarrow{A_{i+1}A_{i+4}} \wedge \overrightarrow{A_{i+2}A_{i+5}}}{\text{Det}(\overrightarrow{A_{i+1}A_{i+4}}, \overrightarrow{A_{i+2}A_{i+5}}, \overrightarrow{A_iA_{i+3}})}, \quad (2.28)$$

avec $A_7 = A_1$ et $A_8 = A_2$. Un gradient constant par morceaux est alors explicité par,

$$\nabla_{\mathcal{D}} U(\mathbf{x}) = \nabla_{K,\sigma,s} U \text{ pour tout } \mathbf{x} \in \mathbf{V}_{K,\sigma,s}.$$

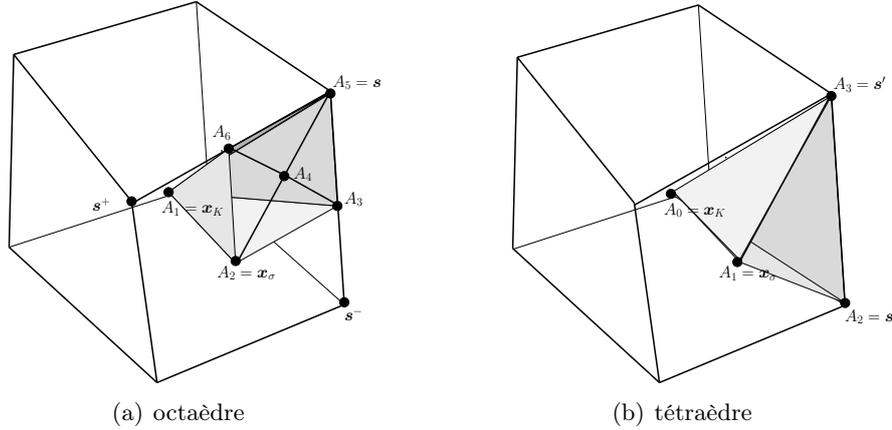


FIGURE 2.5 – Les sous-maillles pour la reconstruction des gradients discrets.

Par souci de clarté, on note à présent \mathbf{V} au lieu de $\mathbf{V}_{K,\sigma,s}$, et par suite $\mathcal{F}_{\mathbf{V}}$ l'ensemble des 8 faces triangulaires de \mathbf{V} et \mathcal{V}_{τ} l'ensemble des 3 sommets de chaque face triangulaire τ de \mathbf{V} , qui vérifient

$$\nabla_{K,\sigma,s}U = \frac{1}{|\mathbf{V}|} \sum_{\tau \in \mathcal{F}_{\mathbf{V}}} |\tau| \mathbf{n}_{\mathbf{V},\tau} \left(\frac{1}{3} \sum_{s \in \mathcal{V}_{\tau}} u_s \right). \quad (2.29)$$

Ecrit sous cette forme, on remarque alors que ce gradient (2.29) peut être vu comme le gradient (2.27) appliqué à la sous-maille \mathbf{V} en prenant comme valeur à la face $\tau \in \mathcal{F}_{\mathbf{V}}$ la valeur moyenne aux sommets $s \in \mathcal{V}_{\tau}$.

Pour le calcul des résultats numériques du Benchmark 3D présenté dans la sous-section 2.5.3, on définit un gradient constant par maille $\nabla_K U$ comme suit,

$$|K| \nabla_K U = \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} \sum_{s \in \mathcal{V}_{\sigma}} |\mathbf{V}_{K,\sigma,s}| \nabla_{K,\sigma,s} U.$$

Ce schéma sera par la suite nommé “VAGR”. Pour la démonstration des propriétés mathématiques de ce gradient, dont la convergence, on se réfère au formalisme des schémas gradients introduit au chapitre 4 en suivant la méthodologie détaillée dans le cadre du schéma VAG.

Gradient constant par morceaux sur sous-maillles tétraédriques

Pour une face donnée σ d'un volume de contrôle K et pour une paire quelconque de sommets consécutifs (s, s') de σ , on considère le tétraèdre, noté $\mathbf{V}_{K,\sigma,s,s'}$ et illustré sur la Figure 2.5(b), dont les sommets sont $A_0 = x_K$, $A_1 = x_{\sigma}$, $A_2 = s$ et $A_3 = s'$. Notons que tous les tétraèdres sont disjoints et que la fermeture de leur union est $\bar{\Omega}$. Les valeurs discrètes de U aux sommets de $\mathbf{V}_{K,\sigma,s,s'}$ sont respectivement $u_0 = u_K$, $u_1 = u_{\sigma}$, $u_2 = u_s$ et $u_3 = u_{s'}$. On considère alors l'approximation suivante du gradient,

$$\nabla_{K,\sigma,s,s'}U = \sum_{i=1}^3 (u_i - u_0) \frac{\overrightarrow{A_0 A_{i+1}} \wedge \overrightarrow{A_0 A_{i+2}}}{\text{Det}(\overrightarrow{A_0 A_{i+1}}, \overrightarrow{A_0 A_{i+2}}, \overrightarrow{A_0 A_i})}, \quad (2.30)$$

où $A_4 = A_1$ et $A_5 = A_2$. Un gradient constant par morceaux est alors explicité par,

$$\nabla_{\mathcal{D}}U(\mathbf{x}) = \nabla_{K,\sigma,s,s'}U \text{ pour tout } \mathbf{x} \in \mathbf{V}_{K,\sigma,s,s'}.$$

Remarquons que l'égalité (2.29) s'applique également dans ce cas en considérant \mathbf{V} comme notation synthétique de $\mathbf{V}_{K,\sigma,s,s'}$. Soulignons enfin que ce gradient (2.30) est équivalent aux éléments finis conformes P1 appliqués sur la sous-maille tétraédrique. La différence est dans l'opérateur de reconstruction $\Pi_{\mathcal{D}}$ qui, pour ce schéma utilise les valeurs aux mailles, alors que les éléments finis P1 utilisent les valeurs aux nœuds.

2.4.3 Schéma HAG

Le schéma HAG peut être vu comme une version 3D à stencil compact du schéma SUSHI [31] et précédemment introduit en 2D par Agélas et al. dans [12]. Ce schéma s'inscrit dans la volonté de construire des schémas *cell-centered*, compact et symétrique. Pour atteindre cet objectif, la recette de HAG se base sur les ingrédients suivants,

1. c'est un schéma gradient au sens de (2.26), donc symétrique ;
2. par analogie au O-schéma, introduction d'inconnues auxiliaires aux sous-faces et d'un gradient constant par sous-maille ;
3. l'interpolation linéaire à la face est harmonique au sens de [12] et à deux points pour la compacité ;
4. le gradient discret est faible et consistant pour la convergence.

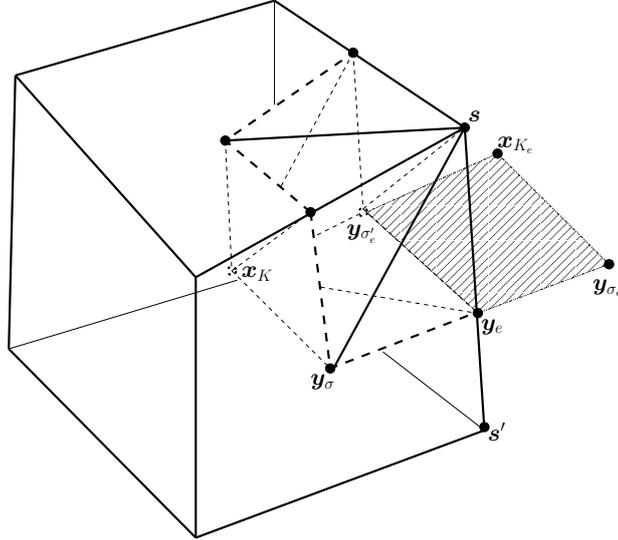


FIGURE 2.6 – Construction d'une sous-maille K_s d'un volume de contrôle.

Le domaine de simulation maillé, la Figure 2.6 illustre le sous-maillage et les notations associées pour une maille hexaédrique. Ce sous-maillage est construit en suivant les étapes décrites ci-après,

1. pour chaque face σ (même non plane), un point, noté \mathbf{y}_σ est choisi suivant la méthode dite harmonique présentée dans [12]. Cette méthode permet d'exprimer la valeur au point \mathbf{y}_σ par une combinaison linéaire consistante des valeurs aux points \mathbf{x}_K et \mathbf{x}_L , les centres des deux mailles K et L adjacentes à la face σ ;
2. pour chaque arête e du maillage, un point, noté \mathbf{y}_e , est choisi tel que la valeur en ce point puisse s'exprimer comme une combinaison linéaire des valeurs aux points \mathbf{y}_{σ_e} , $\mathbf{y}_{\sigma'_e}$ et \mathbf{x}_{K_e} , où e est une arête commune aux faces σ_e et σ'_e , chacune étant des faces d'une même maille K_e ;
3. la sous-maille $K_{\mathbf{s}}$ est alors donnée, pour une maille K et l'un de ses nœuds $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K$, par le polyèdre ayant pour sommets \mathbf{x}_K , \mathbf{s} , \mathbf{y}_{σ_i} , \mathbf{y}_{e_i} , $i = 1, \dots, n$, où les faces et les arêtes de K partageant le sommet \mathbf{s} sont respectivement σ_i et e_i , $i = 1, \dots, n$ (dans le cas général, $n = 3$ sur maillage standard) ; l'ensemble des faces de cette sous-maille est noté par $\mathcal{F}_{K,\mathbf{s}}$; on note alors, pour tout $\sigma \in \mathcal{F}_{K,\mathbf{s}}$, par $K_{\mathbf{s}}^\sigma$ l'élément d'une partition de $K_{\mathbf{s}}$ vérifiant,

$$|K_{\mathbf{s}}^\sigma| = \frac{|\sigma|}{\sum_{\sigma' \in \mathcal{F}_{K,\mathbf{s}}} |\sigma'|} |K_{\mathbf{s}}|.$$

Le schéma HAG est alors défini en suivant le concept de schéma gradient (2.26),

1. l'ensemble des inconnues discrètes $X_{\mathcal{D}}$ est l'espace des vecteurs réels de dimensions finis contenant toutes les familles de réels $U = ((u_K)_{K \in \mathcal{M}}, (u_\sigma)_{\sigma \in \mathcal{F}})$, tel que $u_\sigma = 0$ si σ est une face de bord ; le processus permettant de réduire cet espace d'inconnues hybride aux inconnues centrées aux mailles est le suivant ; si σ est une face de $K_{\mathbf{s}}$ interne à K , alors la valeur u_σ peut s'éliminer en l'exprimant comme une combinaison linéaire consistante des valeurs u_K , à l'aide de l'expression consistante aux points \mathbf{y}_σ et \mathbf{y}_e ; cependant si le point \mathbf{y}_σ n'est pas sur la face σ , alors σ est toujours considérée comme une face hybride et u_σ reste une inconnue supplémentaire au regard des inconnues centrées aux mailles ;
2. l'opérateur $\Pi_{\mathcal{D}} : X_{\mathcal{D}} \rightarrow L^2(\Omega)$ associant à $U \in X_{\mathcal{D}}$ la fonction constante par morceaux $u_{\mathcal{D}} \in L^2(\Omega)$ égale à u_K sur chaque maille $K \in \mathcal{M}$;
3. la reconstruction d'un gradient discret $\nabla_{\mathcal{D}} : X_{\mathcal{D}} \rightarrow L^2(\Omega)^3$ constant par sous-maille,

$$\nabla_{\mathcal{D}} U(\mathbf{x}) = \nabla_{K_{\mathbf{s}}}^\sigma U \text{ pour tout } \mathbf{x} \in K_{\mathbf{s}}^\sigma,$$

où $\nabla_{K_{\mathbf{s}}}^\sigma U$ résulte d'un gradient sur le sous-maillage stabilisé comme suit,

$$\nabla_{K_{\mathbf{s}}}^\sigma U = \nabla_{K_{\mathbf{s}}} U + \beta \frac{\sum_{\sigma' \in \mathcal{F}_{K_{\mathbf{s}}}} |\sigma'|}{|K_{\mathbf{s}}|} (u_\sigma - u_K - \nabla_{K_{\mathbf{s}}} u \cdot (\mathbf{y}_\sigma - \mathbf{x}_K)) n_{K_{\mathbf{s}},\sigma},$$

avec $\nabla_{K_{\mathbf{s}}} U$ dérivant de la formule de Stokes et s'écrivant ainsi,

$$|K_{\mathbf{s}}| \nabla_{K_{\mathbf{s}}} U = \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_{K_{\mathbf{s}}}} |\sigma| (u_\sigma - u_K) n_{K_{\mathbf{s}},\sigma}.$$

Dans la formule précédente, β est un réel positif dont la valeur a été fixé à 1 en pratique.

2.5 Résultats numériques

Cette section regroupe différents tests numériques 3D qui ont été réalisés. Ces études ont permis d’apprécier la convergence des différents schémas présentés au début du chapitre sur une large gamme de cas tests. Les différents résultats sont classés comme suit,

1. Etude de la convergence de l’ensemble des schémas cités ci-avant dans le contexte d’une simulation monophasique sur maillage proche puits. Ces résultats ont été publiés dans les proceedings du congrès ECMOR-XII [18], 12th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery, et sont ici complétés par de récents résultats obtenus avec la méthode VAG ;
2. Dans la continuité de la mise en œuvre de cas tests dits métiers, le nouveau schéma VAG a été étudié sur des maillages bassins réalistes. Ce type de grille est un exemple idoine pour illustrer l’amélioration apportée par la version révisée de VAG, nommée VAGR ;
3. A l’occasion du 6ème congrès FVCA, Finite Volumes for Complex Applications 6, un benchmark 3D pour des problèmes de diffusion a été mis en place par Raphaële Herbin et Florence Hubert [35]. Les résultats obtenus avec VAG et VAGR y ont été présentés ;
4. Lors d’un séjour au CIPR - *Centre for Integrated Petroleum Research* - Université de Bergen, Norvège, une série de cas tests a été étudiée avec Haakon Haegland pour comparer les schémas MPFA O et L à la méthode VAG. On présente ici une partie de ce travail collaboratif et plus particulièrement un cas test hétérogène anisotrope qui a été mis en œuvre sur différents types de grilles.

2.5.1 Simulation proche puits

Comme exposé dans le chapitre 1.2 introductif, la simulation des écoulements au voisinage des puits est une tâche complexe. Ce travail porte sur un modèle proche puits basé sur des maillages 3D qui sont judicieusement raffinés autour du puits, et sur l’emploi de schémas numériques ad-hoc. La première étape de la discrétisation est donc de créer un maillage radial qui est exponentiellement raffiné jusqu’à la frontière délimitée par le bord du puits. Ce raffinement radial implique de construire un maillage de transition entre la grille radiale et la grille CPG (*Corner Point Geometry*) du réservoir à l’aide, soit d’hexaèdres, soit de pyramides et de tétraèdres, comme illustré sur la Figure 2.7. Cette zone de transition permet de coupler la simulation proche puits à celle sur l’ensemble du réservoir.

On cherche ici à réaliser une simulation monophasique sur ces maillages à l’aide des différents schémas décrits dans ce manuscrit pour ainsi apprécier et comparer la qualité des différentes approximations.

Solution analytique et domaine de simulation.

Pour cette étude comparative, on considère une ligne droite l_w de \mathbb{R}^3 située dans le plan xOz incliné d’un angle θ avec l’axe x , et un cylindre circulaire W de rayon r_w axé suivant

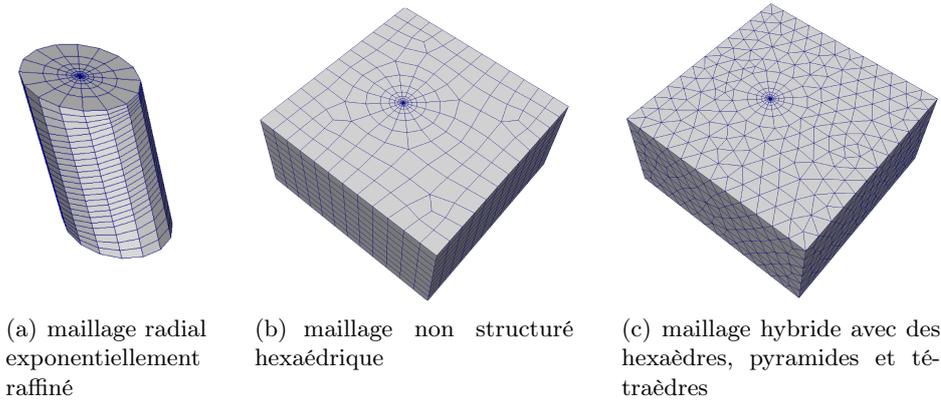


FIGURE 2.7 – Maillages proches puits

l_w symbolisant le puits. Soit Λ un tenseur de perméabilité anisotrope et homogène, supposé diagonal suivant les directions cartésiennes x, y, z . Ses termes diagonaux sont dénotés dans la suite λ_x, λ_y et λ_z .

Une solution analytique P_e est décrite dans [7] pour un problème de Darcy monophasique sur le domaine infini $\mathbb{R}^3 \setminus \overline{W}$ vérifiant,

$$-\operatorname{div}(\Lambda \nabla P_e) = 0 \text{ sur } \mathbb{R}^3 \setminus \overline{W}, \quad (2.31)$$

avec une condition de pression imposée P_w et une condition de débit imposé Q_w au bord puits.

Pour construire la solution analytique à ce problème, l'idée est de jouer sur des transformations géométriques et des changements de variables pour ainsi se ramener à un problème trivial. La première étape - appelé "stretching" (*étirement des axes*) - consiste en une transformation affine permettant de supprimer la difficulté liée à l'anisotropie. Dans le système de coordonnées transformé, le milieu est donc isotrope permettant ainsi de passer de l'équation de Darcy à l'équation de Laplace. Durant le "stretching" l'angle du puits θ a été modifié; un calcul géométrique permet d'expliciter θ' , nouvel angle d'inclinaison. Le pourtour du puits a également été transformé, le cylindre W n'est plus circulaire mais elliptique. Après l'anisotropie, la seconde difficulté du problème initial (2.31) reste donc la déviation du puits. Pour y remédier, on effectue une rotation d'angle $-\theta'$ autour de l'axe y pour aligner le puits dans la direction horizontale. A ce stade, il faut donc résoudre l'équation de Laplace avec des conditions aux limites sur le bord de l'ellipse puits. L'idée est de passer au système de coordonnées elliptiques (ρ, ϕ) où le problème initial (2.31) devient,

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 P_e}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2 P_e}{\partial \phi^2} = 0 \text{ sur } \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\{(\rho, \phi) \mid \rho = \rho_w\}} \\ P_e = P_w \text{ sur } \rho = \rho_w \end{cases}$$

La solution à ce problème, indépendante de ϕ , est,

$$P_e(\rho) = P_w + C(\rho - \rho_w)$$

où C est une constante dépendante de Q_w et Λ déterminée par intégration.

Pour définir un domaine de simulation borné Ω , le domaine infini $\mathbb{R}^3 \setminus \overline{W}$ est découpé en un parallélépipède, illustré sur la Figure 2.8, suivant les directions cartésiennes x, y, z et de longueurs respectives L_x, L_y, L_z . Deux familles de grilles raffinées sont construites sur ce domaine en se basant sur une zone radiale hexaédrique de rayon r_e exponentiellement raffinée à partir du bord puits, Figure 2.7(a). Chaque famille correspond alors à un type de maillage de transition utilisé pour raccorder la partie radiale et l'extérieur du domaine. La première est hexaédrique pure, Figure 2.7(b) ; la seconde est hybride, Figure 2.7(c), constituée de pyramides, connectées à la partie radiale, et de tétraèdres.

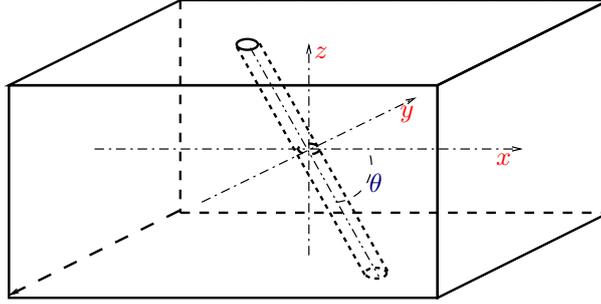


FIGURE 2.8 – Domaine de simulation. Figure Benchmark 3D - FVCA6.

Soit \bar{P}_e la restriction de P_e à Ω ; \bar{P}_e est solution du problème de Darcy monophasique, aux conditions limites de type Dirichlet, suivant,

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\Lambda \nabla \bar{P}_e) = 0 & \text{sur } \Omega, \\ \bar{P}_e = P_e & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases} \quad (2.32)$$

Résultats numériques.

Ce problème (2.32) et sa solution analytique sont utilisés pour étudier la convergence des schémas Arcane O, L, G et GradCell (section 2.2), et les nouveaux schémas HAG et VAGR (section 2.4). Le choix de présenter les résultats pour VAGR et non VAG se justifie par les observations faites lors de la comparaison de ces deux méthodes sur le test équivalent du Benchmark (sous-section 2.5.3), où VAGR était donc le plus précis.

L'erreur de la solution discrète $P \in X_{\mathcal{D}}$ est mesurée selon l'erreur L^2 discrète suivante,

$$\| P - \bar{P}_e \|_{L^2}^2 = \frac{\sum_{K \in \mathcal{M}} |K| (P_K - \bar{P}_e(\mathbf{x}_K))^2}{\sum_{K \in \mathcal{MT}} |K|}.$$

Les erreurs sont tracées en fonction de h , pas du maillage, défini ici comme le diamètre de la plus grande maille de la zone radiale, et du nombre d'éléments non nuls dans matrice du système linéaire global qui est égal au produit du nombre d'inconnues par la taille du stencil du schéma.

Les tests ont été réalisés avec les données suivantes,

- $L_x = 30$ m, $L_y = 30$ m et $L_z = 15$ m,
- $r_w = 10$ cm et $r_e = 5$ m,
- $\theta = -70^\circ$,
- $P_w = 1$ et $Q_w = 1$,
- $\lambda_x = \lambda_y$ et $\lambda_z = \frac{\lambda_x}{5}$.

Le tenseur Λ est donc homogène, légèrement anisotrope dans le direction z et non alignés avec l'axe du puits.

Pour les maillages hybrides, la convergence des différents schémas est représentée sur la Figure 2.9. Observons tout d'abord que le schéma VAGR est le plus précis. La vitesse de convergence est de l'ordre de h^2 pour toutes les méthodes. Notons également que le O-schéma présente de bons résultats, à la fois en termes de précision que de vitesse de convergence. Cependant, le principal inconvénient du O-schéma sur ce type de maillage est son très grand stencil. Par conséquent, il est le plus coûteux en termes d'occupation mémoire et de temps CPU. En effet, il est connu que sur grilles tétraédriques, le O-schéma présente un stencil de l'ordre d'une centaine de mailles ; alors qu'en comparaison le schéma VAGR admet environ 5 fois moins d'inconnues, tout en ayant un stencil plus petit. Au regard du nombre d'éléments non-nuls de ces deux schémas, cette observation est illustrée sur la Figure 2.9(b).

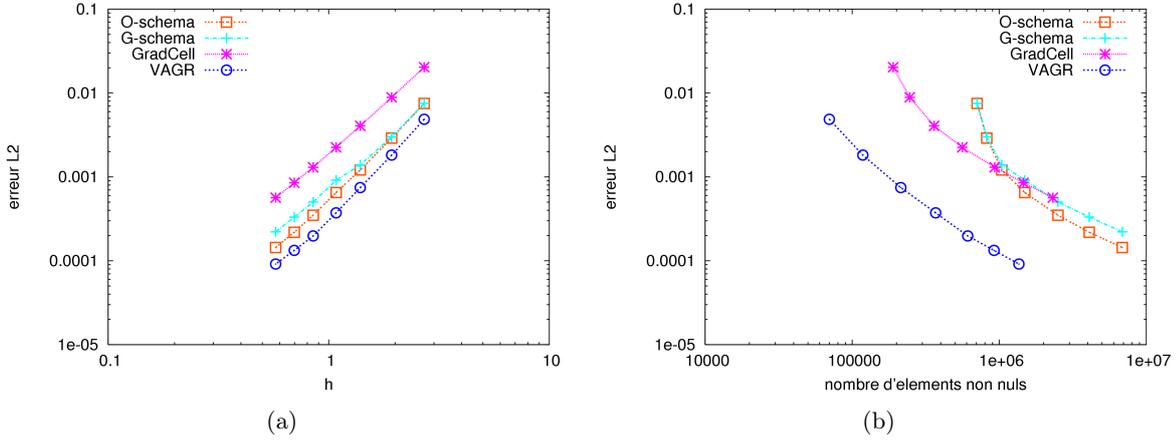


FIGURE 2.9 – Erreur L^2 en pression - maillages hybride

La convergence du L-schéma n'est pas tracée pour cette famille de maillage hybride en raison d'un échec lors de la construction des flux numériques. En effet, au moins une des matrices A^G , issue des systèmes locaux (2.20) intervenant dans la construction des gradients locaux, est singulière. Le G-schéma, plus souple, évite ce problème en ne tenant pas compte des groupes G conduisant à des matrices singulières A^G dans les combinaisons convexes linéaires (2.22)

définissant les flux. En utilisant cette astuce, les résultats obtenus avec le G-schéma sont assez proches de ceux du O-schéma, en particulier sur les maillages grossiers.

Malgré une convergence quadratique, l'erreur du schéma GradCell est clairement la plus importante, et pour toutes les grilles. Néanmoins, par rapport aux schémas centrés aux mailles O et G, le schéma GradCell a l'avantage d'avoir un stencil plus petit, ce qui conduit donc à une réduction de l'occupation mémoire et du temps CPU. Cependant GradCell reste bien plus coûteux et moins précis que le schéma centré aux nœuds VAGR. En effet sur des maillages tétraédriques, l'utilisation d'un schéma nodal permet de réduire d'un facteur 5 le nombre de degré de liberté en comparaison aux méthodes centrées aux mailles. A ce sujet, la Figure 2.9(b) montre très clairement qu'à précision donnée, le schéma VAGR est de loin celui qui génère la matrice la plus creuse. Sur cette famille de maillages, VAGR est donc le schéma le plus précis et le plus efficace.

Notons que la mise en œuvre du schéma HAG tenant compte des pyramides est un travail toujours ouvert.

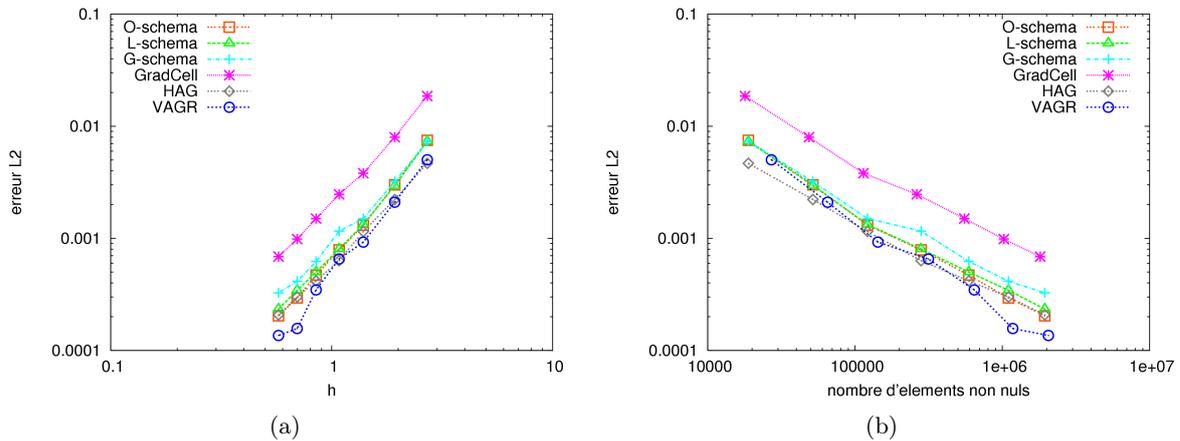


FIGURE 2.10 – Erreur L^2 en pression - maillages hexaédriques

Pour la famille de maillages hexaédriques non structurés, la convergence des différents schémas est représentée sur la Figure 2.10. Le taux de convergence est à nouveau d'ordre 2 pour tous les schémas. Les schémas en O et L ont le même comportement, leurs courbes d'erreur sont quasiment confondues. Le schéma VAGR offre une fois encore la plus petite erreur, en particulier sur des maillages fins. Si l'on compare HAG aux schémas O et L, HAG est plus précis mais uniquement sur les maillages grossiers. Cela peut s'expliquer par le fait que la probabilité d'obtenir des faces planes augmente avec le raffinement du maillage. En outre, HAG définit des sous-cellules à faces triangulaires, rendant le schéma HAG moins sensible aux faces gauches que les schémas O et L.

La Table 2.11 montre que le nombre d'inconnues hybrides introduit par le schéma HAG est négligeable au regard du nombre d'inconnues centrées aux mailles.

Les schémas G et GradCell présentent le même comportement sur les deux familles de maillages hexaédriques et hybrides. En effet, les résultats obtenus sur les maillages hexaédriques avec

le G-schéma sont assez proches des schémas O et L, mais son erreur reste légèrement plus importante. Le schéma GradCell a de nouveau l'erreur la plus élevée sur toutes les grilles, bien que son taux de convergence soit optimal. Son stencil reste encore le plus petit, mais de peu sur ce type de maillage hexaédrique.

maillage	1	2	3	4	5	6	7
# mailles	890	2232	5016	11220	23210	42633	74679
# faces hybride	0	32	0	0	24	40	44

FIGURE 2.11 – Nombres d'inconnues hybrides introduits par le schéma HAG.

Enfin, comme l'on pouvait s'y attendre, le nombre d'éléments non nuls du système linéaire global des différents schémas sont similaires comme illustré sur la Figure 2.10(b).

Bilan

A précision donnée, les maillages hexaédriques associés à des schémas centrés aux mailles conduisent à une réduction de l'encombrement mémoire et du temps CPU, en comparaison avec les grilles hybrides. Cette observation n'est plus véridique pour un schéma nodal tel que VAGR. Notons que, à zone radiale équivalente, les maillages hybrides aboutissent à une erreur L^2 en pression plus faible. Mais à degrés de libertés équivalents, la valeur de l'erreur est semblable entre les deux familles de maillages alors que, à l'exception de VAGR, le coût est bien plus important sur les maillages hybrides.

Les résultats obtenus avec les nouveaux schémas HAG et VAG sont très prometteurs, ils sont plus précis que le O-schéma et ils devraient être plus robustes en raison de leur coercivité inconditionnelle. Pour HAG, le coût supplémentaire dû aux inconnues aux faces hybrides est négligeable dans cette étude.

Sur maillages hybrides, le L-schéma échoue en raison de systèmes linéaires locaux singuliers nécessaires à la construction des gradients discrets. Le G-schéma arrive à contourner cette difficulté, mais reste moins précis que le O-schéma. Le schéma GradCell est toujours le moins précis et même si son stencil est en moyenne 4 fois moins dense sur grille hybride il reste moins efficace que VAGR.

2.5.2 Bassin sédimentaire

Ces tests permettent de comparer, sur des maillages bassins, les nouveaux schémas VAG (2.27) et VAGR (2.28) aux schémas existants tels que le schémas deux points TPFA, le O-schéma (sous-section 2.2.1) et un schéma Volumes Finis Hybrides noté VFH [26]. Sur ce type de grille, la difficulté pour les schémas réside dans les érosions qui conduisent à des mailles hexaédriques dégénérées comme illustré au chapitre introductif sur la Figure 1.1(b), les forts contrastes d'épaisseurs d'une couche géologique à l'autre, et de forts pendages. A noter que le O-schéma utilisé pour ces tests dégénère en TPFA localement sur certaines mailles dégénérées comme cela est le cas lorsque des nœuds sont joints par uniquement deux faces dans la maille.

Le schéma TPFA sur ces maillages n'est pas consistant, il sert ici de référence pour évaluer l'amélioration des schémas en termes de précision et leurs surcoûts en temps CPU.

On considère de le problème de diffusion, introduit précédemment, sous-section 2.1.1, sur $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, de frontière $\partial\Omega$ suivant,

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\Lambda \nabla \bar{u}) = f \text{ sur } \Omega, \\ \bar{u} = u_d \text{ sur } \partial\Omega, \end{cases}$$

où \bar{u} est l'inconnue et u_d une condition limite de type Dirichlet. Le tenseur Λ est égal à la matrice identité \mathbb{I} et est donc isotrope homogène sur le domaine Ω . La solution régulière appliquée comme condition aux limites de type Dirichlet non-homogène sur l'ensemble des frontières du domaine $\partial\Omega$ est donnée par,

$$u(x, y, z) = \frac{z}{2000} + e^{\cos\left(\frac{x+y+z}{2000}\right)}.$$

On donne ci-après les erreurs L^2 et L^∞ relatives sur les solutions aux mailles et le temps CPU additionnant le temps CPU du calcul des coefficients de transmissivité des schémas et de l'assemblage de la matrice globale. Notons que dans un contexte polyphasique, les coefficients de transmissivité des schémas ne sont pas systématiquement re-calculées comme expliqué au chapitre 3.3.2 suivant.

Le centre des mailles est donné par le milieu des isobarycentres des deux faces supérieure et inférieure de la maille, ce qui garantit la propriété d'étoilement.

• **Maillage 1.** Le premier test est réalisé sur un maillage bassin de 8601 mailles, dont 6% de mailles dégénérées, illustré sur la Figure 2.12. Les résultats obtenus sont regroupés dans la Table 2.1.

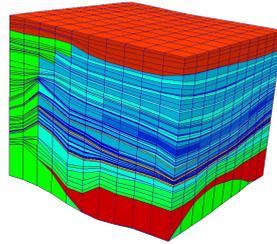


FIGURE 2.12 – Maillage bassin 1 - 8601 mailles - La couleur représente la lithologie.

	TPFA	O-schéma	VFH	VAG	VAGR
erreur L^2 aux mailles	0.16	0.019	0.0085	0.047	0.023
erreur L^∞ aux mailles	0.33	0.06	0.0235	0.11	0.053
CPU schéma + assemblage	0.012	0.38	0.24	0.43	0.32

TABLE 2.1 – Résultats maillage 1

Remarquons tout d'abord que le schéma hybride VFH est le plus précis et le schéma TPFA le moins. La précision du schéma VFH à un coût en temps CPU et encombrement mémoire. De même, le coût minimaliste du schéma TPFA, aussi bien en mémoire qu'en temps d'exécution, se paye en précision. Au delà d'illustrer le dur équilibre entre précision et coût, ce cas test montre l'amélioration faite en termes de temps CPU et de précision par la version révisée VAGR versus le schéma initial VAG ; l'erreur est divisée par un facteur deux. L'amélioration en temps CPU vient du fait que la triple boucle sur les sommets nécessaire à VAG pour calculer les coefficients de transmissivité est remplacée dans le cadre du schéma VAGR par une boucle sur les faces puis trois boucles sur les sommets de la face. La méthode révisée VAGR apparaît finalement comme un bon compromis précision/temps calcul.

- **Maillage 2.** Le second test a été réalisé sur un maillage bassin de 53279 mailles, dont 9% de mailles dégénérées, illustré sur la Figure 2.13. Les résultats obtenus sont regroupés dans la Table 2.2.

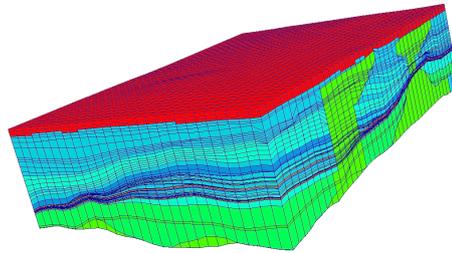


FIGURE 2.13 – Maillage bassin 2 - 53279 mailles - La couleur représente la lithologie.

	TPFA	O-schéma	VFH	VAG	VAGR
erreur L^2 aux mailles	0.068	0.035	0.013	0.18	0.033
erreur L^∞ aux mailles	0.23	0.21	0.05	0.27	0.13
CPU schéma + assemblage	0.07	2.65	1.45	2.54	1.90

TABLE 2.2 – Résultats maillage 2

Une seconde fois, le schéma hybride VFH est le plus précis. En outre, on ne peut pas manquer de remarquer que le schéma VAG est moins précis que le schéma TPFA. Cette constatation a fait partie des ingrédients motivant le développement d'une version alternative sans terme de stabilisation. Ainsi les résultats obtenus avec la méthode VAGR présentent une nouvelle fois ce schéma comme un bon compromis précision/coût.

- **Remarque sur l'erreur aux nœuds de VAG(R).** Le choix du calcul de l'erreur L^2 avec les valeurs aux centres des mailles, et non aux sommets, rend ces résultats un peu pessimistes. Notons également que pour le schéma VAG, la valeur du paramètre de stabilisation γ fixée à 5 semble optimale pour minimiser l'erreur aux mailles, mais cette observation ne semble plus vérifiée si l'on regarde l'erreur aux nœuds. Ces observations s'appuient sur les erreurs aux nœuds calculées et résumées dans les Tables 2.3 et 2.4.

	VAG ($\gamma = 5$)	VAG ($\gamma = 2$)	VAGR
erreur L^2 aux nœuds	0.036	0.012	0.008
erreur L^∞ aux nœuds	0.086	0.047	0.03

TABLE 2.3 – Résultats maillage 1

	VAG ($\gamma = 5$)	VAG ($\gamma = 2$)	VAGR
erreur L^2 aux nœuds	0.17	0.065	0.014
erreur L^∞ aux nœuds	0.26	0.15	0.08

TABLE 2.4 – Résultats maillage 2

2.5.3 Benchmark 3D

Ce benchmark 3D a été mis en place à l’occasion du 6^{ème} congrès FVCA par Raphaèle Herbin et Florence Hubert ; les résultats ont été centralisés dans [35] d’où est directement reproduit la description, ci-après, des cas tests et des sorties demandées. On présente ici les résultats obtenus avec le schéma VAGR, version révisée de VAG. Toutes les informations relatives à ce benchmark sont disponibles sur internet à l’adresse,

http://www.latp.univ-mrs.fr/latp_numerique/?q=node/4

Le problème considéré équivaut au problème modèle introduit en préambule du chapitre, sous-section 2.1.1, que nous rappelons succinctement. Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, de frontière $\partial\Omega = \bar{\Omega} \setminus \Omega$, on considère le problème de diffusion suivant,

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\Lambda \nabla \bar{u}) = f \text{ sur } \Omega, \\ \bar{u} = u_{\text{d}} \text{ sur } \partial\Omega, \end{cases}$$

où \bar{u} est l’inconnue et u_{d} une condition limite de type Dirichlet.

Cas tests et maillages

Les cas tests sont résumés dans la Table 2.5, où sont spécifiés pour chacun, le domaine Ω , les notations du tenseur Λ et de la solution exacte. Le nom des différentes familles de maillages est également formulé. Les données indexées dans la Table 2.5, tel que tenseurs ou solutions exactes, sont décrites ci-après, cas test par cas test. Les maillages sont illustrés sur la Figure 2.14.

Résultats numériques

On présente ici les résultats obtenus avec le schéma VAGR. Dans l’implémentation numérique, les valeurs u_K sont localement éliminées, et les inconnues du système linéaire sont donc les valeurs u_s . Les résultats obtenus pour un cas test donné sont présentés dans **deux tables**.

Cas test	Domaine	Tenseur $\Lambda(x, y, z)$	Solution $\bar{u}(x, y, z)$	Maillages
Test 1 Anisotropie légère	Cube unité	$\Lambda_1(x, y, z)$	$u_1(x, y, z)$	Tetrahedral (B) Voronoi (C) Kershaw (D) Checkerboard (I)
Test 2 Hétérogénéité et anisotropie	Cube unité	$\Lambda_2(x, y, z)$	$u_2(x, y, z)$	Prism (F)
Test 3 Grilles aléatoires	Déterminé par le maillage	$\Lambda_3(x, y, z)$	$u_3(x, y, z)$	Random (AA)
Test 4 Test Puits	Ω_4	$\Lambda_4(x, y, z)$	$u_4(x, y, z)$	Well (BB)
Test 5 Localement raffinés	Cube unité	$\Lambda_5(x, y, z)$	$u_5(x, y, z)$	Locally refined (H)

TABLE 2.5 – Les cas tests.

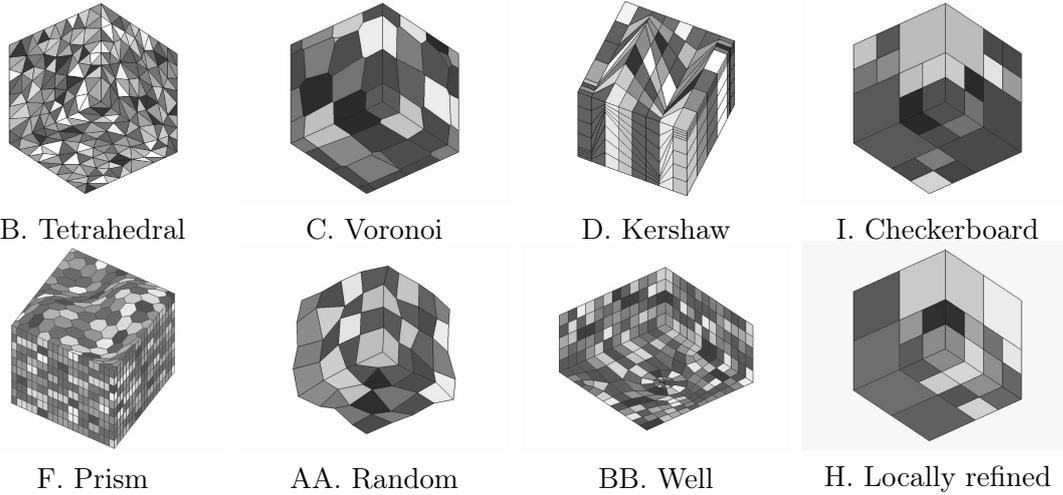


FIGURE 2.14 – Les différents maillages.

La **première Table 2.6** réfère à des données relatives à la taille du problème discret produit par le schéma et des informations sur la qualité de l'approximation numérique. En particulier, les valeurs minimales et maximales aux centres des mailles sont comparées entre solution exacte et discrète, et une estimation de $\text{normg} \sim \int_{\Omega} \|\nabla u\|$ permet d'évaluer les possibles oscillations de l'approximation que l'on calcule numériquement dans le cas de la méthode VAG à l'aide de la formule,

$$\text{normg} = \sum_{K \in \mathcal{M}} |K| |\nabla_K U|.$$

i	numéro du maillage
nu	nombre d'inconnues du système linéaire
nmat	nombre d'éléments non-nuls dans la matrice
umin	valeur minimale de la solution discrète aux centres des mailles
uemin	valeur minimale de la solution exacte aux centres des mailles
umax	valeur maximale de la solution discrète aux centres des mailles
uemax	valeur maximale de la solution exacte aux centres des mailles
normg	norme L^1 du gradient discret

TABLE 2.6 – Première table de résultats.

La **seconde Table 2.7** fournit des informations sur la précision du schéma à travers divers calculs d'erreurs dont la vitesse de convergence sera, pour tous, exprimée en fonction de **nu**, le nombre d'inconnues du système linéaire.

i	numéro du maillage
nu	nombre d'inconnues du système linéaire
erl2	erreur relative de la solution en norme L^2
ratio12	vitesse de convergence de erl2 entre les maillages i et i-1
ergrad	erreur relative du gradient en semi-norme H^1
ratiograd	vitesse de convergence de ergrad entre les maillages i et i-1
ener	erreur d'énergie relative de la solution
ratioener	vitesse de convergence de ener entre les maillages i et i-1

TABLE 2.7 – Deuxième table de résultats.

En notant par $|\cdot|$ la norme Euclidienne, les erreurs listées dans la Table 2.7 sont calculées comme suit pour la méthode VAG,

$$\text{erl2} = \left(\left(\sum_{K \in \mathcal{M}} |K| (u_K - u(\mathbf{x}_K))^2 \right) / \left(\sum_{K \in \mathcal{M}} |K| u(\mathbf{x}_K)^2 \right) \right)^{1/2},$$

$$\text{ergrad} = \left(\left(\sum_{K \in \mathcal{M}} |K| |\nabla_K U - \nabla u(\mathbf{x}_K)|^2 \right) / \left(\sum_{K \in \mathcal{M}} |K| |\nabla u(\mathbf{x}_K)|^2 \right) \right)^{1/2},$$

$$\text{ener} = \left(\left(\sum_{K \in \mathcal{M}} |K| |\nabla_K U - \nabla u(\mathbf{x}_K)|_\Lambda^2 \right) / \left(\sum_{K \in \mathcal{M}} |K| |\nabla u(\mathbf{x}_K)|_\Lambda^2 \right) \right)^{1/2},$$

avec, pour tout $K \in \mathcal{M}$, $|\xi|_\Lambda^2 = \Lambda_K \xi \cdot \xi$, $\forall \xi \in \mathbb{R}^3$.

• **Test 1.** On considère un tenseur Λ_1 anisotrope homogène sur le domaine Ω , et une solution régulière, notée u_1 , appliquée comme condition aux limites de type Dirichlet non-homogène sur l'ensemble des frontières du domaine $\partial\Omega$:

$$\Lambda_1(x, y, z) = \begin{pmatrix} 1 & 0.5 & 0 \\ 0.5 & 1 & 0.5 \\ 0 & 0.5 & 1 \end{pmatrix}$$

$$u_1(x, y, z) = 1 + \sin(\pi x) \sin\left(\pi\left(y + \frac{1}{2}\right)\right) \sin\left(\pi\left(z + \frac{1}{3}\right)\right)$$

Famille de maillages : **Tetrahedral**

i	nu	nmat	umin	uemin	umax	uemax	normg
1	488	6072	5.77E-02	2.03E-02	1.95E+00	1.99E+00	1.77E+00
2	857	11269	1.88E-02	6.84E-03	1.97E+00	1.99E+00	1.78E+00
3	1601	21675	2.19E-02	9.13E-03	1.98E+00	1.99E+00	1.79E+00
4	2997	41839	1.13E-02	5.52E-03	1.99E+00	2.00E+00	1.79E+00
5	5692	81688	8.73E-03	1.49E-03	1.99E+00	2.00E+00	1.79E+00
6	10994	160852	3.63E-03	1.83E-03	1.99E+00	2.00E+00	1.80E+00

i	nu	erl2	ratiol2	ergrad	ratiograd	ener	ratioener
1	488	1.76E-02	-	2.30E-01	-	2.28E-01	-
2	857	1.02E-02	2.93E+00	1.79E-01	1.35E+00	1.77E-01	1.35E+00
3	1601	6.79E-03	1.94E+00	1.44E-01	1.05E+00	1.42E-01	1.08E+00
4	2997	4.44E-03	2.03E+00	1.13E-01	1.14E+00	1.11E-01	1.17E+00
5	5692	2.79E-03	2.18E+00	9.02E-02	1.06E+00	8.89E-02	1.03E+00
6	10994	1.75E-03	2.13E+00	7.04E-02	1.13E+00	6.92E-02	1.15E+00

Famille de maillages : **Voronoi**

i	nu	nmat	umin	uemin	umax	uemax	normg
1	146	5936	7.54E-02	1.56E-01	2.15E+00	1.86E+00	1.14E+00
2	339	16267	-3.42E-01	1.79E-01	1.95E+00	1.81E+00	1.43E+00
3	684	37194	8.40E-04	2.67E-02	2.02E+00	1.93E+00	1.60E+00
4	1227	71069	-9.54E-02	1.20E-02	2.06E+00	1.91E+00	1.66E+00
5	2023	127883	-1.78E-02	3.85E-03	2.06E+00	1.97E+00	1.70E+00

i	nu	erl2	ratiol2	ergrad	ratiograd	ener	ratioener
1	146	1.82E-01	-	3.96E-01	-	4.05E-01	-
2	339	1.87E-01	-8.43E-02	2.49E-01	1.65E+00	2.53E-01	1.68E+00
3	684	9.92E-02	2.70E+00	1.55E-01	2.02E+00	1.62E-01	1.90E+00
4	1227	7.15E-02	1.68E+00	1.19E-01	1.35E+00	1.23E-01	1.42E+00
5	2023	4.74E-02	2.47E+00	9.56E-02	1.33E+00	9.92E-02	1.29E+00

Famille de maillages : **Kershaw**

i	nu	nmat	umin	uemin	umax	uemax	normg
1	729	15625	7.80E-02	3.03E-02	1.96E+00	1.96E+00	1.56E+00
2	4913	117649	1.72E-02	1.06E-02	1.98E+00	1.99E+00	1.68E+00
3	35937	912673	-2.58E-04	1.75E-03	1.99E+00	2.00E+00	1.74E+00
4	274625	7189057	-2.64E-04	7.14E-04	2.00E+00	2.00E+00	1.78E+00

i	nu	erl2	ratio12	ergrad	ratiograd	ener	ratioener
1	729	9.17E-02	-	4.91E-01	-	4.84E-01	-
2	4913	5.53E-02	7.96E-01	3.09E-01	7.28E-01	2.84E-01	8.40E-01
3	35937	2.97E-02	9.38E-01	1.74E-01	8.70E-01	1.54E-01	9.22E-01
4	274625	1.22E-02	1.31E+00	7.40E-02	1.26E+00	6.44E-02	1.29E+00

Famille de maillages : **Checkerboard**

i	nu	nmat	umin	uemin	umax	uemax	normg
1	97	2413	-9.81E-02	1.54E-01	2.08E+00	1.85E+00	1.34E+00
2	625	22585	-1.90E-01	4.01E-02	2.19E+00	1.96E+00	1.70E+00
3	4417	188641	-6.12E-02	1.01E-02	2.06E+00	1.99E+00	1.78E+00
4	33025	1529617	-1.70E-02	2.54E-03	2.02E+00	2.00E+00	1.79E+00
5	254977	12295153	-4.33E-03	6.36E-04	2.00E+00	2.00E+00	1.80E+00

i	nu	erl2	ratio12	ergrad	ratiograd	ener	ratioener
1	97	3.25E-01	-	4.37E-01	-	3.97E-01	-
2	625	1.11E-01	1.73E+00	1.50E-01	1.72E+00	1.52E-01	1.54E+00
3	4417	3.01E-02	2.00E+00	5.73E-02	1.47E+00	6.09E-02	1.41E+00
4	33025	7.92E-03	1.99E+00	2.51E-02	1.23E+00	2.77E-02	1.18E+00
5	254977	2.03E-03	2.00E+00	1.18E-02	1.11E+00	1.32E-02	1.08E+00

• **Test 2.** On considère un tenseur Λ_2 continu et hétérogène sur le domaine Ω , et une solution régulière, notée u_2 , appliquée comme condition aux limites de type Dirichlet non-homogène sur l'ensemble des frontières du domaine $\partial\Omega$:

$$\Lambda_2(x, y, z) = \begin{pmatrix} y^2 + z^2 + 1 & -xy & -xz \\ -xy & x^2 + z^2 + 1 & -yz \\ -xz & -yz & x^2 + y^2 + 1 \end{pmatrix}$$

$$u_2(x, y, z) = x^3 y^2 z + x \sin(2\pi x z) \sin(2\pi x y) \sin(2\pi z)$$

Famille de maillages : **Prism**

i	nu	nmat	umin	uemin	umax	uemax	normg
1	3080	99634	-8.73E-01	-8.41E-01	1.10E+00	9.84E-01	1.53E+00
2	20160	710894	-8.25E-01	-8.39E-01	1.04E+00	1.01E+00	1.66E+00
3	63240	2301754	-8.52E-01	-8.59E-01	1.05E+00	1.03E+00	1.69E+00
4	144320	5340214	-8.53E-01	-8.57E-01	1.04E+00	1.03E+00	1.70E+00

i	nu	erl2	ratiol2	ergrad	ratiograd	ener	ratioener
1	3080	1.66E-01	-	1.40E-01	-	1.38E-01	-
2	20160	4.26E-02	2.17E+00	3.71E-02	2.13E+00	3.64E-02	2.13E+00
3	63240	1.93E-02	2.08E+00	1.67E-02	2.10E+00	1.63E-02	2.10E+00
4	144320	1.10E-02	2.05E+00	9.44E-03	2.06E+00	9.25E-03	2.07E+00

• **Test 3.** On considère un tenseur Λ_3 anisotrope et homogène sur le domaine, et une solution régulière, notée u_3 . Les maillages sont le résultat d'une perturbation aléatoire des nœuds du cube unité. Cette transformation implique que les nœuds ne sont plus localisés sur le bord du cube unité, la condition limite obtenue en appliquant u_3 est donc de type Dirichlet non-homogène.

$$\Lambda_3(x, y, z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 10^3 \end{pmatrix}$$

$$u_3(x, y, z) = \sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z)$$

Famille de maillages : **Random**

i	nu	nmat	umin	uemin	umax	uemax	normg
1	125	2197	-1.51E+00	-7.55E-01	1.68E+00	6.98E-01	1.53E+00
2	729	15625	-1.13E+00	-9.39E-01	1.21E+00	9.24E-01	2.99E+00
3	4913	117649	-1.08E+00	-9.85E-01	1.06E+00	9.82E-01	3.44E+00
4	35937	912673	-1.01E+00	-9.96E-01	1.01E+00	9.96E-01	3.56E+00

i	nu	erl2	ratiol2	ergrad	ratiograd	ener	ratioener
1	125	1.15E+00	-	6.19E-01	-	6.26E-01	-
2	729	2.56E-01	2.56E+00	2.02E-01	1.90E+00	1.81E-01	2.11E+00
3	4913	5.93E-02	2.30E+00	8.04E-02	1.45E+00	5.30E-02	1.93E+00
4	35937	1.49E-02	2.09E+00	3.45E-02	1.28E+00	1.74E-02	1.68E+00

• **Test 4.** Ce cas test est semblable à celui présenté auparavant dans la sous-section 2.5.1. Le domaine est donné par $\Omega_4 = P \setminus W$, où P est le parallélépipède $]-15, 15[\times]-15, 15[\times]-7.5, 7.5[$ et W est un cylindre incliné de rayon $r_w = 0.1$. L'axe du puits est une ligne droite située dans le plan xOz , passant par l'origine, inclinée d'un angle $\theta = -70^\circ$ avec l'axe x comme illustré sur la Figure 2.8. Le tenseur Λ_4 est homogène et légèrement anisotrope dans le direction z ,

$$\Lambda_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0.2 \end{pmatrix}.$$

Nous rappelons que la solution exacte u_4 est détaillée dans la littérature [7] et précédemment commentée en sous-section 2.5.1.

Famille de maillages : **Well**

i	nu	nmat	umin	uemin	umax	uemax	normg
1	1248	27072	3.89E-01	4.29E-01	5.32E+00	5.32E+00	1.68E+03
2	2800	65184	2.41E-01	2.50E-01	5.33E+00	5.33E+00	1.65E+03
3	5889	143079	1.55E-01	1.57E-01	5.33E+00	5.33E+00	1.64E+03
4	12582	314964	1.18E-01	1.20E-01	5.33E+00	5.33E+00	1.63E+03
5	25300	645210	9.03E-02	9.09E-02	5.34E+00	5.34E+00	1.63E+03
6	45668	1178094	7.27E-02	7.30E-02	5.34E+00	5.35E+00	1.63E+03
7	79084	2055600	5.69E-02	5.68E-02	5.36E+00	5.36E+00	1.63E+03

i	nu	erl2	ratio12	ergrad	ratiograd	ener	ratioener
1	1248	6.47E-03	-	5.78E-02	-	5.35E-02	-
2	2800	2.71E-03	3.23E+00	2.54E-02	3.05E+00	2.34E-02	3.08E+00
3	5889	1.19E-03	3.31E+00	1.23E-02	2.93E+00	1.15E-02	2.85E+00
4	12582	8.42E-04	1.37E+00	7.59E-03	1.91E+00	7.31E-03	1.79E+00
5	25300	4.47E-04	2.72E+00	5.10E-03	1.71E+00	4.95E-03	1.68E+00
6	45668	2.02E-04	4.03E+00	3.55E-03	1.83E+00	3.47E-03	1.80E+00
7	79084	1.75E-04	7.84E-01	3.26E-03	4.76E-01	3.19E-03	4.56E-01

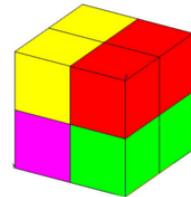
• **Test 5** Le domaine $\Omega = [0, 1]^3$ est découpé en quatre sous-domaines $\Omega = \cup_{i=1}^4 \Omega_i$, qui sont définis par,

$$\Omega_1 = \{(x, y, z) \in [0, 1]^3 \text{ tel que } y \leq 0.5, z \leq 0.5\}$$

$$\Omega_2 = \{(x, y, z) \in [0, 1]^3 \text{ tel que } y > 0.5, z \leq 0.5\}$$

$$\Omega_3 = \{(x, y, z) \in [0, 1]^3 \text{ tel que } y > 0.5, z > 0.5\}$$

$$\Omega_4 = \{(x, y, z) \in [0, 1]^3 \text{ tel que } y \leq 0.5, z > 0.5\}$$



Le tenseur Λ_5 et la solution exacte u_5 sont donnés par,

$$\Lambda_5(x, y, z) = \begin{pmatrix} a_x^i & 0 & 0 \\ 0 & a_y^i & 0 \\ 0 & 0 & a_z^i \end{pmatrix} \quad \text{for } (x, y, z) \in \Omega_i \quad \text{avec}$$

i	1	2	3	4
a_x^i	1	1	1	1
a_y^i	10	0.1	0.01	100
a_z^i	0.01	100	10	0.1
α_i	0.1	10	100	0.01

$$u_5(x, y, z) = \alpha_i \sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z)$$

Le tenseur Λ_5 est donc discontinu aux interfaces d'hétérogénéités. La solution u_5 est quant à elle construite pour être continue et assurer la conservation du flux à travers ces dites interfaces. A noter qu'une nouvelle fois, la condition aux limites est de type Dirichlet non-homogène.

Famille de maillages : **Locally refined**

i	nu	nmat	umin	uemin	umax	uemax	normg
1	60	1148	-7.39E+02	-1.00E+02	7.39E+02	1.00E+02	1.24E+01
2	305	6825	-7.82E+01	-3.54E+01	7.82E+01	3.54E+01	5.20E+01
3	1881	46025	-9.90E+01	-7.89E+01	9.90E+01	7.89E+01	8.60E+01
4	13073	335601	-9.99E+01	-9.43E+01	9.99E+01	9.43E+01	9.56E+01
5	97185	2557793	-1.00E+02	-9.86E+01	1.00E+02	9.86E+01	9.80E+01

i	nu	erl2	ratio12	ergrad	ratiograd	ener	ratioener
1	60	6.39E+00	-	1.60E+00	-	8.27E+00	-
2	305	1.19E+00	3.10E+00	5.97E-01	1.82E+00	6.01E-01	4.84E+00
3	1881	2.55E-01	2.55E+00	1.86E-01	1.92E+00	1.80E-01	1.99E+00
4	13073	6.10E-02	2.21E+00	5.96E-02	1.76E+00	4.78E-02	2.05E+00
5	97185	1.52E-02	2.08E+00	2.24E-02	1.46E+00	1.26E-02	2.00E+00

Commentaires sur les résultats

Les résultats obtenus à l'aide (2.27) (VAG) au lieu de (2.28) (VAGR) sont systématiquement moins précis, sauf pour le test 5, où nous avons obtenu les résultats suivants :

i	nu	nmat	umin	uemin	umax	uemax	normg
1	60	1148	-7.65E+02	-1.00E+02	7.65E+02	1.00E+02	6.76E+01
2	305	6825	-7.73E+01	-3.54E+01	7.73E+01	3.54E+01	4.65E+01
3	1881	46025	-9.02E+01	-7.89E+01	9.02E+01	7.89E+01	8.19E+01
4	13073	335601	-9.72E+01	-9.43E+01	9.72E+01	9.43E+01	9.43E+01
5	97185	2557793	-9.93E+01	-9.86E+01	9.93E+01	9.86E+01	9.77E+01

i	nu	erl2	ratio12	ergrad	ratiograd	ener	ratioener
1	60	6.71E+00	-	7.32E+00	-	2.90E+01	-
2	305	9.53E-01	3.60E+00	6.91E-01	4.36E+00	6.76E-01	6.93E+00
3	1881	1.49E-01	3.05E+00	2.24E-01	1.85E+00	2.20E-01	1.85E+00
4	13073	3.27E-02	2.35E+00	6.17E-02	2.00E+00	5.95E-02	2.03E+00
5	97185	7.98E-03	2.11E+00	1.73E-02	1.90E+00	1.54E-02	2.02E+00

Les résultats obtenus avec (2.30) sont très similaires à ceux affichés par (2.28) (VAGR). A la fois pour (2.27) (VAG) et (2.28) (VAGR), nous avons choisi le gradient conjugué de la bibliothèque ISTL comme solveur avec ILU(0) comme préconditionnement avec une tolérance fixé à 10^{-10} . Les constatations suivantes ont été observées en termes de temps calcul, en utilisant (2.27) (VAG) (on peut conjecturer des observations similaires pour VAGR).

1. Sur le quatrième maillage type Kershaw et le test 1, on obtient, en utilisant le solveur gradient conjugué de la bibliothèque PETSc, les temps CPU suivants : avec ILU(2), 33s, avec ILU(1), 17s, avec ILU(0), 10s, et avec Jacobi, 11s, ce qui montre que le préconditionnement ILU(0) semble être le plus rapide dans cette configuration. Notez que ce temps calcul est fonction de l'ordonnancement des inconnues. Pour ces tests bench, nous avons utilisé un algorithme récursif de décomposition de domaine, qui est le plus efficace avec des solveurs directs, et les temps de calcul respectifs avec PETSc CG+ILU(0) et ISTL CG+ILU(0) sont de 10.3 et 11.2 secondes. En utilisant l'algorithme de Cuthill-McKee inverse, nous obtenons respectivement 4.4 et 15.3 secondes avec PETSc CG+ILU(0) et ISTL CG+ILU(0).
2. Les temps calcul, pour le solveur type gradient conjugué de la bibliothèque PETSc associé au préconditionneur ILU(1), pour le test de 1 sur les maillages tétraédriques 2 à 5, ont été à peu près égaux à 0.01, 0.03, 0.04, 0.08 et 0.16 secondes, illustrant ainsi la possibilité d'appliquer cette méthode sur des maillages beaucoup plus gros.

2.5.4 Hétérogénéité et Anisotropie

On présente ici une partie des résultats obtenus lors d'un travail collaboratif réalisé au CIPR (*Centre for Integrated Petroleum Research*, Université de Bergen, Norvège) avec Haakon Haegland. L'objectif de la collaboration était de comparer les schémas MPFA O et L à la méthode VAG. L'étude présentée ci-après se base sur un cas test hétérogène anisotrope extrait de la littérature [5] et mis en œuvre sur différents types de grilles.

On considère donc un problème équivalent au problème modèle introduit en préambule du chapitre, sous-section 2.1.1, que nous rappelons succinctement. Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, de frontière $\partial\Omega = \bar{\Omega} \setminus \Omega$, on considère le problème de diffusion suivant,

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\Lambda \nabla \bar{u}) = f \text{ sur } \Omega, \\ \bar{u} = u_{\text{d}} \text{ sur } \partial\Omega, \end{cases}$$

où \bar{u} est l'inconnue et u_{d} une condition limite de type Dirichlet.

Pour le test qui nous intéresse ici on considère $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$, avec $\Omega_1 = [0, 1] \times [0, 0.5] \times [0, 1]$ et $\Omega_2 = [0, 1] \times [0.5, 1] \times [0, 1]$. On spécifie alors deux tenseurs de perméabilité Λ_1 et Λ_2 définis respectivement sur les sous-domaines Ω_1 et Ω_2 par,

$$\Lambda_1 = \begin{bmatrix} r+1 & r & r \\ r & r+1 & r \\ r & r & r+1 \end{bmatrix}, \quad \Lambda_2 = \begin{bmatrix} r+1 & -r & r \\ -r & r+1 & -r \\ r & -r & r+1 \end{bmatrix},$$

pour un paramètre $r \in \mathbb{R}^+$. La solution analytique est donnée par,

$$u(x, y, z) = y(2y^2 - 3(r+1)(x-z)^2),$$

On applique alors comme condition aux limites $u_{\text{d}} = u$ sur $\partial\Omega$. On peut alors vérifier que le terme source du problème est nul, $f = 0$, et que le ratio d'anisotropie est donné par $3r + 1$. Les différentes valeurs de r considérées dans les tests numériques qui suivent sont résumées dans le tableau suivant :

Paramètre r	0	3	33	333	3333
Ratio d'anisotropie	1	10	100	1000	10000

Les simulations numériques ont été réalisées sur différents types de grilles. On considère tout d'abord une discrétisation cartésienne uniforme du domaine $\Omega = [0, 1]^3$. Puis des grilles pyramidales, tétraédriques et prismatiques sont construites à partir des ces premières grilles hexaédriques. En effet, pour une grille pyramidale chaque hexaèdre est découpé en 6 pyramides. Pour une grille tétraédrique chaque hexaèdre est découpé en tétraèdres. Et enfin, une grille prismatique est obtenue en découpant chaque hexaèdre en 2 prismes.

Différents schémas numériques ont donc été comparés. D'un côté la schéma VAGR présenté dans la sous-section 2.4.2, et de l'autre les schémas MPFA O et L que l'on a brièvement décrit dans la section 2.2. Notons cependant que dans le cas présent différentes versions du O-schéma sont considérées. En effet, rappelons que pour une maille $K \in \mathcal{M}$, un sommet $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K$ et une face $\sigma \in \mathcal{F}_K$, la méthode en O considère un point, noté $\mathbf{x}_\sigma^{\mathbf{s}}$, dit point de continuité. C'est dans la définition de ce point de continuité que les variantes du O-schéma se différencient. On considère la formule suivante,

$$\mathbf{x}_\sigma^{\mathbf{s}} = (1 - \eta)\mathbf{b}_\sigma^{\mathbf{s}} + \eta\mathbf{s}, \quad 0 \leq \eta \leq 1, \quad (2.33)$$

où $\mathbf{b}_\sigma^{\mathbf{s}}$ est l'isobarycentre de la face σ . On note alors $O(\eta)$ le O-schéma associé à la définition (2.33). La méthode "classique" est alors $O(0)$ pour laquelle il n'y aura qu'un seul de point de continuité sur chaque face, puisque tous les points de continuité se confondent avec l'isobarycentre de la face. Mais pour la méthode $O(1/4)$, on aura autant de points de continuité que de sommets; cette méthode permet d'obtenir une version symétrique du O-schéma sur un maillage tétraédrique. Notons enfin que le schéma en L testé ici utilise le O-schéma sur les bords du domaine, de ce faite on distinguera les schémas $L(0)$ et $L(1/4)$ qu'on associe donc au $O(\eta)$ correspondant.

On étudie alors, pour chaque type de grille, la convergence de l'erreur L^2 relative en fonction du degré de liberté des schémas, c'est-à-dire le nombre de mailles pour les schémas O et L, et le nombre de nœuds pour la méthode VAG.

Maillages hexaédriques. On considère 5 grilles hexaédriques. Le nombre de mailles est donné dans le tableau ci-dessous,

grille	1	2	3	4	5
# mailles	8	64	512	4096	32768

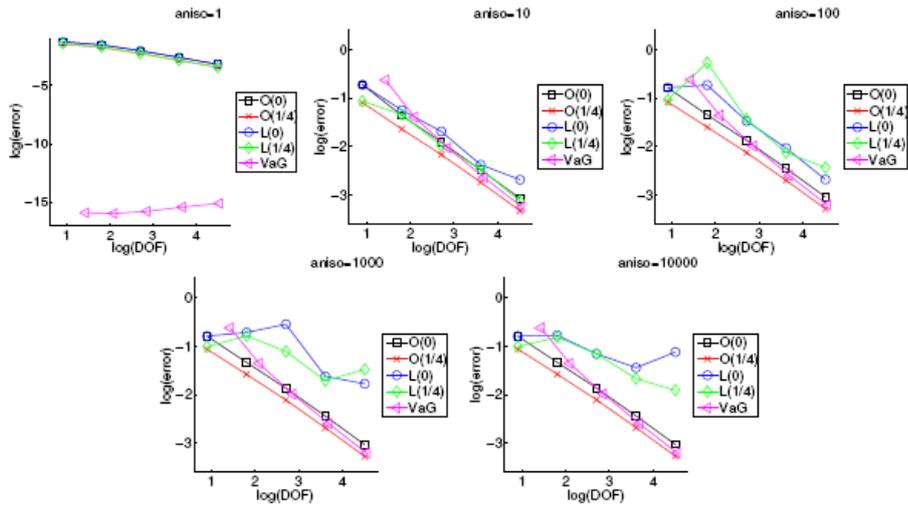


FIGURE 2.15 – Erreur L^2 - Grilles hexaédriques.

Maillages tétraédriques. On considère 4 grilles tétraédriques. Le nombre de mailles est donné dans le tableau ci-dessous,

grille	1	2	3	4
# mailles	48	384	3072	24576

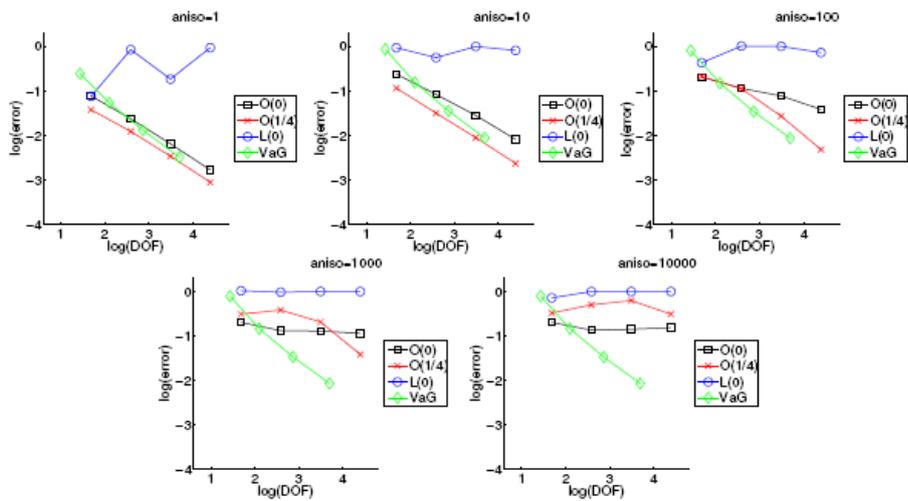


FIGURE 2.16 – Erreur L^2 - Grilles tétraédriques.

Maillages pyramidales. On considère 4 grilles pyramidales. Le nombre de mailles est donné dans le tableau ci-dessous,

grille	1	2	3	4
# mailles	48	384	3072	24576

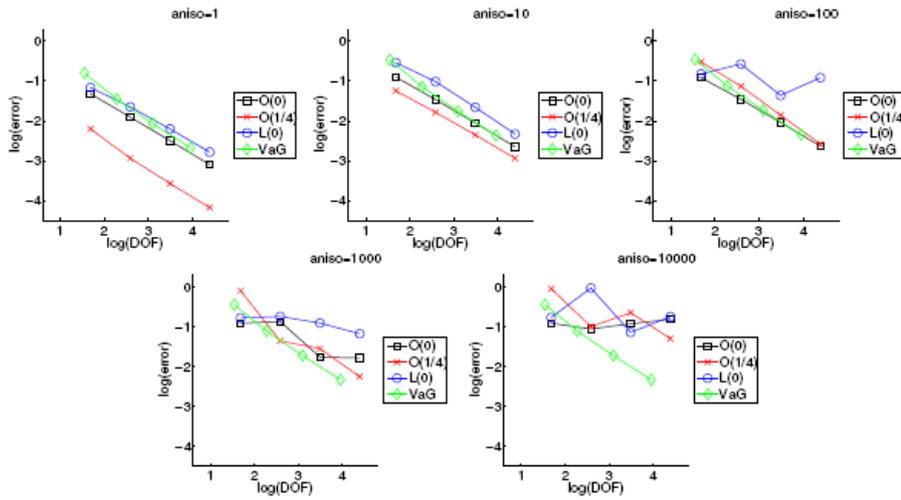


FIGURE 2.17 – Erreur L^2 - Grilles pyramidales.

Maillages prismatiques. On considère 4 grilles prismatiques. Le nombre de mailles est donné dans le tableau ci-dessous,

grille	1	2	3	4
# mailles	16	128	1024	8192

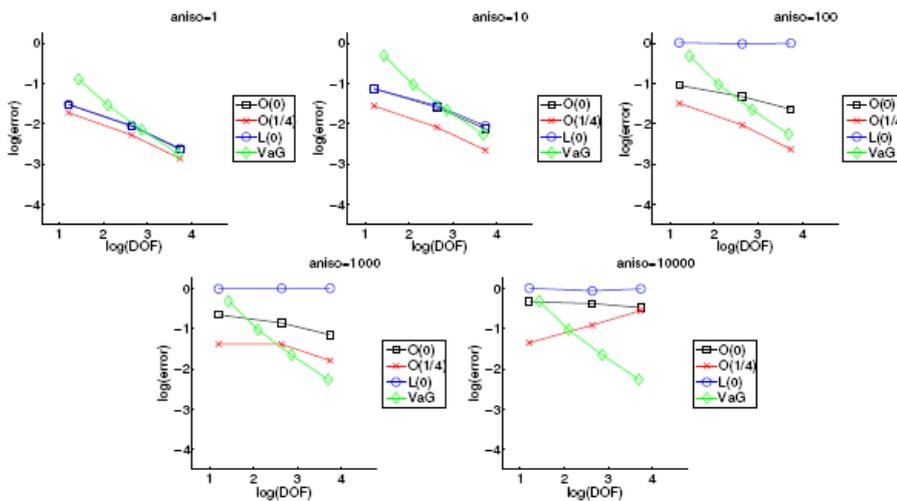


FIGURE 2.18 – Erreur L^2 - Grilles prismatiques.

Commentaires.

Pour les résultats obtenus sur grilles hexaédriques, représentés sur la Figure 2.15, on remarque dans le cas isotrope, en haut à gauche, que le schéma VAG est exacte. Puis lorsque le ratio d'anisotropie augmente, on peut noter que le schéma en L présente des difficultés de convergence alors que les méthodes VAG et O conservent leurs vitesses de convergence. Notons que le O schéma est le plus précis sur ce cas, ce très bon résultat, déjà observé dans [5], reste encore mal compris à ce jour. Les bonnes propriétés du schéma VAG peuvent s'expliquer par sa symétrie.

Pour les tests sur grilles tétraédriques, représentés sur la Figure 2.16, les résultats du schéma L(1/4) sont absents car la méthode échoue suite à des singularités dans la construction des gradients locaux. D'ailleurs, les résultats présentés par la méthode L(0) sont très mauvais, illustrant ainsi les problèmes du schéma en L sur ce type de maillage. Enfin le O-schéma présente de bons résultats tant que la ratio d'anisotropie reste inférieure à 100, ratio pour lequel la méthode O(1/4) est meilleure que O(0), ceci est certainement du à la propriété de symétrie du schéma O(1/4) sur tétraèdres. De son côté, le schéma VAG est très robuste, puisque sa convergence semble insensible à l'anisotropie ; de plus, étant un schéma centré aux nœuds, VAG présente des degrés de libertés (DOF) inférieures aux méthodes O et L et semble donc moins coûteux.

Des observations similaires peuvent être faites sur les grilles pyramidales, Figure 2.17, et prismatiques Figure 2.18. En effet, la méthode L(1/4) est encore en échec, et le schéma L(0) perd sa convergence avec l'augmentation du ratio d'anisotropie. Les méthodes O(0) et O(1/4) convergent jusqu'à un ratio d'anisotropie de 100. Une nouvelle fois la méthode VAG est la plus précise et efficace ; sa symétrie inconditionnelle semble lui offrir une insensibilité au ratio d'anisotropie et son aspect schéma centré aux nœuds lui procure un nombre d'inconnues inférieur à celui des schémas centrés aux mailles.

2.6 Conclusion

L'introduction 2.1 a présenté un cahier des charges illustrant le souhait de trouver une méthode numérique réunissant les qualificatifs suivants : **convergence**, **stabilité**, **robustesse**, **performance** et enfin **linéarité**. Ce chapitre a brièvement rappelé les schémas volumes finis existants et introduit les nouvelles méthodes HAG et VAG, VAGR. En croisant ce cahier des charges avec les différentes études numériques réalisées, de premières observations peuvent être établies.

La famille des schémas MPFA centrés aux mailles, regroupant notamment les schémas O, L, G, vérifie bien des critères mentionnés mais malheureusement ces méthodes ne sont pas symétriques et donc conditionnellement coercives et de ce fait peuvent rencontrer des difficultés de convergence. Les différents tests numériques ont ainsi mis en évidence le manque de robustesse du O-schéma face à des problèmes présentant de forts ratios d'anisotropie de perméabilité et/ou d'aspect. Le L-schéma est quant à lui en échec sur des maillages tétraédriques par singularité de matrices locales nécessaires à la reconstruction des gradients discrets. Le G-schéma, qui reprend les idées du L, arrive à contourner ce problème mais pas ceux mentionnés pour le O-schéma.

De nouveaux schémas ont été présentés : VAG, VAGR et HAG.

Le schéma HAG est un schéma centré aux mailles, compact et symétrique. Cependant face à des problèmes à fort ratio d'anisotropie et/ou d'aspect, ce schéma introduit des inconnues additionnelles hybrides pouvant accroître le coût mémoire. De plus sa mise en œuvre complexe peut être un frein à tout développement industriel. A noter que l'expression des flux numériques issus de HAG, en vue d'une application aux écoulements polyphasiques, reste à étudier.

Enfin le schéma VAG est également un schéma symétrique, compact disposant d'un cadre théorique rigoureux pour sa preuve de convergence. De plus, cette méthode, et plus particulièrement la version révisée dénotée VAGR, a montré des résultats numériques prometteurs. VAGR apparaît donc comme un schéma applicable avec succès à une vaste gamme de cas tests pour un bon compromis précision/coût. Associé à une mise en œuvre très lisible, ces caractéristiques font du schéma VAGR un candidat potentiel pour des applications industrielles. Cependant cette méthode n'est pas une méthode volume fini. De ce fait la question de la définition de flux numériques, qu'on souhaite linéaires, et de leurs applications au contexte polyphasique se soulève. Ce point crucial pour les applications pétrolières a donc été étudié et une solution est proposée et testée dans le chapitre suivant, section 3.4.

Chapitre 3

Simulation des écoulements compositionnels polyphasiques en milieux poreux

Sommaire

3.1	Motivation et Contexte	60
3.2	Formulation du modèle d'écoulement	60
3.2.1	Discussion	60
3.2.2	Formulation de type Coats	61
3.3	Discrétisation du modèle	66
3.3.1	Jeu d'inconnues et équations discrètes	66
3.3.2	Algorithme de résolution du système	72
3.4	Application au schéma VAG	77
3.4.1	Présentation de la méthode	77
3.4.2	Bilan	82
3.5	Résultats numériques	83
3.5.1	Propagation de front de type traceur	83
3.5.2	Injection de CO ₂ immiscible dans un réservoir hétérogène	85
3.5.3	Injection de CO ₂ miscible sur grille proche puits	88
3.5.4	Assèchement et précipitation de sel par injection de CO ₂	91
3.6	Conclusion	95
3.7	Annexe – Flash thermodynamique	96
3.7.1	Flash diphasique	97
3.7.2	Flash triphasique	99

3.1 Motivation et Contexte

Beaucoup d'applications issues de l'industrie pétrolière utilisent la simulation d'écoulements compositionnels polyphasiques en milieu poreux hétérogène anisotrope. A titre d'exemple on peut citer la simulation de réservoir, outil d'aide à la mise en place d'un schéma d'exploitation pétrolière, la modélisation de bassin, utile pour estimer l'huile piégée dans les couches sédimentaires, ou encore, plus récemment, la simulation de l'injection et du stockage du CO_2 .

De part leur nature, ces écoulements s'appliquent à des domaines à la géométrie sophistiquée. Par conséquent leur simulation numérique s'opère sur des grilles de discrétisation complexes tel que les maillages avec érosions, failles, ou localement raffinés autour des puits.

Dès lors, une méthode numérique de simulation compositionnelle polyphasique vise à déterminer en tout point du maillage et à tout instant des grandeurs caractéristiques de l'écoulement. La modélisation doit, par exemple, permettre de décrire la variation spatiale et temporelle des pressions et saturations des phases présentes, ainsi que la disparition et l'apparition de celles-ci. La formulation du modèle est ainsi régie par un système d'équations non linéaires aux dérivées partielles faisant intervenir des lois de conservation et des relations thermodynamiques.

L'un des points clefs de ce genre de modèle est la complexité de sa discrétisation et les temps de simulation qui en découlent. La précision, la stabilité et le coût de telles simulations dépendent de façon essentielle du choix d'approximation des flux de diffusion darcéen du système d'équations, typiquement donné par $\text{div}(\Lambda \nabla P_\alpha)$ où Λ est le tenseur de perméabilité et P_α la pression de la phase α , et discuté au chapitre 2 antérieur.

Les sections suivantes décrivent ainsi la formulation et la méthode de discrétisation des écoulements compositionnels polyphasiques retenue dans la cadre de cette thèse ; méthodologie qui s'applique à l'ensemble des schémas présentés au chapitre 2 précédent et mise en œuvre sur différents tests numériques dont la description clôt ce chapitre.

Le modèle présenté ci-après est considéré à température constante ; dans le cas contraire, la température est une inconnue supplémentaire, il faut alors ajouter l'équation de conservation de l'énergie pour clore le système d'équations.

3.2 Formulation du modèle d'écoulement

Le terme **formulation** d'un modèle d'écoulement désigne le fait de définir le jeu d'inconnues et le système d'équations de ce modèle.

3.2.1 Discussion

Plusieurs formulations sont proposées dans la littérature. On distinguera les formulations qui couplent ou découplent le système des équations de conservation aux équations de fermetures locales comprenant la conservation du volume poreux et l'équilibre thermodynamique.

En ce qui concerne les formulations couplées, l'état de l'art réalisé par Hui Cao dans sa thèse [20] pour un écoulement triphasique constitue une très bonne référence. On distingue ainsi deux types de formulation, celle de Coats et celle dite en masse. Ces formulations diffèrent dans le choix des inconnues. La plus populaire est la formulation de type Coats [22, 23] et détaillée dans la sous-section suivante 3.2.2. Les inconnues sont la pression, les compositions et les saturations des phases présentes. L'autre type de formulation couplée considère comme jeux d'inconnues la pression et des quantités globales tel que le nombre total de moles. Dans la formulation de type Coats, les inconnues sont les variables naturelles ce qui rend explicite, et donc plus simple, le calcul de la Jacobienne là où d'autres type de formulation viennent augmenter la non-linéarité du problème par des calculs de dérivées composées. Cependant, le jeu d'inconnues d'une formulation de type Coats, dépend des phases présentes et peut donc être différent en chaque point du domaine en espace. Ce constat est important et constitue le principal inconvénient d'une telle formulation.

Ces formulations couplées ont l'avantage de bien capter l'apparition et la disparition des phases mais le terme de transport étant discrétisé à l'ordre un, ces méthodes sont très diffusives sur des fronts de traceur.

Il existe des méthodes découplées [44] qui résolvent typiquement une équation en pression qui donne le champ de vitesse totale, puis des équations en saturation, composition étant donné ce champ de vitesse. L'inconvénient est qu'il faut faire des itérations de point fixe pour assurer la conservation du volume dans le cas compressible. On peut également citer dans cette catégorie les méthodes des streamlines [17] ou plus récemment les méthodes multi-échelles [45].

3.2.2 Formulation de type Coats

Dans le cadre de cette thèse c'est donc la formulation générique des écoulements polyphasiques compositionnels de type Coats [22, 23, 11] qui a été sélectionnée.

Notations pour les ensembles phases/composants

On considère un système à N_C composants et N_Φ phases, où l'on dénote par Φ l'ensemble des phases et \mathcal{C} l'ensemble des composants. Par souci de généralité, on considère le cas où les composants peuvent ne pas être présents dans toutes les phases. Ainsi, pour chaque composant $i \in \mathcal{C}$, on définit donc l'ensemble Φ_i supposé non vide, de cardinalité N_{Φ_i} , des phases le contenant. Et on note \mathcal{C}_α , défini par,

$$\mathcal{C}_\alpha = \{i \in \mathcal{C} \mid \alpha \in \Phi_i\},$$

l'ensemble supposé non vide, de cardinalité $N_{\mathcal{C}_\alpha}$, des composants de la phase $\alpha \in \Phi$.

Une description schématique du système peut s'écrire à l'aide de la matrice binaire composant-phase,

$$\mathbf{M} = [m_{\alpha,i}]_{\alpha \in \Phi, i \in \mathcal{C}} \in \{0, 1\}^{N_\Phi \times N_C},$$

et définie comme suit,

$$m_{\alpha,i} = \begin{cases} 1 & \text{si le composant } i \text{ est dans la phase } \alpha \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Les ensembles Φ_i et \mathcal{C}_α définis précédemment peuvent alors se réécrire de manière équivalente à l'aide de la matrice \mathbf{M} par,

$$\mathcal{C}_\alpha = \{i \in \mathcal{C} \mid m_{\alpha,i} = 1\} \neq \emptyset,$$

et

$$\Phi_i = \{\alpha \in \mathcal{P} \mid m_{\alpha,i} = 1\} \neq \emptyset.$$

Notations qui sont résumées ci-après,

$$\mathbf{M} = \begin{matrix} & (i \in \mathcal{C}) & & & \\ (\alpha \in \Phi) & \left(\begin{array}{cc|c|cc} 1 & \dots & 0 & \dots & 1 \\ \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots \\ \hline 0 & \dots & 1 & \dots & 1 \\ \hline \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots \\ 1 & \dots & 1 & \dots & 0 \end{array} \right) & \rightarrow \mathcal{C}_\alpha & \\ & \downarrow & & & \\ & \Phi_i & & & \end{matrix} \quad (3.1)$$

Comme souligné dans la sous-section précédente 3.2.1, le jeu d'inconnues est dépendant des phases présentes. Cette observation nous amène à considérer la notion de contexte. Le contexte, noté I , est un vecteur à N_α composantes, donné par,

$$I \in \{0, 1\}^{N_\Phi} \setminus \{(0, \dots, 0)\},$$

où la α -ième composante, notée $I[\alpha]$, de I vaut donc 1 si la phase $\alpha \in \Phi$ est présente, 0 sinon. Par commodité, on associe de façon bijective au contexte I le numéro N_I défini par,

$$I \mapsto N_I = \sum_{\alpha=1}^{N_\Phi} I[\alpha] 2^{\alpha-1},$$

et donc à valeur dans $\llbracket 1, 2^{N_\Phi} - 1 \rrbracket$.

L'ensemble des phases présentes, noté Φ_I et de cardinalité N_{Φ_I} , est donc défini par,

$$\Phi_I = \{\alpha \in \Phi \mid I[\alpha] = 1\}.$$

De ce fait, pour chaque contexte I , on note $\Phi_I^i = \Phi_I \cap \Phi_i$ l'ensemble des phases présentes où le composant i est présent, de cardinalité $N_{\Phi_I^i}$.

Jeu d'inconnues et équations du système

A contexte donné I , les inconnues du système sont donc, la pression, les saturations et compositions des phases présentes $\alpha \in \Phi_I$. Pour les déterminer, le système d'équations prend en compte,

- ↪ la conservation de la masse de chaque composant,
- ↪ la conservation du volume poreux,
- ↪ l'équilibre thermodynamique des phases.

Pour décrire ces équations, il est nécessaire d'introduire les grandeurs suivantes dont les unités sont données dans le système international,

- C_α^i la fraction molaire du composant $i \in \mathcal{C}_\alpha$ dans la phase $\alpha \in \Phi_I$,
- S_α la fraction volumique de la phase $\alpha \in \Phi_I$. S est le vecteur des N_Φ saturations avec $S_\alpha = 0$ si $\alpha \notin \Phi_I$,
- P la pression de référence pour la thermodynamique, en [Pa],
- $P_\alpha = P + P_{c,\alpha}(S, \mathbf{x})$, $\alpha \in \Phi$ les pressions des phases où $P_{c,\alpha}(S, \mathbf{x})$ sont les pressions capillaires par rapport à la pression de référence qui dépendent de la saturation et de l'espace géométrique, en [Pa],
- $\zeta_\alpha(P, C_\alpha)$ et $\rho_\alpha(P, C_\alpha)$ les densités molaires et massiques de la phase $\alpha \in \Phi_I$, respectivement en [mol/m³] et en [kg/m³],
- $\mu_\alpha(P, C_\alpha)$ la viscosité de la phase $\alpha \in \Phi_I$, en [Pa.s],
- $f_\alpha^i(P, C_\alpha)$ la fugacité du composant $i \in \mathcal{C}_\alpha$ dans la phase $\alpha \in \Phi_I$,
- ϕ la porosité du milieu,
- Λ le tenseur de perméabilité du milieu, en [m²],
- $k_{r_\alpha}(S)$ est la perméabilité relative de la phase α ,
- \mathbf{g} le champ de pesanteur, en [m/s²],
- $\tilde{\mathcal{C}}_I = \{j \in \mathcal{C} | \Phi_I^j = \emptyset\}$ est, pour le contexte I donné, l'ensemble des composants présents uniquement dans des phases absentes, de cardinalité $N_{\tilde{\mathcal{C}}_I}$.

Remarque : dans le cas général les densités, la viscosité et la fugacité d'une phase α donnée dépendent de la pression de phase P_α ; cependant on supposera ici que ces grandeurs s'expriment en fonction de la pression de référence P .

* *Conservation de la masse des composants*

On note m_i le nombre de moles du composant $i \in \mathcal{C}$ par unité de volume. Il est considéré comme une variable indépendante pour un composant $i \in \tilde{\mathcal{C}}_I$ et sinon il est égal à,

$$m_i = \phi \sum_{\alpha \in \Phi_I^i} \zeta_\alpha S_\alpha C_\alpha^i.$$

L'équation de conservation s'écrit alors,

$$\partial_t m_i + \operatorname{div} \left(\sum_{\alpha \in \Phi_I^i} \frac{\zeta_\alpha k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} C_\alpha^i \mathbf{V}_\alpha \right) = 0, \quad i \in \mathcal{C}, \quad (3.2)$$

où \mathbf{V}_α est donné par la *loi de Darcy*,

$$\mathbf{V}_\alpha = -\Lambda (\nabla P_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}), \quad \alpha \in \Phi_I. \quad (3.3)$$

Le rapport $M_\alpha = \frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}$ est appelé mobilité de la phase α .

* *Conservation du volume poreux*

La conservation de volume poreux se traduit par la somme des saturations égale à un, ce qui signifie que tout le volume poreux est saturé par les phases en présence,

$$\sum_{\alpha \in \Phi_I} S_\alpha = 1. \quad (3.4)$$

* *Equilibre thermodynamique des phases*

En chaque point du domaine, les lois d'état thermodynamique gouvernent les transferts de masse entre les phases,

$$\left\{ \begin{array}{l} f_\alpha^i = f_\beta^i, \quad i \in \mathcal{C} \text{ et } \alpha, \beta \in \Phi_I^i, \\ \sum_{i \in \mathcal{C}_\alpha} C_\alpha^i = 1, \quad \alpha \in \Phi_I. \end{array} \right. \quad (3.5)$$

Au cours d'une simulation, du fait de cet équilibre thermodynamique, les phases peuvent apparaître ou disparaître. Ainsi, l'ensemble Φ_I est, en chaque point du domaine et à chaque itération en temps, une inconnue qui est déterminée par un calcul de flash thermodynamique. Ce flash est un calcul algébrique qui admet en entrée pression P et compositions totales du mélange Z ,

$$\Phi_I = \text{Flash}(P, Z) \quad (3.6)$$

Cette opération est discutée par la suite, dans la section annexe 3.7 en fin de chapitre.

Bilan

La formulation de type Coats présente donc l'avantage de s'exprimer en fonction des variables naturelles des lois d'état et des lois hydrodynamiques. Pour rappel, son inconvénient est de devoir gérer un jeu d'inconnues dépendant du contexte.

Les inconnues sont les suivantes,

- ensemble des phases présentes Φ_I ,
- pression P ,
- saturations des phases présentes S_α , $\alpha \in \Phi_I$,
- fractions molaires des composants dans les phases présentes C_α^i , $\alpha \in \Phi_I, i \in \mathcal{C}_\alpha$,
- nombre de moles par unité de volume des composants présents que dans les phases absentes m_i , $i \in \tilde{\mathcal{C}}_I$.

Ces inconnues sont donc au nombre de $2 + N_{\Phi_I} + \sum_{\alpha \in \Phi_I} N_{\mathcal{C}_\alpha} + N_{\tilde{\mathcal{C}}_I}$.

En regroupant les équations (3.2)-(3.4),(3.5) et (3.6) le système global s'écrit,

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t m_i + \operatorname{div} \left(\sum_{\alpha \in \Phi_I^i} \frac{\zeta_\alpha k_{r_\alpha}}{\mu_\alpha} C_\alpha^i \mathbf{V}_\alpha \right) = 0, \quad i \in \mathcal{C} \\ \sum_{\alpha \in \Phi_I} S_\alpha = 1, \\ \text{Flash}(P, Z) = \Phi_I, \\ \sum_{i \in \mathcal{C}_\alpha} C_\alpha^i = 1, \quad \alpha \in \Phi_I, \\ f_\alpha^i = f_\beta^i, \quad i \in \mathcal{C} \text{ et } \alpha, \beta \in \Phi_I^i \text{ tel que } \alpha \neq \beta. \end{array} \right. \quad (3.7)$$

où \mathbf{V}_α est donné par la loi de Darcy de la phase $\alpha \in \Phi_I$ défini en (3.3).

Pour s'assurer que le problème est bien posé, il est facile de vérifier que le nombre d'inconnues est égal au nombre d'équations,

- $N_{\mathcal{C}}$ lois de conservation des composants,
- 1 équation de conservation du volume poreux,
- N_{Φ_I} équations bilan sur les concentrations molaires,
- 1 flash thermodynamique,
- $\sum_{i \in \mathcal{C}/\tilde{\mathcal{C}}_I} (N_{\Phi_I^i} - 1) = \sum_{\alpha \in \Phi_I} N_{\mathcal{C}_\alpha} - (N_{\mathcal{C}} - N_{\tilde{\mathcal{C}}_I})$ égalités des fugacités.

3.3 Discrétisation du modèle

Une discrétisation du domaine géométrique de simulation Ω est construite à l'aide de,

- \mathcal{M} un ensemble des volumes de contrôle recouvrant Ω . Et pour tout volume de contrôle X dans \mathcal{M} , on note $|X|$ sa mesure, \mathbf{x}_X son centre et ∂X sa frontière ;
- \mathcal{F} l'ensemble des interfaces des volumes de contrôle. On distingue $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{\text{int}} \cup \mathcal{F}_{\text{ext}}$ avec \mathcal{F}_{int} l'ensemble des interfaces internes et \mathcal{F}_{ext} l'ensemble des interfaces au bord du domaine Ω . Pour tout σ dans \mathcal{F} , on note \mathbf{x}_σ son centre. Pour un volume de contrôle X de \mathcal{M} , on note par \mathcal{F}_X l'ensemble de ses interfaces. Pour $\sigma \in \mathcal{F}_{\text{int}}$, il existe donc deux volumes de contrôle X et Y de \mathcal{M} connectés à σ , on note alors $\sigma = X|Y$ l'interface et $\mathbf{n}_{X|Y}$ la normale unitaire sortante de X , donc orientée vers Y . Pour $\sigma \in \mathcal{F}_{\text{ext}}$, il existe donc un volume de contrôle X et un élément de bord b connectés à σ , on note alors $\sigma = X|b$ l'interface et $\mathbf{n}_{X|b}$ la normale unitaire sortante de X , donc orientée vers l'extérieure.

En outre, si l'on considère une simulation sur une échelle de temps $[0, \mathbf{T}_f]$, on découpe cet intervalle en une suite finie strictement croissante de réels $\{t_n\}_{0 \leq n \leq N}$ tel que $t_0 = 0$ et $t_N = \mathbf{T}_f$. On note le pas de temps par $\Delta t^n = t^n - t^{n-1}$.

3.3.1 Jeu d'inconnues et équations discrètes

On présente ici l'équivalent discret de la sous-section précédente 3.2.2 qui décrit le jeux d'inconnues et les équations du problème continu.

Inconnues

Les inconnues explicitées dans le modèle continu sont discrétisées par une valeur discrète pour chaque volume de contrôle $X \in \mathcal{M}$, valeur qui peut être vue comme une valeur moyenne sur X ou une valeur au point \mathbf{x}_X . Ces inconnues discrètes sont donc à déterminer sur l'ensemble des volumes de contrôle et à chaque itération en temps. Concrètement pour un volume de contrôle $X \in \mathcal{M}$ et un temps discret t^n , pour $0 \leq n \leq N$, on peut alors identifier, de manière analogue au cas continu, l'ensemble des inconnues discrètes comme suit,

- ensemble des phases présentes $\Phi_{I_X^n}$,
- pression P_X^n ,
- saturations des phases présentes $S_{\alpha, X}^n$, $\alpha \in \Phi_{I_X^n}$,
- fractions molaires des composants dans les phases présentes $C_{\alpha, X}^{i, n}$, $\alpha \in \Phi_{I_X^n}$, $i \in \mathcal{C}_\alpha$,
- nombre de moles par unité de volume des composants présents que dans les phases absentes $m_{i, X}^n$, $i \in \tilde{\mathcal{C}}_{I_X^n}$.

Equations

Les équations régissant le problème continu sont réécrites dans le contexte discret.

* Conservation de la masse des composants

Pour discrétiser une équation de conservation, on intègre cette équation continue sur un volume de contrôle X et sur l'intervalle de temps de t^{n-1} à t^n . On a donc pour un composant $i \in \mathcal{C}/\tilde{\mathcal{C}}_{I_X^n}$,

$$\int_{t^{n-1}}^{t^n} \int_X \left(\partial_t m_i - \operatorname{div} \left[\sum_{\alpha \in \Phi_{I_X^n}^i} \frac{\zeta_\alpha k_{r_\alpha}}{\mu_\alpha} C_\alpha^i \Lambda (\nabla P_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}) \right] \right) d\mathbf{x} dt = 0. \quad (3.8)$$

Puis à l'aide du théorème de Gauss, on exprime de manière équivalente l'intégrale de la divergence contenue dans (3.8) comme l'expression de flux sur la frontière ∂X ,

$$\Leftrightarrow \int_X (m_i^n - m_i^{n-1}) d\Omega - \sum_{\alpha \in \Phi_{I_X^n}^i} \int_{t^{n-1}}^{t^n} \int_{\partial X} \left[\frac{\zeta_\alpha k_{r_\alpha}}{\mu_\alpha} C_\alpha^i \Lambda (\nabla P_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} \right] ds dt = 0. \quad (3.9)$$

En considérant l'approximation d'une inconnue au temps t^n comme une fonction constante par morceaux sur les volumes de contrôle, on obtient pour tout $X \in \mathcal{M}$,

$$|X| \left(m_{i,X}^n - m_{i,X}^{n-1} \right) - \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_X} \sum_{\alpha \in \Phi_{I_{X_\alpha(\sigma)}}^i} \int_{t^{n-1}}^{t^n} \int_\sigma \left(\frac{\zeta_\alpha k_{r_\alpha}}{\mu_\alpha} C_\alpha^i \Lambda (\nabla P_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} \right) ds dt = 0, \quad (3.10)$$

que l'on peut réécrire de façon succincte mais équivalente par,

$$|X| \frac{(m_{i,X}^n - m_{i,X}^{n-1})}{\Delta t^n} + \sum_{\sigma = X|Y \in \mathcal{F}_X} \sum_{\alpha \in \Phi_{I_{X_\alpha(\sigma)}}^i} U_{\alpha, X_\alpha(\sigma)}^{i,*} F_{\alpha, X|Y}^{n,*} = 0, \quad (3.11)$$

où $*$ est un indice en temps arbitraire pouvant valoir n pour une méthode totalement implicite ou $n-1$ pour une méthode implicite en pression mais explicite en saturation et composition, nommée IMPES. Par souci de lisibilité, seule la méthode totalement implicite est considérée dans la suite.

La notation $X_{\alpha(\sigma)}$ désigne le volume de contrôle en amont de l'interface σ par rapport à la phase α . Cette notion, ainsi que les termes d'accumulation $m_{i,X}^n$, de flux $F_{\alpha, X|Y}^n$ et de transport amont $U_{\alpha, X_\alpha(\sigma)}^{i,n}$ sont détaillés ci-après.

↪ Terme d'accumulation

On appelle **terme d'accumulation**, l'approximation du nombre de moles dans un volume de contrôle X d'un composant i au temps t^n , et il est défini, pour $i \in \mathcal{C}/\tilde{\mathcal{C}}_{I_X^n}$, par,

$$m_{i,X}^n = \phi_X^n \sum_{\alpha \in \Phi_{I_X^n} \cap \Phi_i} \zeta_{\alpha,X}^n S_{\alpha,X}^n C_{\alpha,X}^{i,n}, \quad (3.12)$$

où ϕ_X^n est la valeur moyenne de la porosité sur le volume de contrôle X au temps t^n . Rappelons que si le composant i n'est présent que dans des phases absentes, c'est à dire si $i \in \tilde{\mathcal{C}}_{I_X^n}$, du volume de contrôle X , alors la quantité $m_{i,X}^n$ est une variable indépendante.

↪ Flux diffusif de Darcy

On dénote donc par $F_{\alpha,X|Y}^n$ le flux numérique de la phase α entre les deux volumes de contrôle X et Y , approximation de l'intégration de la loi de Darcy sur l'interface $X|Y$,

$$F_{\alpha,X|Y}^n \approx - \int_{\sigma=X|Y} \Lambda [\nabla(P^n + P_{c,\alpha}(S^n, \mathbf{x})) - \rho_{\alpha,\sigma}^n \mathbf{g}] \cdot \mathbf{n}_{X|Y} \, ds, \quad (3.13)$$

où $\rho_{\alpha,\sigma}^n$ est la densité massique de la phase α moyennée à l'interface $\sigma = X|Y$ au temps t^n . Une expression est proposée ci-après dans (3.16)-(3.18).

Un élément clef de la simulation des écoulements compositionnels polyphasiques est donc la discrétisation des flux diffusif darcéen (3.13) par une méthode de volumes finis, famille de schéma préalablement introduite au chapitre 2 précédent, sous-section 2.1.2. Comme discuté à la section 2.3, plusieurs méthodologies sont bien sûr possibles. On peut par exemple citer les schémas volumes finis hybrides tel que le schéma SUSHI employé pour des écoulements diphasiques dans les travaux de thèse de O. Angelini [16]; mais ces schémas ne seront pas retenus ici pour nos applications réservoir à cause du surcoût introduit par les inconnues aux faces. En effet, ce travail est axé sur les schémas multi-points volumes finis linéaires, pour ne pas augmenter la non-linéarité du système global, et centrés aux mailles, pour ne considérer qu'un nombre limité d'inconnues; de tels schémas ont été présentés dans la section 2.2. Mais on discutera, dans le chapitre suivant comment réutiliser, sans modifications, le cadre de ce travail pour des simulations polyphasiques à l'aide d'un schéma gradient tel que le schéma VAG, sous-section 2.4.2, qui est lui centré aux nœuds.

Dans le contexte d'un schéma multi-points volumes finis linéaires centrés aux mailles, les volumes de contrôle sont donc tout naturellement les mailles et les flux numériques, donc calculés aux faces de celles-ci, peuvent s'écrire linéairement en fonction des inconnues discrètes aux mailles. On rappelle que dans l'esprit des volumes finis, les flux de phases sont conservatifs à l'interface, c'est à dire,

$$F_{\alpha,X|Y}^n + F_{\alpha,Y|X}^n = 0. \quad (3.14)$$

On distingue dans la suite, les flux aux faces internes (i) et aux faces de bord (ii) du domaine.

(i) *Flux de phase sur les faces internes.*

On considère donc une face interne $\sigma \in \mathcal{F}_{\text{int}}$, tel que $\sigma = X|Y$ où X et Y sont les deux mailles adjacentes à cette face. Alors l'approximation multi-points du flux de Darcy (3.13) est donnée par,

$$F_{\alpha, X|Y}^n = \sum_{e \in \mathcal{N}_{X|Y}} \mathcal{T}_{X|Y}^e \left[P_e^n + P_{c, \alpha}(S_e^n, \mathbf{x}_e) - \rho_{\alpha, X|Y}^n \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}_e \right], \quad (3.15)$$

où $(\mathcal{T}_{X|Y}^e)_{e \in \mathcal{N}_{X|Y}}$ est une famille de réels, appelés coefficients de transmissivité, vérifiant $\sum_{e \in \mathcal{N}_{X|Y}} \mathcal{T}_{X|Y}^e = 0$ et où $\mathcal{N}_{X|Y}$ est le stencil du schéma à la face $\sigma = X|Y$. Ce stencil comprend des mailles mais peut également inclure des faces de bord. Ainsi dans la somme sur e écrite en (3.15), l'élément e peut tout aussi bien référer à une maille qu'à une face de bord. On peut noter que pour le schéma TPFA donne $\mathcal{N}_{X|Y} = \{X, Y\}$.

La densité moyennée $\rho_{\alpha, X|Y}^n$ à l'interface est définie par,

$$\rho_{\alpha, X|Y}^n = \frac{\rho_{\alpha}(P_X^n, C_{\alpha, X}^n) S_{\alpha, X}^n + \rho_{\alpha}(P_Y^n, C_{\alpha, Y}^n) S_{\alpha, Y}^n}{S_{\alpha, X}^n + S_{\alpha, Y}^n}. \quad (3.16)$$

Les densités des mailles X et Y sont pondérées par les saturations pour assurer la continuité de celle-ci à l'interface $X|Y$ lors du changement de phase. Notons cependant que $\rho_{\alpha, X|Y}^n$ n'est pas continue à $S_{\alpha, X}^n = S_{\alpha, Y}^n = 0$, mais son produit avec la perméabilité relative $k_{r\alpha}(S_{X_{\alpha}(\sigma)}^n)$ présente dans le terme de transport amont défini ci-après, l'est puisque $k_{r\alpha}(0) = 0$.

Notons finalement que ces flux (3.15) ne sont calculés que pour $\alpha \in \Phi_{I_X^n} \cup \Phi_{I_Y^n}$ car dans le cas contraire le terme de transport devant le flux, noté $U_{\alpha, X_{\alpha}(X|Y)}^{i, n}$, est nul.

(i) *Flux de phase sur les faces de bord.*

On considère donc ici une face de bord $\sigma \in \mathcal{F}_{\text{ext}}$, tel que $\sigma = X|b$ où b est une face de bord connectée à la maille X . Alors l'approximation multi-points du flux de bord de Darcy (3.13) est donnée, de façon analogue au flux aux faces internes, par

$$F_{\alpha, X|b}^n = \sum_{e \in \mathcal{N}_{X|b}} \mathcal{T}_{X|b}^e \left[P_e^n + P_{c, \alpha}(S_e^n, \mathbf{x}_e) - \rho_{\alpha, X|b}^n \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}_e \right], \quad (3.17)$$

où $(\mathcal{T}_{X|b}^e)_{e \in \mathcal{N}_{X|b}}$ est la famille des coefficients de transmissivité vérifiant $\sum_{e \in \mathcal{N}_{X|b}} \mathcal{T}_{X|b}^e = 0$ et où $\mathcal{N}_{X|b}$ est le stencil du schéma à la face de bord $\sigma = X|b$. Une nouvelle fois ce stencil peut inclure à la fois des mailles et des faces de bord. Ainsi dans la somme sur e écrite en (3.17), l'élément e peut tout aussi bien référer à une maille qu'à une face de bord. On peut noter que pour le schéma TPFA donne $\mathcal{N}_{X|b} = \{X, b\}$.

De manière similaire à l'expression considérée pour les faces internes (3.16) et par conséquent vérifiant les mêmes remarques de continuité, la densité moyennée $\rho_{\alpha, X|b}^n$ sur la face de bord est définie par,

$$\rho_{\alpha, X|b}^n = \frac{\rho_{\alpha}(P_X^n, C_{\alpha, X}^n) S_{\alpha, X}^n + \rho_{\alpha}(P_b^n, C_{\alpha, b}^n) S_{\alpha, b}^n}{S_{\alpha, X}^n + S_{\alpha, b}^n}. \quad (3.18)$$

Cette parenthèse ouverte sur les flux de bord est l'occasion de discuter des différentes conditions aux limites appliquées. Dans ce travail, deux types de conditions aux limites ont été traitées,

- Condition de type Dirichlet avec pression imposée sur la face de bord et spécification des fluides entrants. On note $\mathcal{F}_{\text{ext}}^D$ l'ensemble des faces de bord où une telle condition est imposée. Pour $\sigma = X|b^D \in \mathcal{F}_{\text{ext}}^D$, on spécifie, pour tout temps t^n , l'état complet des fluides entrant dans le réservoir, bien sûr la valeur de pression $P_{b^D}^n$ imposée, mais également l'ensemble des phases présentes $\Phi_{I_{b^D}}^n$, les saturations S_{α, b^D}^n et compositions C_{α, b^D}^n pour $\alpha \in \Phi_{I_{b^D}}^n$, permettant ainsi d'expliciter le flux de bord $F_{\alpha, X|b^D}^n$;
- Condition de type Neumann homogène, c'est à dire flux nul sur la face de bord. On note $\mathcal{F}_{\text{ext}}^N$ l'ensemble des faces de bord où une telle condition est imposée. Pour $\sigma = X|b^N \in \mathcal{F}_{\text{ext}}^N$, on a donc $F_{\alpha, X|b^N}^n = 0$ pour toute phase α . Dans ce cas de figure, la pression à la face $P_{b^N}^n$ est donc une inconnue à déterminer à l'aide de la condition de flux nul. D'un point de vue pratique, pour ne pas introduire d'inconnues sur ces faces de bord, nous approximons la pression sur une telle face de bord par $P_{b^N}^n \approx P_X^n$. Notons que ces valeurs de pressions n'interviennent que pour les flux contenant dans leur stencil une telle face de bord.

↪ Terme de transport amont

On dénote donc par $U_{\alpha, X_{\alpha(\sigma)}}^{i, n}$ le terme de transport amont du constituant i de la phase α au temps t^n à partir de la maille X ; il est défini par,

$$U_{\alpha, X_{\alpha(\sigma)}}^{i, n} = \frac{\xi_{\alpha}(P_{X_{\alpha(\sigma)}}^n, C_{\alpha, X_{\alpha(\sigma)}}^n) k_{r_{\alpha}}(S_{X_{\alpha(\sigma)}}^n)}{\mu_{\alpha}(P_{X_{\alpha(\sigma)}}^n, C_{\alpha, X_{\alpha(\sigma)}}^n)} C_{\alpha, X_{\alpha(\sigma)}}^{i, n}, \quad (3.19)$$

où $X_{\alpha(\sigma)}$ désigne le volume de contrôle en amont de l'interface $\sigma \in \mathcal{F}_X$ par rapport au flux de la phase α . Pour l'explicitier on considère donc un volume de contrôle $X \in \mathcal{M}$ et une interface $\sigma \in \mathcal{F}_X$ de celui-ci. Deux configurations sont alors possibles, (i) σ est une interface interne et appartient donc à \mathcal{F}_{int} , ou bien (ii) σ est une interface de bord et appartient donc à \mathcal{F}_{ext} .

- (i) Si $\sigma \in \mathcal{F}_{\text{int}}$, alors il existe un volume de contrôle adjacent à X également connecté à σ tel que $\sigma = X|Y$. Alors si le flux $F_{\alpha, X|Y}^n$, défini en (3.15) est positif, on prend $X_{\alpha(\sigma)} = X$, sinon $X_{\alpha(\sigma)} = Y$.

$$\forall \sigma = X|Y \in \mathcal{F}_{\text{int}}, \quad X_{\alpha(\sigma)} = \begin{cases} X & \text{si } F_{\alpha, X|Y}^n > 0, \\ Y & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.20)$$

- (ii) Si $\sigma \in \mathcal{F}_{\text{ext}}$, on peut même se restreindre à $\sigma \in \mathcal{F}_{\text{ext}}^D$ puisque le terme de transport ne sera pas calculé pour une interface de bord soumise à une condition aux limites de type Neumann homogène. On peut écrire $\sigma = X|b$ où X est la maille et b sa face de bord. Alors si le flux $F_{\alpha, X|b}^n$, défini en (3.17) est positif, le flux est sortant et on prend $X_{\alpha(\sigma)} = X$, sinon le flux est entrant et on a $X_{\alpha(\sigma)} = b$.

$$\forall \sigma = X|b \in \mathcal{F}_{\text{ext}}^D, \quad X_{\alpha(\sigma)} = \begin{cases} X & \text{si } F_{\alpha, X|b}^n > 0, \\ b & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.21)$$

Rappelons que le signe du flux dépend de la convention d'orientation de la normale définie ici en début de section 3.3.

* *Conservation du volume poreux*

La discrétisation de l'équation de conservation du volume poreux (3.4) s'écrit sur chaque volume de contrôle $X \in \mathcal{M}$ par,

$$\sum_{\alpha \in \Phi_{I_X^n}} S_{\alpha,X}^n = 1, \quad (3.22)$$

avec $S_{\alpha,X}^n = 0$ pour $\alpha \notin \Phi_{I_X^n}$.

* *Equilibre thermodynamique des phases*

Sur chaque volume de contrôle $X \in \mathcal{M}$, les équations d'équilibre thermodynamique (3.5) sont discrétisées comme suit,

$$\begin{cases} f_{\alpha}^i(P_X^n, C_{\alpha,X}^n) = f_{\beta}^i(P_X^n, C_{\beta,X}^n), & i \in \mathcal{C} \text{ et } \alpha, \beta \in \Phi_{I_X^{i,n}}, \\ \sum_{i \in \mathcal{C}_{\alpha}} C_{\alpha,X}^{i,n} = 1, & \alpha \in \Phi_{I_X^n}. \end{cases} \quad (3.23)$$

Bilan

A chaque itération en temps t^n pour $n > 0$, et dans chaque volume de contrôle $X \in \mathcal{M}$, le jeu d'inconnues discrètes est dénoté \mathcal{X}_X^n et défini par,

$$\mathcal{X}_X^n = \begin{pmatrix} \Phi_{I_X^n} \\ P_X^n \\ S_{\alpha,X}^n, \alpha \in \Phi_{I_X^n} \text{ avec } S_{\alpha,X}^n = 0, \alpha \notin \Phi_{I_X^n} \\ C_{\alpha,X}^{i,n}, \alpha \in \Phi_{I_X^n}, i \in \mathcal{C}_{\alpha} \\ m_{i,X}^n, i \in \tilde{\mathcal{C}}_{I_X^n} \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Par la suite, on notera $\bar{\mathcal{X}}_X^n$ les inconnues \mathcal{X}_X^n en excluant les variables indépendantes $m_{i,X}^n$ pour $i \in \tilde{\mathcal{C}}_{I_X^n}$. On note également par $\mathcal{X}^n = \{\mathcal{X}_X^n, X \in \mathcal{M}\}$ et $\bar{\mathcal{X}}^n = \{\bar{\mathcal{X}}_X^n, X \in \mathcal{M}\}$.

A chaque itération en temps t^n , et dans chaque volume de contrôle $X \in \mathcal{M}$, le jeu d'équations est quant à lui donné par,

- le système des N_C équations de conservations (3.11) de type EDPs dénoté,

$$R_{i,X}(\mathcal{X}^n) = 0, i \in \mathcal{C}, \quad (3.25)$$

avec

$$\begin{aligned}
R_{i,X}(\mathcal{X}^n) &= |X| \frac{(m_{i,X}^n - m_{i,X}^{n-1})}{\Delta t^n} \\
&+ \sum_{\sigma=X|Y \in \mathcal{F}_{\text{int}} \cap \mathcal{F}_X} \sum_{\alpha \in \Phi_{I_{X\alpha(\sigma)}}^i} U_{\alpha, X\alpha(\sigma)}^{i,n} F_{\alpha, X|Y}^n \\
&+ \sum_{X|b^D \in \mathcal{F}_{\text{ext}}^D} \sum_{\alpha \in \Phi_{I_X}^i} U_{\alpha, X}^{i,n} \left(F_{\alpha, X|b^D}^n \right)^+ \quad \text{Flux de bord sortant} \\
&+ \sum_{X|b^D \in \mathcal{F}_{\text{ext}}^D} \sum_{\alpha \in \Phi_{I_{b^D}}^i} U_{\alpha, b^D}^{i,n} \left(F_{\alpha, X|b^D}^n \right)^- \quad \text{Flux de bord entrant}
\end{aligned}$$

- et des équations, dites de fermeture, que sont la conservation du volume poreux (3.22) et les lois thermodynamiques (3.23) dénotées,

$$L_X(\bar{\mathcal{X}}^n) = 0. \quad (3.26)$$

- et pour finir un flash thermodynamique à pression P_X^n et compositions totales données Z_X^n , pour déterminer l'inconnue

$$\Phi_{I_X}^n = \text{Flash}(P_X^n, Z_X^n). \quad (3.27)$$

Cette opération algébrique est discutée dans la section annexe 3.7 qui clôt ce chapitre.

Pour conclure ce bilan, soulignons enfin que la propriété de convergence de ce schéma amont a été prouvée pour des cas simples, typiquement en diphasique, notamment dans [21, 29].

3.3.2 Algorithme de résolution du système

On présente ici les outils clefs et les grandes lignes de l'algorithme de résolution du système précédemment décrit. C'est un prototype codé en Fortran qui a été utilisé. Tout comme pour la présentation de la méthode, l'implémentation a été faite suivant une méthode *fully implicit* en temps pour éviter la contrainte d'une condition CFL sur le pas de temps. Ainsi, pour alléger les notations, l'index en temps sera omis dans la suite de cette sous-section.

Preprocessing – graphe des coefficients de transmissivité

La discrétisation des équations de conservation (3.11) a mis en évidence l'importance de l'approximation des flux de Darcy (3.13). Une méthode de discrétisation de ces flux de phases a été présentée suivant la méthodologie des schémas volumes finis centrés aux mailles. Ainsi une

expression linéaire des flux numériques (3.15)-(3.18) a été obtenu à l'aide des coefficients de transmissivité,

$$(\mathcal{T}_{X|Y}^e)_{e \in \mathcal{N}_{X|Y}}, \sigma = X|Y \in \mathcal{F}.$$

La valeur de ces coefficients dépend de la grille de discrétisation \mathcal{M} , du tenseur de perméabilité Λ et bien sûr du schéma employé, mais est totalement indépendante du reste du problème. Ce constat réalisé, il est donc possible de calculer ces coefficients de transmissivité en pre-processing, en totale autonomie du code d'écoulement à qui l'on fournit donc en entrée, un graphe des coefficients de transmissivité. L'intérêt est double. D'un côté, cela évite de recalculer le schéma au cours de la simulation, et de l'autre, le code d'écoulement gagne en généricité puisque indépendant du schéma volumes finis retenu pour la discrétisation des flux darcéens.

Linéarisation et gestion des inconnues

On constate que le système décrit dans la sous-section précédente 3.3.1, issu de la discrétisation du problème d'écoulement à résoudre sur chaque volume de contrôle, est fortement non linéaire. Pour linéariser le problème on utilise une méthode de Newton, associée à une possible méthode de relaxation pour limiter les incréments, mais avec un même coefficient de relaxation sur tous les volumes de contrôle et pour toutes les inconnues. D'un point de vue pratique, le système linéaire issu de la linéarisation de Newton est résolu à l'aide préconditionneur ILU0 seul ou combiné à AMG et du solveur itératif GMRES.

Rappelons que la méthode de Newton implique de calculer la Jacobienne du système. C'est dans ce calcul que la formulation de type Coats [22, 23] présente un grand intérêt. En effet, les inconnues sont les variables naturelles ce qui rend explicite, et donc plus simple, le calcul de la Jacobienne.

Le système linéaire issu de la linéarisation de Newton peut être réduit. Cette opération est appelée *préélimination* car cela s'effectue avant l'assemblage pour ne pas stocker la Jacobienne complète et gagner en temps CPU. L'idée est de séparer le jeu d'inconnues \mathcal{X}_X de chaque volume de contrôle en inconnues primaires \mathcal{X}_X^p et secondaires \mathcal{X}_X^s en éliminant les équations de fermeture locales et les inconnues secondaires par complément de Schur à la fois pour la Jacobienne et le second membre.

Les inconnues $m_{i,X}$ pour $i \in \tilde{\mathcal{C}}_{I_X}$ sont toujours primaires mais les équations de conservations et de fermeture n'en dépendent pas. On ne les fait donc pas intervenir dans la préélimination et les dérivées des lois.

L'opération de préélimination est propre à chaque volume de contrôle X et dépend ainsi du contexte I_X . On part des dérivées des équations de fermeture par rapport aux inconnues PCS (Pression, Saturations, Compositions),

$$\frac{\partial L_X}{\partial \bar{\mathcal{X}}_X}.$$

Le choix des inconnues primaires/secondaires répond alors à une démarche algébrique devant garantir l'inversibilité de la matrice,

$$\frac{\partial L_X}{\partial \mathcal{X}_X^s}.$$

On peut alors établir un lien entre les incréments des inconnues primaires et secondaires,

$$d\mathcal{X}_X^s = A_X^{s,p} d\bar{\mathcal{X}}_X^p + B_X^s,$$

avec,

$$\begin{cases} A_X^{s,p} = - \left(\frac{\partial L_X}{\partial \mathcal{X}_X^s} \right)^{-1} \frac{\partial L_X}{\partial \bar{\mathcal{X}}_X^p}, \\ B_X^s = - \left(\frac{\partial L_X}{\partial \mathcal{X}_X^s} \right)^{-1} L_X. \end{cases} \quad (3.28)$$

Une méthode possible pour réduire le système linéaire peut être alors d'assembler la Jacobienne et le second membre en respectant le découpage des inconnues en primaires et secondaires, puis d'utiliser la complément de Schur à l'aide des matrices définies par (3.28). En comptant les termes d'ordre le plus élevé, on peut estimer la complexité de cette méthode au coût du calcul des matrices (3.28) plus,

$$\sum_{X \in \mathcal{M}} 2 \mathcal{N}_X (N_X^p)^2 N_X^s, \quad (3.29)$$

pour le complément de Schur, où \mathcal{N}_X est le stencil du volume de contrôle X et N_X^p et N_X^s sont respectivement les nombres d'inconnues primaires et secondaires de X .

Une seconde méthode, plus performante, est d'éliminer les inconnues secondaires au moment du calcul des dérivées des lois. Considérons ainsi une loi $\xi_\alpha(\bar{\mathcal{X}}_X)$, on calcule et stocke les matrices des dérivées primaires $A_X^{\xi_\alpha}$ et $B_X^{\xi_\alpha}$ avec,

$$\begin{cases} A_X^{\xi_\alpha} = \frac{\partial \xi_\alpha}{\partial \bar{\mathcal{X}}_X^p} - \frac{\partial \xi_\alpha}{\partial \mathcal{X}_X^s} A_X^{s,p}, \\ B_X^{\xi_\alpha} = - \frac{\partial \xi_\alpha}{\partial \mathcal{X}_X^s} B_X^s. \end{cases} \quad (3.30)$$

On réalise cette opération pour les trois combinaisons ξ_α suivantes,

$$\xi_\alpha = \begin{cases} \zeta_\alpha(P_X, C_{\alpha,X}) S_{\alpha,X} C_{\alpha,X}, \\ \zeta_\alpha(P_X, C_{\alpha,X}) \frac{k_{r,\alpha}(S_X)}{\mu_\alpha} C_{\alpha,X}, \\ \rho_\alpha(P_X, C_{\alpha,X}), \end{cases} \quad (3.31)$$

pour toutes phases $\alpha \in \Phi_{I_X}$. Puis on assemble directement la Jacobienne et le second membre réduit. La complexité de cette méthode englobe le coût du calcul des matrices (3.28) (donc sans surcoût à ce niveau), plus le calcul des dérivées et surtout le calcul des matrices (3.31) sur chaque volume de contrôle estimé à,

$$\sum_{X \in \mathcal{M}} 6 N_{\Phi_{I_X}} N_X^p N_X^s, \quad (3.32)$$

ce qui est clairement inférieur à la complexité de la première méthode (3.29).

Gestion des changements de phase

La mise à jour du contexte de chaque volume de contrôle X se fait dans le Newton. Dans la mesure où le jeu d'inconnues dépend directement du contexte, cette étape de l'algorithme est très importante. Ainsi après chaque incrémentation du Newton, sur chaque volume de contrôle X , on regarde,

- si toutes les phases sont présentes, alors la phase α disparaît si $S_X^\alpha < 0$,
- sinon, on réalise un flash thermodynamique (3.27) pour tester l'équilibre des phases.

Opération que l'on peut schématiser par une boucle sur les volumes de contrôle $X \in \mathcal{M}$ mettant à jour les inconnues et les contextes comme suit,

$$\text{si } \Phi_{I_X} = \Phi \left\{ \begin{array}{l} \Phi_{I_X} \leftarrow \{\alpha \in \Phi | S_{\alpha,X} \geq 0\}, \\ S_{\alpha,X} \leftarrow \frac{S_{\alpha,X}}{\sum_{\beta \in \Phi_{I_X}} S_{\beta,X}}, \quad \alpha \in \Phi_{I_X}, \\ C_{\alpha,X} \leftarrow \text{Projection}_{\{U \geq 0 | \sum_{i \in \mathcal{C}_\alpha} U_i = 1\}} C_{\alpha,X}, \quad \alpha \in \Phi_{I_X}, \end{array} \right.$$

$$\text{sinon} \left\{ \begin{array}{l} (\tilde{\Phi}_{I_X}, \tilde{C}_{\alpha,X}, \tilde{\theta}_{\alpha,X}) = \text{Flash thermodynamique - cf. 3.7}, \\ \Phi_{I_X} \leftarrow \tilde{\Phi}_{I_X}, \\ S_{\alpha,X} \leftarrow \tilde{S}_{\alpha,X} = \frac{\tilde{\theta}_{\alpha,X}}{\zeta_\alpha \sum_{\beta \in \Phi_{I_X}} \frac{\tilde{\theta}_{\beta,X}}{\zeta_\beta}}, \quad \alpha \in \Phi_{I_X}, \\ C_{\alpha,X} \leftarrow \tilde{C}_{\alpha,X}, \quad \alpha \in \Phi_{I_X}. \end{array} \right.$$

Le flash thermodynamique est un calcul algébrique qui admet en entrée pression, et compositions totales du mélange. Cette opération est discutée par la suite, dans la section annexe 3.7 en fin de chapitre.

Séquencement de l'algorithme

On présente ici les grandes étapes de résolution de l'algorithme du code d'écoulement. Le graphe des coefficients de transmissivité, associé au schéma, est calculé indépendamment en preprocessing.

1. Numérotation des inconnues et des équations.

Pour chaque contexte $I = 1, \dots, 2^{N_\Phi} - 1$ possible, on numérote les inconnues \mathcal{X}_I et les équations de fermeture (conservation du volume poreux et lois thermodynamique);

2. Initialisation

Définition de l'état initial en pression, saturation, composition, contexte à l'intérieur du domaine mais également sur les bords avec en outre la définition des conditions aux limites. Les termes d'accumulation sont également initialisés;

3. Boucle en temps

Le pas de temps peut être redécoupé en cas d'échec de l'algorithme de Newton après un nombre d'itérations maximal fixé;

4. Boucle de l'algorithme de Newton

5. Calcul de l'initialisation du Newton

6. Calcul des lois et des dérivées pour chaque volume de contrôle X de contexte $I = I_X$.

→ Calcul du résidu des lois thermodynamique et de fermeture ainsi que leurs dérivées par rapport aux inconnues PCS,

$$L_X(\bar{\mathcal{X}}_X) \text{ et } \frac{\partial L_X}{\partial \bar{\mathcal{X}}_X}(\bar{\mathcal{X}}_X)$$

→ Choix des N_X^p inconnues PCS primaires. On note $d\bar{\mathcal{X}}_X^p$ l'incrément des variables primaires.

→ Calcul des matrices de préélimination (3.28) tel que, $d\mathcal{X}_X^s = A_X^{s,p} d\bar{\mathcal{X}}_X^p + B_X^s$, où $d\mathcal{X}_X^s$ est l'incrément des variables secondaires.

→ Calcul des ξ_α et de $\left(\frac{\partial \xi}{\partial \bar{\mathcal{X}}_X^p}\right)$ pour les différentes combinaisons (3.31) et des matrices (3.30) $A_X^{\xi_\alpha}$ et $B_X^{\xi_\alpha}$ tels que $d\xi = A_X^{\xi_\alpha} d\bar{\mathcal{X}}_X^p + B_X^{\xi_\alpha}$.

7. Calcul des flux

Calcul des flux à l'aide du graphe des coefficients de transmissivité du schéma. On en déduit les volumes de contrôle amonts pour les interfaces internes et si le flux est entrant ou sortant pour les interfaces de bord;

8. Calcul des termes d'accumulations $m_{i,X}$

9. Calcul des résidus.

Test d'arrêt du Newton avec les résidus de conservation et de fermeture.

10. Assemblage de la jacobienne

11. Préconditionnement et solveur

12. Incrémentation du Newton

Calcul des incréments des inconnues primaires, puis des inconnues secondaires. Mise à jour de l'ensemble des inconnues. Gestion des contextes.

13. Fin de la boucle Newton

14. Mise à jour des termes d'accumulations en fin de pas de temps.

15. Fin de la boucle en temps

3.4 Application au schéma VAG

D'un côté, nous avons donc un code pour la simulation des écoulements compositionnels polyphasiques dont le développement a été axé pour la gamme des schémas volumes finis centrés aux mailles comme souligné dans la sous-section 3.3. D'un autre côté, nous avons le schéma gradient nommé VAG 2.4.2 dont une série de tests monophasiques a montré sa robustesse et son bon compromis précision/coût (sous-section 2.5). De ce fait, la question de la mise en œuvre du schéma VAG pour des simulations polyphasiques s'est posée. Cependant, cette méthode n'est pas un schéma volumes finis, donc comment réutiliser à moindre frais le code d'écoulement avec le schéma VAG ? A l'image de la conception du code d'écoulement, l'idée clef est donc de construire un graphe des coefficients de transmissivité pour le schéma VAG, c'est à dire définir des volumes de contrôle et calculer des flux linéaires entre ces volumes. Une solution, introduite dans [34], est proposée ci-après.

3.4.1 Présentation de la méthode

Le schéma VAG(R) a été décrit dans le chapitre précédent à la sous-section 2.4.2, ainsi nous nous concentrons ici sur l'utilisation de ce schéma pour la simulation des écoulements polyphasiques en se référant au cadre décrit dans la section 3.3. Rappelons juste que le schéma VAG(R) est basé sur une formulation hybride nœud-maille, les inconnues aux mailles pouvant être éliminées faisant de cette méthode un schéma centré aux nœuds. De ce fait, un choix naturel pour la définition des volumes de contrôle, au sens défini en préambule de la sous-section 3.3.1, est de prendre en compte à la fois les mailles et les nœuds de la grille de discrétisation du domaine géométrique Ω . Ainsi, si l'on considère un maillage de Ω dont la définition comprend naturellement un ensemble de mailles, noté \mathcal{G} , et un ensemble de sommets, noté \mathcal{V} ; alors l'ensemble des volumes de contrôle, toujours noté \mathcal{M} , pour la méthode VAG polyphasique est donné par l'union $\mathcal{M} = \mathcal{G} \cup \mathcal{V}$. De ce fait, il faut définir,

- le flux linéaire $F_{\alpha, X|Y}$ de la phase α entre deux volumes de contrôle X et Y de \mathcal{M} ,
- un volume poreux à chaque volume de contrôle X de \mathcal{M} .

Pour toutes mailles $K \in \mathcal{G}$, on note \mathcal{V}_K l'ensemble des $N_{\mathcal{V}_K}$ nœuds de K . Et pour tout nœud $\mathbf{s} \in \mathcal{V}$, on note $\mathcal{G}_{\mathbf{s}}$, l'ensemble des $N_{\mathcal{G}_{\mathbf{s}}}$ mailles connectées à \mathbf{s} . On dénote par $\mathbf{x}_{\mathbf{s}}$ les coordonnées du sommet $\mathbf{s} \in \mathcal{V}$. On distingue $\mathcal{V} = \mathcal{V}_{\text{int}} \cup \mathcal{V}_{\text{ext}}$ avec \mathcal{V}_{int} l'ensemble des nœuds internes et \mathcal{V}_{ext} l'ensemble des nœuds au bord du domaine Ω . Par souci de lisibilité, on omettra dans cette section l'indice de discrétisation en temps.

Flux numérique

On souhaite donc définir les flux de la phase α , noté $F_{\alpha, X|Y}$, entre volumes de contrôle voisins, c'est à dire,

- \rightsquigarrow entre une maille $X = K \in \mathcal{G}$ et ses sommets $Y = \mathbf{s} \in \mathcal{V}_K$,
- \rightsquigarrow entre un nœud $X = \mathbf{s} \in \mathcal{V}$ et les mailles qui lui sont connectées $Y = K \in \mathcal{G}_{\mathbf{s}}$.

N'existant pas d'interface physique entre une maille et l'un de ses sommets, on comprend que, contrairement au cas des schémas volumes finis, le flux numérique $F_{\alpha, X|Y}$ calculé par VAG ne peut pas être vu comme l'approximation de l'intégrale sur l'interface $X|Y$ de la vitesse de Darcy (3.13). Pour définir ces flux, on regardera plutôt du côté de la formulation faible d'un problème de diffusion introduite dans (2.3). L'idée est alors de déduire les flux de la forme bilinéaire issue de la formulation faible discrète comme cela a été écrit pour les schémas volumes finis en (2.9).

Pour atteindre cet objectif, on introduit, pour toute maille $K \in \mathcal{G}$ et un nœud $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K$ un gradient discret local,

$$\nabla_{\mathcal{D}}(P_{K,\alpha}) \in \mathbb{R}^3.$$

et un opérateur de reconstruction discret,

$$\Pi_{\mathcal{D}}(P_{K,\alpha}) \in \mathbb{R},$$

avec,

$$P_{K,\alpha} = (P_{K,\mathbf{s},\alpha})_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} = \{p_{\mathbf{s},\alpha}, p_{K,\alpha}\}_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K},$$

où $p_{\mathbf{s},\alpha}$ et $p_{K,\alpha}$ sont, respectivement, la valeur discrète de la pression de phase α au nœud \mathbf{s} et à la maille K . Se référer à la présentation du schéma VAG, sous-section 2.4.2, pour une définition rigoureuse du gradient, dont plusieurs constructions ont été proposées, et de l'opérateur de reconstruction.

Alors, pour rappel, le problème variationnel discret (2.26) sur la maille $K \in \mathcal{G}$ peut s'écrire comme suit,

$$\int_K \Lambda(\mathbf{x}) \nabla_{\mathcal{D}}(P_{K,\alpha}) \cdot \nabla_{\mathcal{D}}(Q_{K,\alpha}) = \int_K f(\mathbf{x}) \Pi_{\mathcal{D}}(Q_{K,\alpha}) d\mathbf{x}, \quad \forall P_{K,\alpha}, Q_{K,\alpha} \in \mathbb{R}^{\mathcal{V}_K}, \quad (3.33)$$

où f est un terme source. On peut alors réécrire le terme gauche de l'égalité (3.33) précédente, en introduisant les matrices locales $(A_K^{\mathbf{s},\mathbf{s}'})_{\mathbf{s},\mathbf{s}' \in \mathcal{V}_K}$, qui sont définies par la relation suivante,

$$\int_K \Lambda(\mathbf{x}) \nabla_{\mathcal{D}}(P_{K,\alpha}) \cdot \nabla_{\mathcal{D}}(Q_{K,\alpha}) = \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} \sum_{\mathbf{s}' \in \mathcal{V}_K} A_K^{\mathbf{s},\mathbf{s}'} P_{K,\mathbf{s}',\alpha} Q_{K,\mathbf{s},\alpha}, \quad \forall P_{K,\alpha}, Q_{K,\alpha} \in \mathbb{R}^{\mathcal{V}_K}. \quad (3.34)$$

Le flux de phase α , entre la maille $X = K \in \mathcal{G}$ et l'un de ses sommets $Y = \mathbf{s} \in \mathcal{V}_K$ est alors donné par,

$$F_{\alpha, X|Y} = F_{\alpha, K|\mathbf{s}} = - \sum_{\mathbf{s}' \in \mathcal{V}_K} A_K^{\mathbf{s},\mathbf{s}'} (p_{\mathbf{s}',\alpha} - p_{K,\alpha}). \quad (3.35)$$

On déduit alors le flux de phase α entre un nœud $X = \mathbf{s} \in \mathcal{V}$ et l'une des mailles qui lui est connectée $Y = K \in \mathcal{G}_{\mathbf{s}}$ par conservativité,

$$F_{\alpha, X|Y} = F_{\alpha, \mathbf{s}|K} = -F_{\alpha, K|\mathbf{s}}. \quad (3.36)$$

On peut également écrire le flux (3.35) sous la forme plus détaillée,

$$F_{\alpha, K|\mathbf{s}} = \sum_{\mathbf{s}' \in \mathcal{V}_K} A_K^{\mathbf{s},\mathbf{s}'} \left[(p_K - p_{\mathbf{s}'}) + (p_{c,\alpha}(S_K, \mathbf{x}_K) - p_{c,\alpha}(S_{\mathbf{s}'}, \mathbf{x}_{\mathbf{s}'})) - \rho_{\alpha, K|\mathbf{s}} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}_K + \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}_{\mathbf{s}'}) \right]. \quad (3.37)$$

Le flux numérique (3.37) s'exprime donc linéairement comme fonction des inconnues discrètes aux volumes de contrôle et peut donc s'écrire sous la même forme que les flux des schémas volumes finis multi-points (3.15)-(3.17), comme démontré via l'expression suivante, équivalente à (3.37) mais plus synthétique,

$$F_{\alpha,K|\mathbf{s}} = \sum_{e \in \mathcal{N}_{K|\mathbf{s}}} \mathcal{T}_{K|\mathbf{s}}^e [p_e + p_{c,\alpha}(S_e^*, \mathbf{x}_e) - \rho_{\alpha,K|\mathbf{s}} \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}_e], \quad (3.38)$$

où le stencil est simplement donné par $\mathcal{N}_{K|\mathbf{s}} = K \cup \mathcal{V}_K$ et les coefficients de transmissivité sont définis par,

$$\mathcal{T}_{K|\mathbf{s}}^e = \begin{cases} \sum_{s' \in \mathcal{V}_K} A_K^{s,s'} & \text{si } e = K, \\ -A_K^{s,s'} & \text{si } e = s' \in \mathcal{V}_K, \end{cases} \quad (3.39)$$

et vérifient donc bien $\sum_{e \in \mathcal{N}_{X|Y}} \mathcal{T}_{X|Y}^e = 0$.

On voit donc clairement que les flux numériques calculés à l'aide du schéma VAG respectent le formalisme décrit précédemment dans la section 3.3, rendant ainsi possible l'écriture d'un graphe des coefficients de transmissivité pour coupler la méthode VAG au code d'écoulement.

En outre, on peut souligner les relations remarquables suivantes. Ainsi, si l'on injecte la définition des matrices locales (3.34) dans la formulation faible discrète (3.33), et en sommant sur les mailles $K \in \mathcal{G}$, on obtient,

$$\sum_{K \in \mathcal{G}} \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} \sum_{s' \in \mathcal{V}_K} A_K^{s,s'} P_{K,s',\alpha} Q_{K,s,\alpha} = \sum_{K \in \mathcal{G}} \int_K f(\mathbf{x}) \Pi_{\mathcal{D}}(Q_{K,\alpha}) d\mathbf{x}, \quad \forall P_{K,\alpha}, Q_{K,\alpha} \in \mathbb{R}^{\mathcal{V}_K}. \quad (3.40)$$

D'un côté, pour un nœud $\mathbf{s} \in \mathcal{V}$, si l'on considère le vecteur $Q_{K,\alpha} = \{q_{\mathbf{s},\alpha}, q_{K,\alpha}\}_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K}$ avec toutes ses composantes nulles sauf $q_{\mathbf{s},\alpha}$ fixée à un, alors en utilisant la définition des flux (3.35), l'égalité (3.40) s'écrit,

$$- \sum_{K \in \mathcal{G}_s} F_{\alpha,K|\mathbf{s}} = \sum_{K \in \mathcal{G}_s} \int_K f(\mathbf{x}) \Pi_{\mathcal{D}}(Q_{K,\alpha} = 0 \text{ sauf } q_{\mathbf{s},\alpha} = 1) d\mathbf{x}. \quad (3.41)$$

De façon analogue, pour une maille $K \in \mathcal{G}$, si l'on considère le vecteur $Q_{K,\alpha}$ avec toutes ses composantes nulles sauf $q_{K,\alpha}$ fixée à un, alors l'égalité (3.40) s'écrit,

$$\sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} F_{\alpha,K|\mathbf{s}} = \int_K f(\mathbf{x}) \Pi_{\mathcal{D}}(Q_{K,\alpha} = 0 \text{ sauf } q_{K,\alpha} = 1) d\mathbf{x}. \quad (3.42)$$

Si l'on considère, comme mentionné dans la sous-section 2.4.2, qu'en pratique l'opérateur $\Pi_{\mathcal{D}}(Q_{K,\alpha})$ retenu est un opérateur d'ordre un, qui associe à $Q_{K,\alpha}$ la fonction constante par morceaux égale à $q_{K,\alpha}$ sur K , alors les équations (3.41) et (3.42) peuvent respectivement s'écrire,

$$\sum_{K \in \mathcal{G}_s} F_{\alpha,K|\mathbf{s}} = 0, \quad \forall \mathbf{s} \in \mathcal{V}, \quad (3.43)$$

et

$$\sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} F_{\alpha, K | \mathbf{s}} = \int_K f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad \forall K \in \mathcal{G}. \quad (3.44)$$

On conclut cette discussion sur les flux numériques du schéma VAG par un commentaire sur les flux internes et de bord. Pour une maille $K \in \mathcal{G}$, le flux $F_{\alpha, K | \mathbf{s}}$ sera tout naturellement considéré comme un flux interne si $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K \cap \mathcal{V}_{\text{int}}$. Inversement, le flux $F_{\alpha, K | \mathbf{s}}$ sera considéré comme un flux de bord si $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K \cap \mathcal{V}_{\text{ext}}$. Dans le cas d'un flux de bord $F_{\alpha, K | \mathbf{s}}$, si \mathbf{s} appartient à un bord du domaine Ω où une condition de Dirichlet est imposée, alors on fixera tout simplement la valeur de pression discrète au nœud ad-hoc. Et si \mathbf{s} appartient à un bord où une condition de type Neumann homogène est imposée, alors on traite celui-ci comme un volume de contrôle et la condition à la limite sera naturellement satisfaite.

Redistribution du volume poreux

On vient de voir que la méthode VAG polyphasique considère comme volumes de contrôle à la fois les mailles et les nœuds de la grille de discrétisation ; or c'est sur ces volumes que les équations régissant l'écoulement sont approximées. En particulier, on constate que le modèle discret doit nécessairement associer à chaque volume de contrôle un volume poreux qui sera saturé par le fluide au cours de la simulation. Par construction géométrique, le volume poreux est défini uniquement sur les mailles, on propose donc ici une méthode pour le redistribuer sur les nœuds de la grille. L'un des points clés est la prise en compte des hétérogénéités qui sont par nature très présentes et parfois très contrastées. En ingénierie de réservoir, la discrétisation spatiale est souvent réalisée tel que les mailles suivent les couches géologiques, les nœuds pouvant ainsi se retrouver à l'interface de milieux de perméabilités très différentes. Pour ces nœuds "à cheval" sur une hétérogénéité, il est important d'extraire le volume des mailles issues de la région à plus forte perméabilité comme illustré sur la Figure 3.1. Dans le cas contraire, en utilisant une redistribution équirépartie aux nœuds par exemple, on risque de générer des flux non physiques entre une zone perméable et une barrière adjacente.

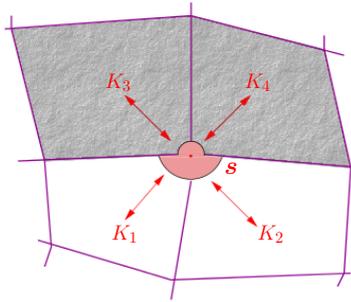


FIGURE 3.1 – Redistribution du volume poreux à un nœud localisé sur une hétérogénéité entre un milieu perméable (en blanc) et une barrière géologique (en gris).

Passons maintenant à la description de la méthode. Le problème est donc de définir un volume poreux pour tous $X \in \mathcal{M}$ où X peut être une maille $K \in \mathcal{G}$ ou un nœud $\mathbf{s} \in \mathcal{V}$. On note par,

$$\tilde{\Phi}_K = \int_K \Phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (3.45)$$

le volume poreux total de chaque maille $K \in \mathcal{G}$. En pratique, il est approximé, en se référant aux notations de la section 3.3, par,

$$\tilde{\Phi}_K \approx |K|\phi_K. \quad (3.46)$$

Pour atteindre notre objectif, on va donc prendre un peu de ce volume poreux des mailles pour l'associer aux nœuds. Afin d'obtenir une méthode de redistribution systématique et efficace, on définit un premier indicateur de la transmissivité entre K et \mathbf{s} par

$$B_{K,\mathbf{s}} = \sum_{\mathbf{s}' \in \mathcal{V}_K} A_K^{\mathbf{s},\mathbf{s}'} > 0, \quad \forall K \in \mathcal{G}_\mathbf{s}. \quad (3.47)$$

Puis, on définit une transmissivité relative qui sera d'autant plus grande que la région est perméable,

$$\tilde{B}_{K,\mathbf{s}} = \frac{B_{K,\mathbf{s}}}{\sum_{L \in \mathcal{G}_\mathbf{s}} B_{L,\mathbf{s}}}, \quad \forall \mathbf{s} \in \mathcal{V}, \quad \forall K \in \mathcal{G}_\mathbf{s}. \quad (3.48)$$

On pondère par la suite ces coefficients (3.48) par une petite valeur globale $\omega \in]0, 1[$. Le volume poreux total (3.45) peut alors être redistribué entre tous les volumes de contrôle $X \in \mathcal{M}$, par la formule suivante,

$$\Phi_X(\omega) = \begin{cases} \omega \sum_{K \in \mathcal{G}_\mathbf{s}} \tilde{B}_{K,\mathbf{s}} \tilde{\Phi}_K & \text{si } X = \mathbf{s} \in \mathcal{V}, \\ \tilde{\Phi}_K (1 - \omega \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} \tilde{B}_{K,\mathbf{s}}) & \text{si } X = K \in \mathcal{G}. \end{cases} \quad (3.49)$$

La méthode de redistribution présentée est donc systématique, prend en compte les possibles hétérogénéités et elle est conservative puisque, par construction, elle vérifie,

$$\sum_{X \in \mathcal{M}} \Phi_X(\omega) = \sum_{K \in \mathcal{G}} \tilde{\Phi}_K, \quad (3.50)$$

et satisfait $\Phi_X > 0$ pour tout volume de contrôle X de \mathcal{M} , cela à condition que le facteur ω soit choisi suffisamment petit.

Remarque sur la valeur du paramètre ω . Soulignons que différentes valeurs de ω ont été testées sans influence sur la précision de la solution numérique mais pour des valeurs trop faibles, la convergence de l'algorithme de Newton est plus difficile, nécessitant de découper le pas de temps, augmentant ainsi le coût en temps CPU de la simulation. L'idéal est de trouver une valeur de ω garantissant une homogénéité des volumes minimaux aux mailles et aux nœuds tout en veillant à calculer des volumes positifs. Ainsi pour toute valeur ω , il existe $\mathbf{s}_0 \in \mathcal{V}$ et $K_0 \in \mathcal{G}$ tel que,

$$\Phi_{\mathbf{s}_0}(\omega) = \min_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}} \Phi_{\mathbf{s}}(\omega),$$

et

$$\Phi_{K_0}(\omega) = \min_{K \in \mathcal{G}} \Phi_K(\omega).$$

On va donc chercher ω_0 tel que,

$$\Phi_{\mathbf{s}_0}(\omega_0) = \Phi_{K_0}(\omega_0). \quad (3.51)$$

La fonction $\Phi_{s_0}(\omega)$ est continue, strictement croissante et la fonction $\Phi_{K_0}(\omega)$ est continue, strictement décroissante; en soulignant que $\Phi_{s_0}(0) < \Phi_{K_0}(0) < \Phi_{s_0}(1)$, on obtient donc l'existence et l'unicité de $\omega_0 \in]0, 1[$.

On a alors $\omega_0 > 0$, ce qui implique $\Phi_{s_0}(\omega_0) > 0$ par construction et $\Phi_{K_0}(\omega_0) > 0$ par définition de ω_0 . On a donc $\Phi_X(\omega_0) > 0$ pour tout volume de contrôle X .

D'un point de vue pratique, en remarquant que s_0 est indépendant de ω , on a,

$$s_0 = \operatorname{argmin}_{s \in \mathcal{V}} \sum_{K \in \mathcal{G}_s} \tilde{B}_{K,s} \tilde{\Phi}_K.$$

Puis, connaissant s_0 , l'égalité des volumes poreux,

$$\Phi_{s_0}(\omega) = \Phi_K(\omega), \quad \forall K \in \mathcal{G}, \quad \forall \omega \in]0, 1[,$$

s'écrit à l'aide de (3.49),

$$\omega_{s_0}(K) = \frac{\tilde{\Phi}_K}{\tilde{\Phi}_K \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \tilde{B}_{K,s} + \sum_{L \in \mathcal{G}_{s_0}} \tilde{B}_{L,s_0} \tilde{\Phi}_L}, \quad \forall K \in \mathcal{G}.$$

On peut donc déterminer K_0 vérifiant (3.51) par,

$$K_0 = \operatorname{argmin}_{K \in \mathcal{G}} \Phi_K(\omega_{s_0}(K)),$$

on en déduit,

$$\omega_0 = \omega_{s_0}(K_0).$$

3.4.2 Bilan

Une méthode permettant d'utiliser le schéma VAG pour des simulations polyphasiques a été présentée. La définition des volumes de contrôle à la fois aux mailles et aux nœuds, et la construction de flux numériques linéaires, ont permis de développer une approche qui respecte le formalisme précédemment introduit pour la discrétisation des écoulements. Cela nous permet donc de réaliser des tests sans aucune modification sur le code d'écoulement pour ainsi étendre au cas polyphasique les comparaisons type O-schéma et VAG. A ce propos, la section suivante propose divers cas tests pour tenter de valider la méthode.

Notons que comme en monophasique, les inconnues aux mailles peuvent être éliminées du système linéaire global issue de la méthode de Newton pour ainsi se ramener à un schéma à 27-points sur grille topologiquement cartésienne.

Le schéma VAG est donc un schéma centré aux nœuds applicable au contexte polyphasique. La méthode proposée ici ne nécessite pas de maillage dual et prend en compte les éventuelles hétérogénéités. Ce dernier point fait parfois défaut sur d'autres méthodes centrées aux nœuds qui construisent des mailles duales centrées autour des nœuds et pouvant donc, dans le cas hétérogène, inclure à la fois du milieu perméable et imperméable...

Notons que de part sa construction centrée aux nœuds, le schéma VAG est très compétitif en termes d'occupation mémoire, et par conséquent en temps CPU, sur des maillages avec des tétraèdres car le nombre de degrés de liberté est ainsi réduit d'un facteur cinq par rapport à des méthodes centrées aux mailles tel que le O-schéma.

Un dernier commentaire sur la version de la méthode VAG utilisée pour les tests numériques qui suivent. Différentes méthodes, en référence à la construction du gradient discret, ont été proposées dans la sous-section 2.4.2, notamment celles dénommées VAG et VAGR. Ces deux dernières versions ont été testées en polyphasique sans différences significatives.

3.5 Résultats numériques

On présente ici différents cas tests polyphasiques. En l'absence de solution analytique, la qualité des simulations est jugée par comparaison de méthodes numériques, classiquement le O-schéma et la méthode VAG. Les deux premiers cas tests sont plutôt des cas schématiques pour mieux appréhender la qualité de la méthode VAG. Les deux derniers cas tests sont quant à eux plutôt des cas métiers axés sur la simulation d'écoulements compositionnels sur grilles proches puits 3D. Pour l'ensemble de ces tests, différentes valeurs de ω de la formule (3.49) de répartition du volume poreux de la méthode VAG, ont été testées et discutées ci-après. Tous les tests ont été réalisés sans pression capillaire.

3.5.1 Propagation de front de type traceur

En remarquant que les flux numériques calculés par le schéma VAG 3.4 ne sont pas, contrairement aux flux darcéens des schémas volumes finis, l'approximation d'un flux analytique, il est impossible de calculer une erreur discrète sur ces flux. Il est cependant naturel de s'interroger sur la précision de la vitesse de l'écoulement lors d'une simulation polyphasique à l'aide de VAG. Pour tenter d'apporter une réponse partielle à cette question, on considère ici un cas test diphasique analytique du type traceur à la simplicité optimale.

On considère donc dans ce premier cas diphasique immiscible, la propagation d'un traceur, phase gaz noté g , à travers un réservoir $\Omega = [0, 1]^3$ saturé d'un phase liquide, noté l . La gravité est négligée, le tenseur Λ équivaut à la matrice identité et toutes les propriétés (porosité, viscosité, densité) sont fixées constantes à un.

De ce fait, l'écoulement est régi par le système simplifié d'équations,

$$\begin{cases} \Delta P = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(S_g) + \operatorname{div}[S_g \nabla P] = 0, \\ S_l = 1 - S_g. \end{cases}$$

On impose une condition de pression P_1 sur le bord $x = 0$ et P_2 sur le bord $x = 1$ avec $P_1 > P_2$ de telle sorte que le gaz soit injecté sur le bord gauche. Une condition de flux nuls est imposée aux frontières restantes. La solution en pression P est alors donnée par,

$$P(x, y, z) = (P_2 - P_1)x + P_1.$$

Et la saturation en gaz S_g satisfait donc une équation de transport, dont la solution est,

$$S_g(x, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \leq (P_1 - P_2) t, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

On a utilisé dans les tests numériques qui suivent deux types de maillages. Le premier est un maillage hexaédrique cartésien constitué de $32 \times 32 \times 32$ mailles dans les directions x, y, z . Le second est un maillage tétraédrique, précisément le 4^{ème} maillage de la famille de grille (B) issue du Benchmark 3D 2.5.3 et comptant 15266 mailles.

Les résultats obtenus à l'aide de la méthode VAG sont comparés à ceux du O-schéma (qui dégénère en TPFA sur la grille hexaédrique).

La Figure 3.2 représente, pour chaque maillage, la saturation de gaz en fonction de $x \in [0, 1]$, à l'instant où le gaz a parcouru la moitié du réservoir. On représente la solution analytique et, pour comparaison, les solutions discrètes obtenues avec les deux schémas à l'aide des couples de valeurs $(x_K, S_{g,K})$ pour toutes mailles K avec x_K la coordonnée en x du centre de la maille et $S_{g,K}$ la valeur discrète de la saturation en gaz calculée par le schéma.

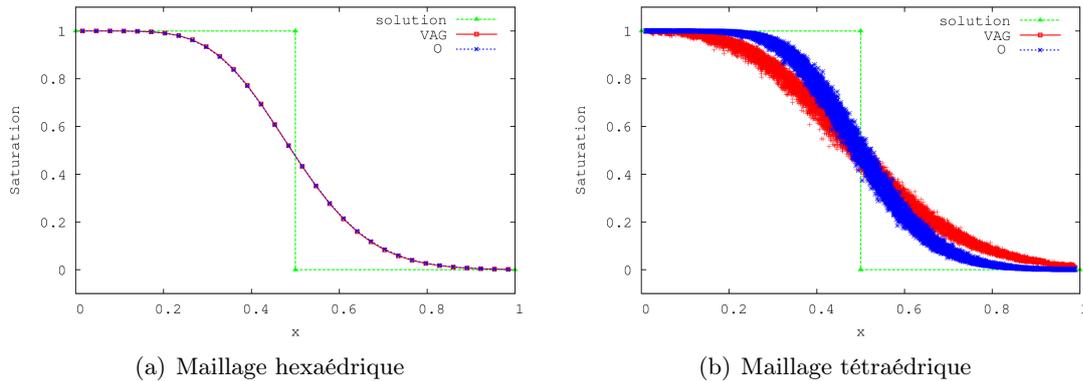


FIGURE 3.2 – Propagation du front de gaz sur un cas traceur - $(x_K, S_{g,K}), \forall K \in \mathcal{G}$ - Schéma VAG pour $\omega = 0.001$

Les résultats présentés sur la Figure 3.2 montrent tout d'abord que, sur chaque maillage, les solutions discrètes des deux schémas coupent la solution analytique au point $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ illustrant ainsi que la vitesse du front est correcte dans tous les cas. Sur le cas hexaédrique, Figure 3.2(a), les solutions du O-schéma (ou TPFA) et de VAG sont confondues. Cependant sur le cas tétraédrique, Figure 3.2(b), on remarque que le schéma VAG est plus diffusif. Au moment de la rédaction, cette observation n'est pas clairement justifiée. Cependant, comme souligné dans la sous-section Bilan de 2.5.3, du fait d'être un schéma centré aux noeuds, le schéma VAG possède un nombre de degrés de liberté réduit d'un facteur cinq par rapport à des méthodes centrées aux mailles tel que le O-schéma. Le stencil du schéma VAG est quasiment réduit de moitié sur un maillage de type tétraédrique par rapport à celui du O-schéma. Cela pourrait expliquer la plus grande sensibilité du schéma VAG à la diffusion numérique sur ce type de maillage en comparaison au O-schéma.

Pour clore ce cas test, signalons que les résultats de la Figure 3.2 ont été obtenus pour la valeur $\omega = 0.01$ dans la formule (3.49). D'autres valeurs de ω ont été testées, 0.05, 0.1, 0.2 et 0.3 (cette dernière valeur correspond approximativement à ω_0 (3.51)). On a constaté une très légère amélioration de la solution lorsque ω croît, mais rien de significatif. Notons également que pour la méthode VAG, on utilise, pour les sorties graphiques, les saturations discrètes après redistribution de la matière entre une maille et ses nœuds,

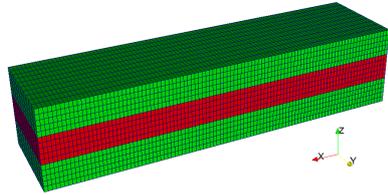
$$S_{g,K}^n \leftarrow (1 - \omega \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \tilde{B}_{K,s}) S_{g,K}^n + \omega \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \tilde{B}_{K,s} S_{g,s}^n, \quad \forall K \in \mathcal{G}, \forall n > 0.$$

Ce post-processing s'effectue donc au prorata de la redistribution du volume poreux (3.49).

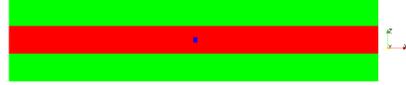
3.5.2 Injection de CO₂ immiscible dans un réservoir hétérogène

Ce second exemple est un cas d'injection de CO₂ gazeux, considéré non miscible, dans une phase liquide, via un puits localisé au milieu d'un réservoir isotrope et hétérogène de taille de $\Omega = [-100, 100] \times [0, 50] \times [0, 45]$ m³. On dénote dans la suite par les indices g et l , les propriétés des phases gaz et liquide. La gravité est négligée.

Le réservoir est divisé en trois couches de 15 m d'épaisseur chacune comme illustrée sur la Figure 3.3(a). Les couches supérieures et inférieures sont considérées comme des barrières, donc faiblement perméables. De son côté, la couche médiane s'apparente donc au milieu perméable. Le rapport de perméabilité est de 10^4 .



(a) Maillage et hétérogénéités. En rouge la zone perméable, en vert les barrières imperméables.



(b) Coupe 2D xz en $y = 25$. Le carré bleu localise la perforation du puits d'injection.

FIGURE 3.3 – Configuration du cas test d'injection de gaz dans un réservoir hétérogène.

Une grille cartésienne grossière comprenant $100 \times 10 \times 15$ mailles dans les directions x, y, z est utilisée pour la simulation. On impose une condition de pression P_{bord} sur les bords $x = \pm 100$ et une condition de flux nuls aux frontières restantes. Le puits est constitué d'une perforation localisée au milieu du réservoir, dans la zone perméable, comme affiché sur la Figure 3.3(b). Le terme source du puits est discrétisé à l'aide de l'indice de Peaceman [42]. On impose une condition de pression P_{puits} au puits tel que $P_{\text{puits}} > P_{\text{bord}}$ pour assurer l'injectivité.

Un intérêt de ce test réside dans l'hétérogénéité du tenseur de perméabilité permettant ainsi de valider la méthode de répartition du volume poreux utilisée pour le schéma VAG 3.4. Sur ce point, une formule différente de (3.48), avec une répartition du volume poreux de façon équirépartie a été regardée,

$$\tilde{B}_{K,v} = \frac{1}{N_{\mathcal{G}_v}}, \quad \forall K \in \mathcal{G}_v. \quad (3.52)$$

Il a été possible d’obtenir des résultats acceptables avec (3.52) mais pour une valeur de ω de (3.49) qu’on peut qualifier d’“hasardeuse”. En effet avec une telle formule, la précision des résultats est fortement dépendante de ω rendant cette approche imprécise et, par conséquent, inutilisable. On représente ainsi sur la Figure 3.4, l’évolution au cours du temps de la masse de gaz dans la zone la moins perméable du réservoir, noté $(m_g^b(t^n))_{n>0}$ (3.53), d’un côté en utilisant une répartition du volume poreux fonction des transmissivités (3.48), de l’autre de façon équirépartie (3.52). Pour ces deux approches les valeurs suivantes de ω ont été testées, 0.03, 0.1 et 0.3. Notons qu’ici, en post-processing, on réaffecte à la maille la masse de gaz contenue à ses nœuds et cela au prorata du volume poreux, i.e. des coefficients $\tilde{B}_{K,v}$,

$$m_g^b(t^n) = \sum_{K \in \text{barrieres}} \rho_g(P_K^n, C_{g,K}^n) \tilde{\Phi}_K \left((1 - \omega \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \tilde{B}_{K,s}) S_{g,K}^n + \omega \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \tilde{B}_{K,s} S_{g,s}^n \right). \quad (3.53)$$

On remarque alors très clairement sur la Figure 3.4(b) qu’avec la formule équirépartie (3.52), le gaz s’échappe en trop grande quantité dans la zone la moins perméable qui ne joue ainsi plus son rôle de barrière géologique, ceci est d’autant plus vrai que ω est grand.

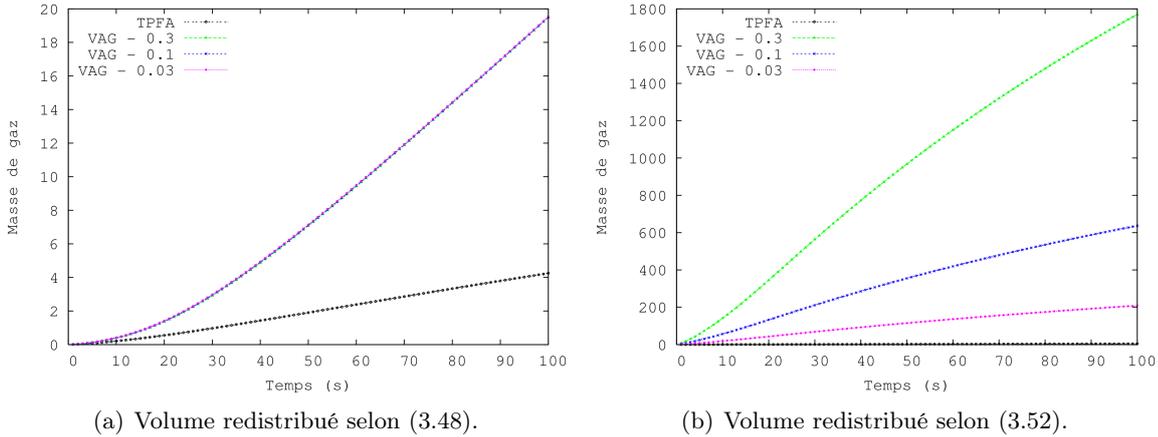


FIGURE 3.4 – Masse de gaz dans la zone la moins perméable du réservoir en fonction du temps.

De l’autre côté, on peut noter sur la Figure 3.4(a) que les résultats obtenus par VAG lorsque la formule idoine (3.48) est utilisée sont indépendants, en termes de précision, de la valeur de ω . Notons que dans le cas présent, l’homogénéité des volumes minimaux aux nœuds est obtenue pour $\omega_0 \approx 0.3$ (3.51). Enfin aucune influence de ω sur le temps CPU n’a été ici observée puisque le pas de temps est très petit en comparaison au pas d’espace.

Les résultats ainsi obtenus de la méthode VAG classique (3.48) sont donc comparés avec ceux obtenus à l’aide du schéma deux-points (TPFA) qui se justifie parfaitement sur ce type de grille régulière Λ -orthogonale.

On observe sur la Figure 3.5 le front de saturation de gaz après quelques itérations en temps. Notons tout d’abord sur la Figure 3.5(b) que le schéma VAG ne génère aucune “fuite” de gaz dans la zone imperméable assurant ainsi le sens physique des résultats de la méthode. En second lieu, on ne peut pas manquer d’observer la différence d’aspect des fronts de gaz fournis par les deux schémas. Pour le schéma VAG, le front est clairement radial ce qui est le

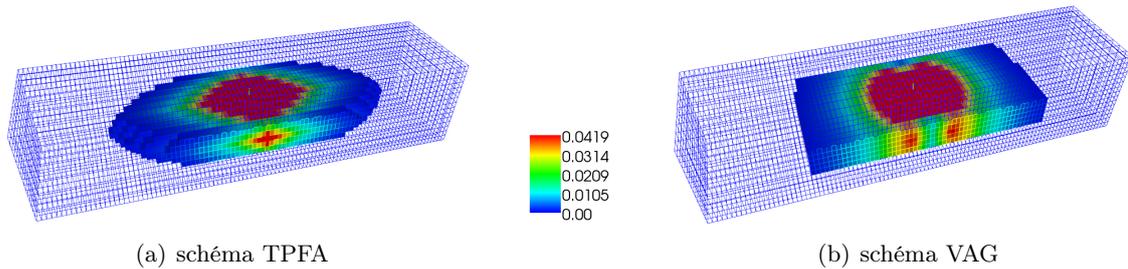


FIGURE 3.5 – Front de saturation gazeux, tel que $S_g > 0.1\%$, après un faible temps d’injection.

comportement attendu autour d’un puits. En revanche, le front calculé par le schéma TPFA est très étalé dans les directions x, y . Cette diffusion numérique le long des axes du maillage est un phénomène connu sous le nom d’effet d’axe, ou Grid Orientation Effect (GOE) en anglais. Cette digitation numérique est étudiée plus en détails au chapitre 5 mais mentionnons que cela apparaît lorsqu’on injecte un fluide gazeux de viscosité inférieure au fluide en place dans le réservoir. Le cas test mis en place rentre dans cette configuration puisque l’on a pris $\frac{\mu_l}{\mu_g} = 10$.

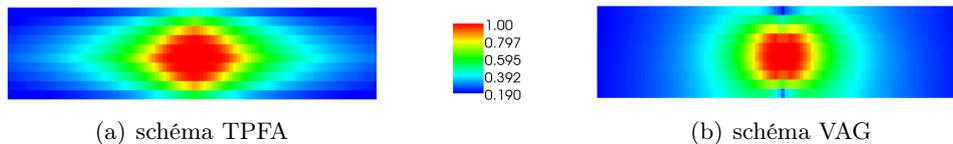


FIGURE 3.6 – Coupe en $z = 22.5$ m - Saturation de gaz en fin d’injection.

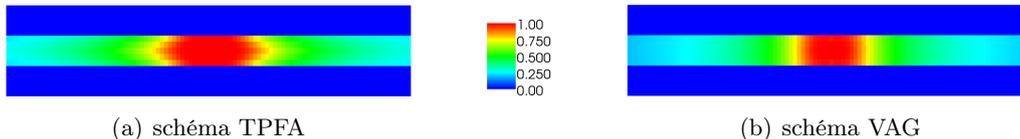


FIGURE 3.7 – Coupe en $y = 25$ m - Saturation de gaz en fin d’injection.

Ce phénomène apparaît encore plus clairement sur les profils de saturation de gaz en fin d’injection comme illustré sur les coupes horizontale et verticale des Figures 3.6 et 3.7. Le GOE est ainsi très important pour le schéma TPFA alors que son effet est pour ainsi dire invisible sur les résultats obtenus avec la méthode VAG. De tels résultats peuvent s’expliquer par la construction des flux. Les flux de VAG ont des connectivités mailles-nœuds donc dans les directions diagonales. En outre, après élimination des inconnues aux mailles, le schéma VAG est un schéma centré aux nœuds avec un stencil à 27-points. De son côté, le schéma TPFA a un stencil à 7-points centrés sur les mailles et calcule des flux à travers les faces du maillage donc dans les directions verticale et horizontale.

Ce cas test est donc très intéressant pour valider la méthodologie développée pour l’application du schéma VAG à des écoulements polyphasiques. En effet, les résultats obtenus illustrent la robustesse de la méthode (3.48) de redistribution du volume poreux et les propriétés du schéma VAG pour lutter contre l’effet de maillage (GOE).

3.5.3 Injection de CO₂ miscible sur grille proche puits

L'écoulement considéré dans ce troisième test prend en compte deux composants (H₂O et CO₂) et deux phases (liquide et gaz dénotées respectivement par l et g). On considère que le constituant CO₂ est miscible dans la phase liquide. Le milieu est anisotrope mais homogène avec un tenseur de perméabilité diagonal dans les directions x, y, z . Le CO₂ est injecté à partir d'un puits dévié dans un réservoir saturé par la phase liquide.

A notre connaissance il n'existe pas de solution analytique à ce problème. L'étude sera donc orientée vers la comparaison des résultats entre la nouvelle méthode VAG et le O-schéma mais également sur la possible influence du type de grille sur ces résultats. Dans la famille des schémas volumes finis, on a retenu le O-schéma pour les très bons résultats qu'il a fournis sur le cas analytique monophasique 2.5.1.

Le modèle d'écoulement se formule 3.2 à l'aide des équations suivantes. On rappelle tout d'abord les équations de conservation (3.2) des deux composants, écrites ici à l'aide des densités massiques et non molaires,

$$\begin{aligned} \text{H}_2\text{O} & : \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_l S_l C_l^{\text{H}_2\text{O}}) + \text{div} \left[-\rho_l C_l^{\text{H}_2\text{O}} \frac{k_{r_l}(S_l)}{\mu_l} \Lambda (\nabla P - \rho_l \mathbf{g}) \right] = 0, \\ \text{CO}_2 & : \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_l S_l C_l^{\text{CO}_2} + \phi \rho_g S_g) \\ & + \text{div} \left[-\rho_l C_l^{\text{CO}_2} \frac{k_{r_l}(S_l)}{\mu_l} \Lambda (\nabla P - \rho_l \mathbf{g}) - \rho_g \frac{k_{r_g}(S_g)}{\mu_g} \Lambda (\nabla P - \rho_g \mathbf{g}) \right] = 0, \end{aligned}$$

où

- la porosité égale $\phi = 0.1$,
- le champ gravitaire \mathbf{g} est tel que $\|\mathbf{g}\| = 10 \text{ kg.m.s}^{-2}$,
- C_α^i dénote la fraction du composant i dans la phase α ,
- les densités et viscosités des phases l et g sont respectivement $\rho_l = 1000 \text{ kg/m}^3$, $\rho_g = 500 \text{ kg/m}^3$, $\mu_l = 3. \cdot 10^{-4} \text{ Pa.s}$ et $\mu_g = 3. \cdot 10^{-5} \text{ Pa.s}$,
- la perméabilité relative est choisie "en croix", i.e. $k_{r_\alpha}(S_\alpha) = S_\alpha$,
- le tenseur de perméabilité Λ est diagonal dont les valeurs sont $\lambda_x = \lambda_y = 1. \cdot 10^{-13} \text{ m}^2$ et $\lambda_z = \frac{\lambda_x}{10}$.

Le problème est donc fermé par l'équation de conservation du volume poreux (3.4) et les lois d'équilibre thermodynamique (3.5),

$$\begin{cases} S_l + S_g = 1, \\ C_l^{\text{H}_2\text{O}} + C_l^{\text{CO}_2} = 1, \end{cases}$$

ainsi que,

$$\begin{cases} (C_l^{\text{CO}_2} - \bar{C}) \leq 0, & S_g \geq 0, \\ (C_l^{\text{CO}_2} - \bar{C}) S_g = 0, \end{cases} \quad (3.54)$$

où \bar{C} est la solubilité ; dans les tests numériques, elle est fixée constante à 0.05. On discute de (3.54) dans la section annexe 3.7 consacrée au flash thermodynamique.

Pour réaliser les simulations, on réutilise les grilles proches puits 3D présentées au chapitre précédent 2.5.1. On dispose donc de deux types de grilles, hexaédrique et hybride comme illustré sur la Figure 2.7.

Le CO_2 est donc injecté à partir du puits dévié sous forme gazeuse à l'intérieur du réservoir saturé par la phase liquide de composition initiale $C_l^{\text{H}_2\text{O}} = 1$. Des conditions aux limites de type Neumann homogène sont imposées sur les faces nord et sud du domaine. Et des conditions de type Dirichlet sont imposées sur les autres frontières en distinguant les frontières extérieures du domaine et le bord puits. La condition de pression hydrostatique suivante est imposée sur les bords extérieurs, et réutilisée pour l'initialisation du réservoir,

$$P(x, y, z) = P_1 \frac{L_x - x}{L_x} + P_2 \frac{x}{L_x} - \rho_l \| \mathbf{g} \| z,$$

avec $P_1 = 240 \cdot 10^5$ Pa, $P_2 = P_1 - 1 \cdot 10^4$ Pa et $(x, y, z) \in [-15, 15] \times [-15, 15] \times [-7.5, 7.5]$. Les saturations et compositions initiales du réservoir sont celles d'une phase liquide pure, i.e. $S_l = 1$ et $C_l^{\text{H}_2\text{O}} = 1$. Le fluide entrant sur les frontières extérieures est également du liquide pur en H_2O .

Pour compléter la description du cas test, une condition de pression hydrostatique est également imposée le long du bord puits,

$$P(x, y, z) = P_{\text{well}} - \rho_g \| \mathbf{g} \| z,$$

avec $P_{\text{well}} = 250 \cdot 10^5$ Pa. Pour rappel, le fluide injecté est du gaz pur en CO_2 vérifiant donc $S_g = 1$ et $C_g^{\text{CO}_2} = 1$.

Le temps final de simulation est fixé à 4 heures de sorte que la phase gaz ait atteint les bords extérieurs du domaine. Après plusieurs tests numériques, et afin d'obtenir une bonne convergence en temps, le pas de temps est fixé constant à 150 secondes pour chacune des grilles ainsi que les deux schémas. La convergence en espace a été regardée en préambule comme montrée dans les proceedings du congrès ECMOR-XII [18] pour le O-schéma.

Dans la suite on présente les résultats obtenus pour chaque schéma sur les grilles les plus fines, le maillage hexaédrique à 74679 mailles, et le maillage hybride à 77599 mailles. Sur la Figure 3.8 a été tracé, en fonction du temps, le taux de variation de la masse totale de CO_2 dans le réservoir. En termes de post-processing, la masse de CO_2 est calculée en parcourant l'ensemble des volumes de contrôle, c'est-à-dire les mailles pour le O-schéma et, nœuds plus mailles pour la méthode VAG.

On remarque que les courbes du schéma VAG sur les deux types de grilles sont quasiment confondues et se situent entre celles du O-schéma laissant ainsi percevoir une plus grande sensibilité du O-schéma au type de maille.

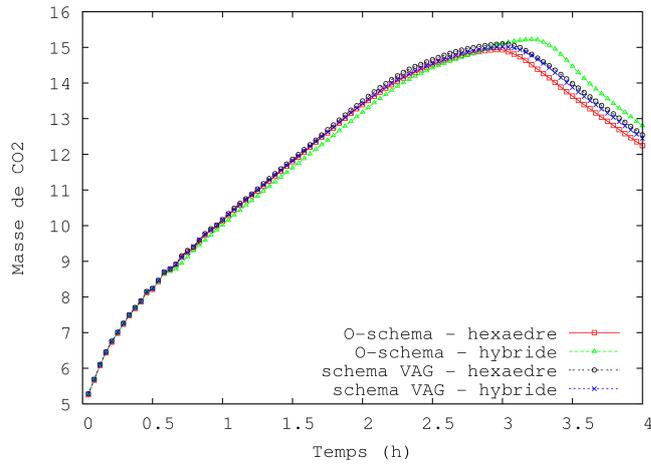


FIGURE 3.8 – Taux de variation de la masse totale de CO_2 dans le réservoir en fonction du temps.

La Figure 3.9 représente, dans une vue en coupe, la fraction massique de CO_2 dans la phase liquide après 3 heures de simulation obtenue avec les deux schémas sur la grille hybride. En comparant les deux sorties graphiques 3.9(a) et 3.9(b) on peut noter que la vitesse de propagation semble similaire pour les deux schémas. Remarquons également que pour le O-schéma le front est légèrement indenté. Cette forme est due aux flux maille-maille et non maille-nœud comme cela est le cas pour VAG.

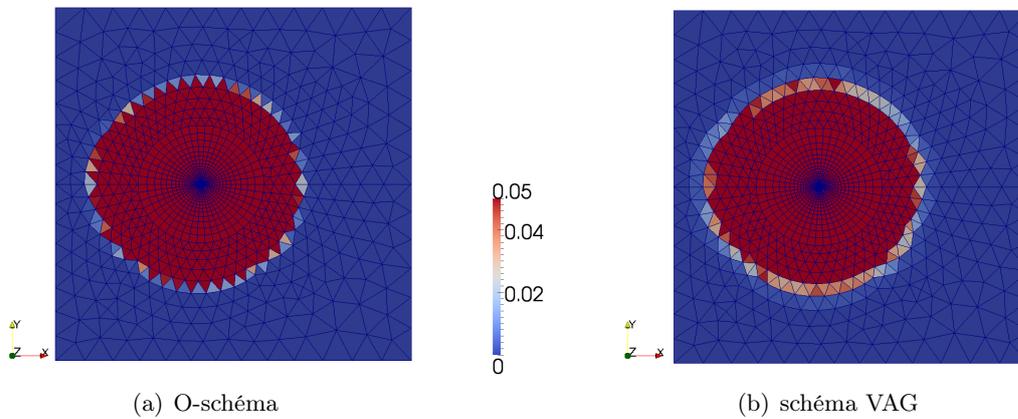


FIGURE 3.9 – Fraction de CO_2 dans la phase liquide après 3 heures de simulation. Maillage hybride. Coupe en $z = 0$ m.

Pour compléter l'étude de ce cas test, signalons une nouvelle fois que les valeurs $\omega = 0.01$ et $\omega = 0.05$ de la formule (3.49) ont été testées sans influence significative sur le résultat aussi bien en termes de précision que de temps CPU. L'absence d'impact sur la convergence du Newton s'explique par le fait que nous ayons fixé un pas de temps constant très faible nous assurant ainsi que les tous petits volumes calculés aux nœuds associés aux mailles proches du puits ne seront pas une difficulté. Le cas test suivant 3.5.4 utilise ces mêmes grilles mais avec

un temps de simulation beaucoup plus important, nous amenant ainsi à considérer de plus grands pas de temps, nous verrons l'influence de ω .

Finalement, la Table 3.1 résume le nombre d'inconnues aux mailles et aux nœuds pour chaque maillage. Comme discuté dans 2.5.3, du fait d'être un schéma centré aux nœuds, le schéma VAG possède un nombre de degrés de liberté réduit sur maillage comprenant des tétraèdres par rapport à des méthodes centrées aux mailles tel que le O-schéma.

	inconnues mailles	inconnues nœuds
grille hexaédrique	74 679	74 800
grille hybride	77 599 - dont 28 704 tétraèdres	37 883

TABLE 3.1 – Nombres d'inconnues aux mailles et aux nœuds pour chaque type de grilles proches puits.

3.5.4 Assèchement et précipitation de sel par injection de CO_2

Ce test s'inspire d'observations réelles faites notamment dans le cadre du projet européen **CO2ReMoVe**. Parmi les sites à l'étude, on trouve Snøhvit, soit Blanche Neige en français, qui est un champ de gaz situé dans la mer de Barents à 140 kilomètres au nord-ouest de Hammerfest, en Laponie norvégienne, voir carte Figure 3.10(a). Le gisement contient un certain pourcentage de CO_2 (entre 5 et 8), qui est extrait lors du traitement du gaz. Alors qu'en règle générale, le CO_2 ainsi produit est simplement rejeté dans l'atmosphère, à Snøhvit, pour réduire l'impact du projet en termes d'effet de serre, il est, depuis 2008, réinjecté dans une formation souterraine, l'aquifère salin de Tubaen, à raison de 700000 tonnes par an. Cependant une perte d'injectivité est observée qui pourrait s'expliquer par la précipitation de sel minéral le long des puits, altérant ainsi leur capacité d'injection.

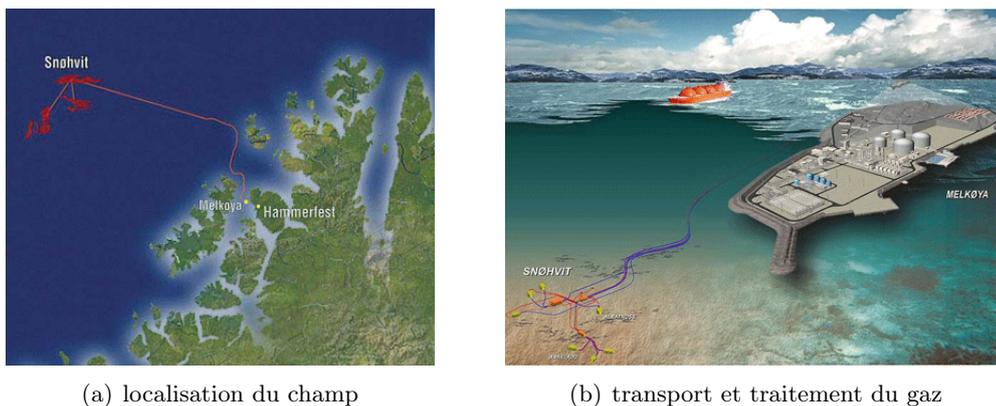


FIGURE 3.10 – Champ de gaz Snøhvit. Images Statoil.

Pour modéliser ce phénomène on considère un écoulement avec trois composants (H_2O , CO_2 , *sel*) et trois phases (liquide, gaz et minéral dénotées respectivement par l , g et m). Les constituants H_2O et CO_2 peuvent être présents dans les phases l et g et le *sel* dans les phases l et m . Le milieu est considéré isotrope homogène. On cherche donc à simuler l'assèchement et la précipitation de sel dans un aquifère salin par injection de CO_2 via un puits dévié.

Le modèle d'écoulement se formule à l'aide des équations suivantes. Tout d'abord les équations de conservation (3.2) des trois composants,

$$\text{H}_2\text{O} : \frac{\partial}{\partial t} \phi (\rho_l S_l C_l^{\text{H}_2\text{O}} + \rho_g S_g C_g^{\text{H}_2\text{O}}) + \text{div} \left[\rho_l C_l^{\text{H}_2\text{O}} \frac{k_{r_l}(S_l)}{\mu_l} \mathbf{V}_l + \rho_g C_g^{\text{H}_2\text{O}} \frac{k_{r_g}(S_g)}{\mu_g} \mathbf{V}_g \right] = 0,$$

$$\text{CO}_2 : \frac{\partial}{\partial t} \phi (\rho_l S_l C_l^{\text{CO}_2} + \rho_g S_g C_g^{\text{CO}_2}) + \text{div} \left[\rho_l C_l^{\text{CO}_2} \frac{k_{r_l}(S_l)}{\mu_l} \mathbf{V}_l + \rho_g C_g^{\text{CO}_2} \frac{k_{r_g}(S_g)}{\mu_g} \mathbf{V}_g \right] = 0,$$

$$\text{sel} : \frac{\partial}{\partial t} \phi (\rho_l S_l C_l^{\text{sel}} + \rho_m S_m) + \text{div} \left[\rho_l C_l^{\text{sel}} \frac{k_{r_l}(S_l)}{\mu_l} \mathbf{V}_l \right] = 0,$$

où \mathbf{V}_α , pour $\alpha = l$ ou g , est la vitesse de Darcy (3.3). La diffusion du sel dans la phase liquide est négligée. Le problème est classiquement fermé par des équations de conservation,

$$\begin{cases} S_l + S_g + S_m = 1, \\ C_l^{\text{H}_2\text{O}} + C_l^{\text{CO}_2} + C_l^{\text{sel}} = 1, \\ C_g^{\text{H}_2\text{O}} + C_g^{\text{CO}_2} = 1, \end{cases}$$

et des lois d'équilibre thermodynamique décrites par un flash triphasique détaillé dans la section annexe consacrée au flash thermodynamique 3.7.

Pour réaliser les simulations, on réutilise les grilles proches puits 3D présentées au chapitre précédent 2.5.1. On dispose donc de deux types de grilles, hexaédrique et hybride comme illustré sur la Figure 2.7. Tout comme dans le test précédent 3.5.3, les simulations ont été réalisées sur les grilles les plus fines de chaque famille. L'objectif est donc de comparer les résultats entre la nouvelle méthode VAG et le O-schéma mais également sur la possible influence du type de grille.

Le jeu de données est issu d'un calage entre expériences de laboratoire et tests numériques réalisé par Roland Masson et Yannick Peysson. Ce jeu de données est le suivant,

- la porosité est égale à $\phi = 0.2$,
- le champ gravitaire \mathbf{g} est tel que $\|\mathbf{g}\| = 9.81 \text{ kg.m.s}^{-2}$,
- le tenseur de perméabilité Λ est diagonale constant à 1.10^{-12} m^2 ,
- les densités et viscosités de la phase liquide sont calculées par corrélation et celles de la phase gaz par interpolation linéaire en pression. La densité du minéral est fixée à $\rho_m = 2173 \text{ kg/l}$.
- les perméabilités relatives des phases $\alpha = l, g$ sont de type Van Genuchten,

$$k_{r,\alpha}(\tilde{S}_\alpha) = \begin{cases} k_{r,\alpha}^{\text{max}} \left(\frac{\tilde{S}_\alpha - S_{r,\alpha}}{1 - S_{r,\alpha}} \right)^{e_\alpha} & \text{si } \tilde{S}_\alpha \in [S_{r,\alpha}, 1] \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

avec les saturations réduites,

$$\tilde{S}_g = \frac{S_g}{S_g + S_l}, \quad \tilde{S}_l = \frac{S_l}{S_g + S_l}, \quad (3.55)$$

et les données suivantes,

$$S_{r,l} = 0.3, \quad k_{r,l}^{max} = 1., \quad e_l = 5,$$

$$S_{r,g} = 0.0, \quad k_{r,g}^{max} = 1., \quad e_g = 2.$$

Remarque. Il est nécessaire de calculer des saturations réduites \tilde{S}_α pour $\alpha = l, g$ (3.55) pour prendre en compte la vraie porosité $\tilde{\phi}$ qui est donnée par $\tilde{\phi} = \phi(1 - S_m)$. Nous avons alors l'égalité $\tilde{\phi}\tilde{S}_\alpha = \phi S_\alpha$ qui garantit la cohérence des équations de conservations. De même la conservation du volume poreux est clairement vérifiée puisque $\tilde{S}_l + \tilde{S}_g = 1$ par construction.

Le CO₂ est donc injecté à partir du puits dévié à l'intérieur de l'aquifère salin. Des conditions aux limites de type Neumann homogène sont imposées sur les faces nord et sud du domaine. Et des conditions de type Dirichlet sont imposées sur les autres frontières en distinguant les frontières extérieures du domaine et le bord puits. La condition de pression hydrostatique suivante est imposée le long du bord puits,

$$P(x, y, z) = P_{\text{well}} - \rho_g \|\mathbf{g}\| z,$$

avec $P_{\text{well}} = 300 \cdot 10^{+5}$ Pa. Pour rappel, le fluide injecté est du gaz pur en CO₂ vérifiant donc $S_g = 1$ et $C_g^{\text{CO}_2} = 1$. Une condition de pression hydrostatique est également imposée sur les bords extérieurs, et réutilisée pour l'initialisation du réservoir,

$$P(x, y, z) = P_1 - \rho_l \|\mathbf{g}\| z,$$

avec $P_1 = P_{\text{well}} - 5 \cdot 10^{+4}$ Pa. Les saturations et compositions initiales du réservoir sont les suivantes, $S_l = 1$, $C_l^{\text{H}_2\text{O}} = 0.84$ et $C_l^{\text{CO}_2} = 0.16$. Le fluide entrant sur les frontières extérieures est défini de la même façon.

Le temps final de simulation est fixé à 8 jours de sorte à voir apparaître du minéral dans la moitié de la zone radiale. Le pas de temps initial est fixé à 10 secondes, le pas de temps maximal à 10000 secondes et la marche en temps est de 20%. On utilise cette même discrétisation en temps pour chacune des grilles et chacun des schémas. Le résultat du O-schéma sur la grille hybride n'a malheureusement pas pu être obtenu, en effet le dimensionnement des tableaux nécessaires à la simulation était trop important.

Sur la grille hexaédrique la simulation calculée par le O-schéma nécessite 111 itérations en temps et 4 échecs de pas de temps ont été observés. Le nombre moyen d'itérations de Newton par pas de temps réussi est de 5 et le nombre moyen d'itérations du solveur GMRES par Newton est de 34. D'un autre côté, pour le schéma VAG sur cette même grille hexaédrique, nous avons dans un premier temps testé la valeur $\omega = 0.05$ pour la formule (3.49) de redistribution du volume, ceci aux vues des bons résultats obtenus sur les cas précédents. Cependant avec cette valeur de ω , la simulation avec VAG est très coûteuse en temps CPU puisqu'elle nécessite 664 itérations en temps, 165 échecs de pas de temps ayant été observés. Le nombre moyen d'itérations de Newton par pas de temps réussi est de 9 et le nombre moyen d'itérations du solveur GMRES par Newton est de 36. Ce surcoût en itérations en temps s'explique par la nécessité d'utiliser une toute petite échelle de temps pour saturer les tous petits volumes poreux associés par la méthode VAG aux nœuds des premières mailles du bord puits. Pour

contourner ce problème, nous avons calculer la valeur de ω_0 (3.51) assurant une homogénéité dans les volumes minimaux aux nœuds et aux mailles. On a ainsi trouvé $\omega_0 \approx 0.4$. Les résultats de la simulation avec $\omega = 0.4$ pour VAG sont alors beaucoup plus performants. En effet, 141 itérations en temps ont été comptabilisées ainsi que 13 échecs de pas de temps. Le nombre moyen d'itérations de Newton par pas de temps réussi est descendu à 7 et le nombre moyen d'itérations du solveur GMRES par Newton est toujours de 36. Il est important de souligner qu'entre ces deux valeurs de ω , l'amélioration de la performance ne s'est pas faite au détriment de la précision. En effet, la qualité des approximations fournies par le schéma VAG est équivalente dans les deux cas puisque les courbes des quantités en temps, en cumulée et en taux (comme celles illustrées sur la Figure 3.11) se superposent. Sans surprise, des observations similaires ont été faites lors de la mise en œuvre du schéma VAG sur la grille hybride. Les résultats présentés ci-après pour la méthode VAG le sont donc pour $\omega = 0.4$.

Sur la Figure 3.11 a été tracé, en fonction du temps, l'évolution du taux de variation de la masse d'un constituant dans le réservoir, le constituant CO_2 dans les phases liquide et gaz d'un côté 3.11(a) et le *sel* dans la phase minéral de l'autre 3.11(b). Notons qu'en termes de post-processing, ces masses sont calculées en parcourant l'ensemble des volumes de contrôle, c'est-à-dire les mailles pour le O-schema et, nœuds plus mailles pour la méthode VAG. On remarque tout de suite que toutes les simulations convergent vers la même solution. Les oscillations observées sur la Figure 3.11(b) est un phénomène bien connu du à l'apparition de la phase minérale dans les volumes de contrôle successifs lorsque que le composant *sel* atteint sa solubilité.

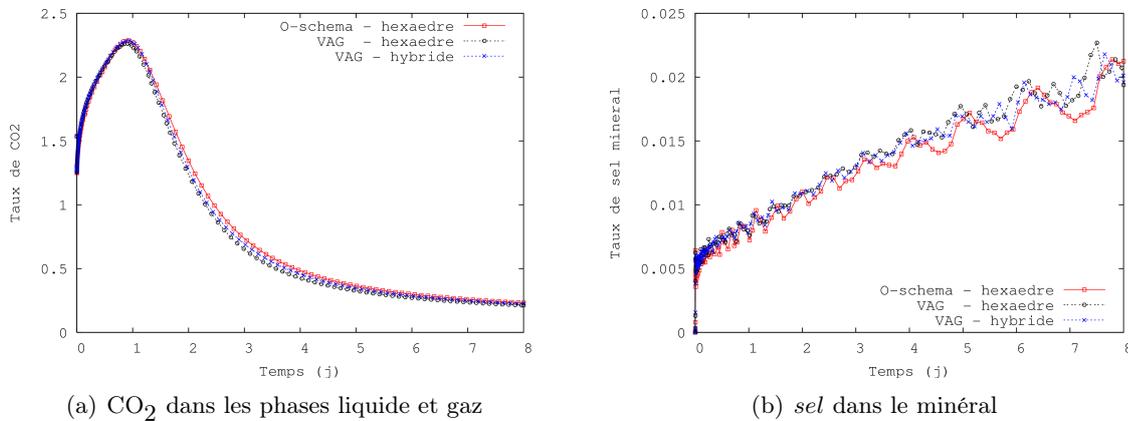
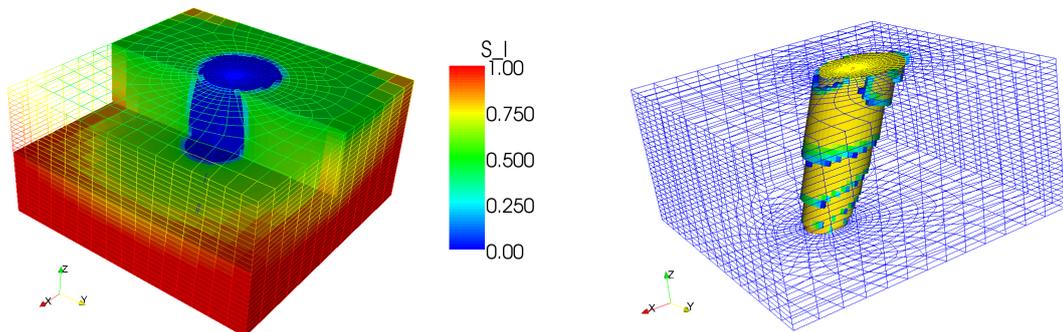


FIGURE 3.11 – Evolution du taux de variation de la masse totale d'un composant dans le réservoir en fonction du temps.

La Figure 3.12(b) montre le front de saturation de la phase liquide en fin de simulation, illustrant ainsi l'assèchement autour du puits. Le dépôt de sel autour du puits est quant à lui illustré par la Figure 3.12(b) où l'on peut observer le front de saturation en minéral, tel que $S_m > 0.1\%$, également en fin de simulation. Ces résultats sont ceux obtenus avec la méthode VAG sur le maillage hexaédrique.



(a) saturation résiduelle de la phase liquide \tilde{S}_l (b) saturation en minéral S_m supérieur à 0.1%

FIGURE 3.12 – Fronts de saturations en fin de simulation.

3.6 Conclusion

Ce chapitre décrit une formulation générique des écoulements compositionnels polyphasiques en milieux poreux. La méthode adoptée pour la discrétisation du modèle a initialement été développée pour la famille des schémas volumes finis linéaires centrés aux mailles.

Cependant nous avons montré qu'il est possible d'adapter le schéma VAG à ce formalisme, qui est pourtant un schéma gradient centré aux nœuds, et cela sans avoir à définir de maillage dual. Pour ce faire, les volumes de contrôle sont définis à la fois comme les mailles et les nœuds du maillage. Il est alors possible de définir des flux numériques entre ces volumes. Un point clef de la méthode est alors d'associer un volume poreux à chaque volume de contrôle. Une méthode de redistribution du volume poreux total conservative et robuste vis à vis des hétérogénéités a été proposée. Cette méthodologie nous a donc permis de mettre en œuvre le schéma VAG sur des écoulements polyphasiques, nous permettant ainsi de poursuivre la comparaison des schémas, schéma volumes finis multi-points et schéma gradient VAG, entamée au premier chapitre.

Les résultats obtenus par le nouveau schéma VAG sur les différents cas tests sont satisfaisants aussi bien en terme de précision, encombrement mémoire et temps CPU notamment sur des maillages tétraédriques où les nœuds sont en nombre largement inférieur en comparaison des mailles.

Pour valider la méthode des tests complémentaires doivent être fait. A titre d'exemple, on peut citer les cas tests type SAGD - Steam Assisted Gravity Drainage - où l'inconnue température doit être considérée. Dans un premier temps, il peut également être envisageable d'approfondir la physique des cas tests existants notamment en prenant en compte les phénomènes de capillarité.

Enfin en termes de développement informatique, l'élimination des inconnues aux mailles dans le système linéaire issu de la méthode de Newton est un point qui reste encore à accomplir pour ainsi réaliser des comparaisons en termes de performance plus rigoureuses.

3.7 Annexe – Flash thermodynamique

Le flash thermodynamique est un outil indispensable pour la simulation des écoulements compositionnels polyphasiques car il permet, à pression, température et composition du mélange, données de déterminer les phases en présence, ainsi que leurs compositions. Par conséquent le flash est fondamental pour la formulation de type Coats 3.2 retenue puisque le jeu d'inconnues dépend des phases présentes.

Pour définir rigoureusement le flash, nous devons introduire, Z^i la fraction molaire totale d'un composant $i \in \mathcal{C}$,

$$Z^i = \frac{\sum_{\alpha \in \Phi_I} \zeta_\alpha S_\alpha C_\alpha^i}{\sum_{\alpha \in \Phi_I} \zeta_\alpha S_\alpha}, \quad i \in \mathcal{C}/\tilde{\mathcal{C}}_I,$$

avec $Z^i = 0$, $i \in \tilde{\mathcal{C}}_I$ et vérifiant $\sum_{i \in \mathcal{C}} Z^i = 1$.

En pratique, on calcule, sur chaque volume de contrôle $X \in \mathcal{M}$, les fractions molaires totales comme suit, en tenant compte des $m_{j,X}$ des composants $j \in \tilde{\mathcal{C}}_{I_X}$,

$$Z_X^i = \frac{\sum_{\alpha \in \Phi_{I_X} \cap \Phi_i} \zeta_\alpha(P_X, C_{\alpha,X}) S_{\alpha,X} C_{\alpha,X}^i + \sum_{j \in \tilde{\mathcal{C}}_{I_X} \cap \{i\}} m_{j,X}}{\sum_{j \in \mathcal{C}} \sum_{\alpha \in \Phi_{I_X} \cap \Phi_j} \zeta_\alpha(P_X, C_{\alpha,X}) S_{\alpha,X} C_{\alpha,X}^j + \sum_{j \in \tilde{\mathcal{C}}_{I_X}} m_{j,X}},$$

qu'on projette sur un simplexe comme suit,

$$Z_X \leftarrow \text{Projection}_{\{U \geq 0 \mid \sum_{i \in \mathcal{C}} U_i = 1\}} Z_X,$$

où Z_X dénote le vecteur des $(Z_X^i)_i$.

Le flash thermodynamique peut alors être vu comme une boîte à outils définie par,

$$\text{Flash} [P , T , (Z^i)_i] \mapsto I , (C_\alpha^i)_{\alpha,i} , (\theta_\alpha)_\alpha .$$

Les données d'**entrée** sont donc la pression P , la température T (qu'on omet par la suite car on travail en isotherme), et la composition totale du mélange $(Z^i)_i$. Et en **sortie**, le flash renvoie l'ensemble des phases présentes I , leurs compositions $(C_\alpha^i)_{\alpha,i}$ et les fractions molaires du mélange dans les phases $(\theta_\alpha)_\alpha$.

Il existe plusieurs modèles thermodynamiques pour ce flash. On peut citer à titre d'exemple le flash avec égalité des fugacités qui sont calculées à l'aide d'équation d'état (EOS). Mais une méthode très répandue est le flash thermodynamique par constante d'équilibre. Ce modèle est historique et empirique s'appuyant sur des tables de valeurs. C'est cette approche que nous avons retenue.

Le flash thermodynamique n'est pas générique, sa résolution étant étroitement liée au cas test, c'est pourquoi nous associons la présentation des flashes utilisés à celle des cas tests mise en place 3.5. On présente ainsi dans un premier temps les généralités d'un flash diphasique et sa mise en œuvre sur les cas tests diphasiques étudiés 3.5.1-3.5.2-3.5.3. Nous terminerons par le flash triphasique et notamment le cas particulier correspondant au dernier test numérique 3.5.4.

3.7.1 Flash diphasique

Généralités

On considère donc un écoulement diphasique, les phases sont notées α_1 et α_2 , et à N_C constituants. On suppose donné les compositions totales Z^i , $i \in \mathcal{C}$, vérifiant $0 \leq Z^i \leq 1$ et $\sum_{i \in \mathcal{C}} Z^i = 1$, et les constantes d'équilibre K^i . Ces valeurs K^i dépendent généralement de la pression P et sont évaluées par interpolation via des tables empiriques ou par calage avec un modèle aux EOS. On suppose $K^i \geq 0$, pour tout $i \in \mathcal{C}$. On cherche alors à déterminer θ_{α_1} et θ_{α_2} , et les compositions $C_{\alpha_1}^i, C_{\alpha_2}^i$, $i \in \mathcal{C}$, tel que,

$$\left\{ \begin{array}{ll} C_{\alpha_2}^i - K^i C_{\alpha_1}^i = 0, \quad i \in \mathcal{C}, & \text{équilibre thermodynamique,} \\ \sum_{i \in \mathcal{C}} C_{\alpha_1}^i = 1 & \text{bilan des concentrations dans la phase } \alpha_1, \\ \sum_{i \in \mathcal{C}} C_{\alpha_2}^i = 1 & \text{bilan des concentrations dans la phase } \alpha_2 \\ \theta_{\alpha_1} C_{\alpha_1}^i + \theta_{\alpha_2} C_{\alpha_2}^i = Z^i, \quad i \in \mathcal{C}, & \text{équilibre matériel,} \end{array} \right. \quad (3.56)$$

avec $C_{\alpha_1}^i \geq 0$ et $C_{\alpha_2}^i \geq 0$. Nous avons donc $2N_C + 2$ équations indépendantes et également $2N_C + 2$ inconnues. Le contexte I étant déterminé selon les signes de θ_{α_1} et θ_{α_2} . Notons d'ailleurs que ces relations impliquent $\theta_{\alpha_1} + \theta_{\alpha_2} = 1$; on note ainsi pour simplifier par la suite $\theta = \theta_{\alpha_2}$.

On autorise les cas $K^i = 0$ pour les constituants i absents de la phase α_2 et $K^i = +\infty$ pour les constituants i absents de la phase α_1 .

On définit alors l'ensemble, $\bar{\mathcal{C}} = \{i \in \mathcal{C} | K^i \neq 1 \text{ et } Z^i \neq 0\}$. Alors si l'ensemble $\bar{\mathcal{C}}$ est vide, on a $C_{\alpha_1}^i = C_{\alpha_2}^i = Z^i$ pour tout $i \in \mathcal{C}$, et l'état des phases est indéterminé, θ est donc quelconque dans l'intervalle fermé $[0, 1]$.

D'autre part, si $\bar{\mathcal{C}} \neq \emptyset$, alors on considère la fonction de Radchford Rice définie par,

$$F(\theta) = \sum_{i \in \bar{\mathcal{C}}} \frac{Z^i (K^i - 1)}{(K^i - 1)\theta + 1}. \quad (3.57)$$

Alors le système d'équations (3.56) équivaut à déterminer θ vérifiant $F(\theta) = 0$. Cette fonction F (3.57), illustrée sur la Figure 3.13, a N_C pôles données par $\theta_i = \frac{1}{1-K^i}$, pour $i \in \bar{\mathcal{C}}$ tel que soit $\theta_i \leq 0$ ou $\theta_i \geq 1$.

On note alors,

$$\left\{ \begin{array}{ll} K^{\max} = \sup_{i \in \bar{\mathcal{C}}} K^i, & \text{et } \theta_0 = \frac{1}{1 - K^{\max}}, \\ K^{\min} = \inf_{i \in \bar{\mathcal{C}}} K^i, & \text{et } \theta_1 = \frac{1}{1 - K^{\min}}. \end{array} \right.$$

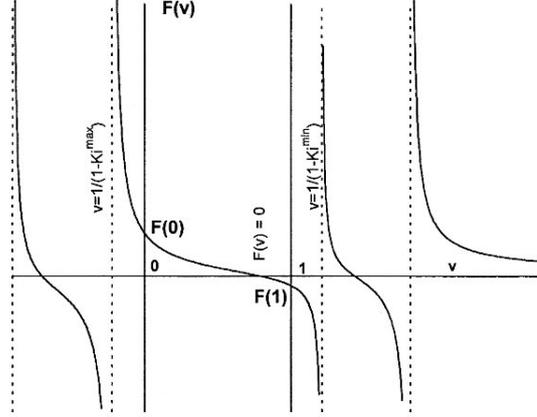


FIGURE 3.13 – Représentation graphique de la fonction de Radchford Rice.

On regarde alors la méthode dite du **flash étendu** qui consiste à ne pas se limiter à l'intervalle $[0, 1]$ pour déterminer θ solution de $F(\theta) = 0$. Cette méthode permet d'assurer la bonne continuité de toutes les grandeurs utilisées lors d'un changement de contexte en conservant l'égalité,

$$C_{\alpha_2}^i - K^i C_{\alpha_1}^i = 0, i \in \mathcal{C}.$$

On considère ainsi trois configurations possibles selon les valeurs de θ_0 et θ_1 .

- Si $\theta_0 \geq 1$ (i.e. si $K^{\max} \leq 1$) alors le flash étendu n'a pas de solutions $C_{\alpha_1}^i$ et $C_{\alpha_2}^i$ positives qu'à la limite $\theta \rightarrow -\infty$ et le flash donne un état monophasique α_1

$$\begin{cases} \theta = -\infty, \\ C_{\alpha_1}^i = Z^i, i \in \mathcal{C}. \end{cases}$$

- Sinon si $\theta_1 \leq 0$ (i.e. $K^{\min} \geq 1$) alors le flash étendu n'a de solutions $C_{\alpha_1}^i$ et $C_{\alpha_2}^i$ positives qu'à la limite $\theta \rightarrow +\infty$ et le flash donne un état monophasique α_2

$$\begin{cases} \theta = +\infty, \\ C_{\alpha_2}^i = Z^i, i \in \mathcal{C}. \end{cases}$$

- Sinon l'équation de Radchford Rice possède une solution unique dans l'intervalle $[\theta_0, \theta_1]$ pour laquelle $C_{\alpha_1}^i$ et $C_{\alpha_2}^i$ sont tous deux positifs. Une méthode de Newton sur F converge ainsi dans l'intervalle $[\theta_0, \theta_1]$ où F est continue décroissante.

$$\begin{cases} \theta = \text{l'unique solution de } F(\theta) = 0 \text{ dans l'intervalle } [\theta_0, \theta_1], \\ C_{\alpha_1}^i = \frac{Z^i}{(K^i - 1)\theta + 1}, \\ C_{\alpha_2}^i = K^i C_{\alpha_1}^i. \end{cases}$$

Application aux cas tests diphasiques

Les deux premiers cas tests 3.5.1 et 3.5.2 considèrent un écoulement diphasique immiscible. Dans un tel contexte, le flash est trivial car il n'y a pas d'équations d'équilibre. On détermine le contexte, i.e les phases en présence en regardant les saturations.

Le troisième cas test 3.5.3 est, rappelons-le, diphasique liquide l - gaz g , avec la miscibilité du CO_2 dans la phase liquide. L'équilibre en diphasique l - g est donc le suivant,

$$\begin{cases} C_l^{\text{CO}_2} = K^{\text{CO}_2} = \bar{C}, & \text{équilibre thermodynamique,} \\ S_g \geq 0, & \text{présence de gaz.} \end{cases}$$

En monophasique l , on a donc simplement,

$$\begin{cases} C_l^{\text{CO}_2} \leq K^{\text{CO}_2} = \bar{C} \\ S_g = 0. \end{cases}$$

Le contexte monophasique g n'est pas considéré car on suppose la phase liquide l toujours présente. Il a donc été possible de réécrire simplement l'équilibre thermodynamique de l'écoulement par la contrainte de complémentarité (3.54) qui ne nécessite pas de calculer les compositions totales Z^i , $i \in \mathcal{C}$.

3.7.2 Flash triphasique

Généralités

On considère donc un écoulement triphasique, les phases sont notées α_1 , α_2 et α_3 , et à $N_{\mathcal{C}}$ constituants. On suppose donné les compositions totales Z^i , $i \in \mathcal{C}$, vérifiant $0 \leq Z^i \leq 1$ et $\sum_{i \in \mathcal{C}} Z^i = 1$, et les constantes d'équilibre $K_{\alpha_k \alpha_{k'}}^i \geq 0$, pour tout $i \in \mathcal{C}$. On cherche alors à déterminer les $(\theta_{\alpha})_{\alpha}$ et les compositions $(C_{\alpha}^i)_{\alpha}$, $i \in \mathcal{C}$, tel que,

$$\left\{ \begin{array}{ll} C_{\alpha_2}^i - K_{\alpha_2 \alpha_1}^i C_{\alpha_1}^i = 0, i \in \mathcal{C}, & \text{équilibre thermodynamique,} \\ C_{\alpha_2}^i - K_{\alpha_2 \alpha_3}^i C_{\alpha_3}^i = 0, i \in \mathcal{C}, & \text{équilibre thermodynamique,} \\ \sum_{i \in \mathcal{C}} C_{\alpha_1}^i = 1 & \text{bilan des concentrations dans la phase } \alpha_1, \\ \sum_{i \in \mathcal{C}} C_{\alpha_2}^i = 1 & \text{bilan des concentrations dans la phase } \alpha_2 \\ \sum_{i \in \mathcal{C}} C_{\alpha_3}^i = 1 & \text{bilan des concentrations dans la phase } \alpha_3 \\ \theta_{\alpha_1} C_{\alpha_1}^i + \theta_{\alpha_2} C_{\alpha_2}^i + \theta_{\alpha_3} C_{\alpha_3}^i = Z^i, i \in \mathcal{C}, & \text{équilibre matériel,} \end{array} \right. \quad (3.58)$$

avec toutes les concentrations $C_\alpha^i \geq 0$. Nous avons donc $3N_C + 3$ équations indépendantes et également $3N_C + 3$ inconnues. Le contexte I étant déterminé selon les signes des $(\theta_\alpha)_\alpha$. Notons d'ailleurs que ces relations impliquent $\theta_{\alpha_1} + \theta_{\alpha_2} + \theta_{\alpha_3} = 1$.

Une approche possible est alors d'éliminer l'inconnue $C_{\alpha_2}^i$ par,

$$C_{\alpha_2}^i = \frac{Z^i}{\theta_{\alpha_3}(K_{\alpha_2\alpha_3}^i - 1) + \theta_{\alpha_1}(K_{\alpha_2\alpha_1}^i - 1) + 1}.$$

Le problème se ramène donc à résoudre la système final suivant,

$$\left\{ \begin{array}{l} E_{\alpha_1}(\theta_{\alpha_1}, \theta_{\alpha_3}) = \sum_{i \in \mathcal{C}} C_{\alpha_1}^i - \sum_{i \in \mathcal{C}} C_{\alpha_2}^i = 0 = \frac{(K_{\alpha_2\alpha_1}^i - 1)Z^i}{\theta_{\alpha_3}(K_{\alpha_2\alpha_3}^i - 1) + \theta_{\alpha_1}(K_{\alpha_2\alpha_1}^i - 1) + 1}, \\ E_{\alpha_3}(\theta_{\alpha_1}, \theta_{\alpha_3}) = \sum_{i \in \mathcal{C}} C_{\alpha_3}^i - \sum_{i \in \mathcal{C}} C_{\alpha_2}^i = 0 = \frac{(K_{\alpha_2\alpha_3}^i - 1)Z^i}{\theta_{\alpha_3}(K_{\alpha_2\alpha_3}^i - 1) + \theta_{\alpha_1}(K_{\alpha_2\alpha_1}^i - 1) + 1}. \end{array} \right.$$

Un algorithme semblable à celui du flash diphasique permet alors de résoudre le système aux inconnues θ_{α_1} et θ_{α_3} , puis d'en déduire le calcul de $C_{\alpha_2}^i$, puis de $C_{\alpha_1}^i$ et de $C_{\alpha_3}^i$.

Application au test numérique

On décrit ici le flash triphasique mis en place pour le dernier cas test 3.5.4. On rappelle qu'il s'agit d'un écoulement à trois composants (H_2O , CO_2 , *sel*) et trois phases (liquide, gaz et minéral dénotées respectivement par l , g et m). Les constituants H_2O et CO_2 peuvent être présents dans les phases l et g , et le *sel* dans les phases l et m .

On a donc trois constantes d'équilibre $K_{gl}^{\text{H}_2\text{O}}$, $K_{gl}^{\text{CO}_2}$ et K^{sel} qui vérifient,

$$\left\{ \begin{array}{ll} C_g^{\text{H}_2\text{O}} = K_{gl}^{\text{H}_2\text{O}} C_l^{\text{H}_2\text{O}} & \text{si présence des phases } l \text{ et } g, \\ C_l^{\text{CO}_2} = K_{lg}^{\text{CO}_2} C_g^{\text{CO}_2} & \text{si présence des phases } l \text{ et } g, \\ C_l^{sel} = K^{sel} & \text{si présence des phases } l \text{ et } m. \end{array} \right.$$

Les valeurs $K_{gl}^{\text{H}_2\text{O}} := K^{\text{H}_2\text{O}} = 0.025$, $K_{lg}^{\text{CO}_2} := K^{\text{CO}_2} = 0.03$ et $K^{sel} = 0.39$ ont été fixées pour les expériences numériques. Notons que les constantes d'équilibres K^i sont constantes et donc indépendantes de la pression P .

Le flash triphasique à pression P , et compositions totales $Z^{\text{H}_2\text{O}}$, Z^{CO_2} , Z^{sel} données, est régi par le système d'équations suivant,

$$\left\{ \begin{array}{l} Z^{\text{H}_2\text{O}} = \theta_g C_g^{\text{H}_2\text{O}} + \theta_l C_l^{\text{H}_2\text{O}}, \\ Z^{\text{CO}_2} = \theta_g C_g^{\text{CO}_2} + \theta_l C_l^{\text{CO}_2}, \\ Z^{\text{sel}} = \theta_l C_l^{\text{sel}} + \theta_m, \\ \\ \theta_g + \theta_l + \theta_m = 1, \\ \\ C_l^{\text{H}_2\text{O}} + C_l^{\text{CO}_2} + C_l^{\text{sel}} = 1, \\ C_g^{\text{H}_2\text{O}} + C_g^{\text{CO}_2} = 1, \\ \\ C_g^{\text{H}_2\text{O}} = K^{\text{H}_2\text{O}} C_l^{\text{H}_2\text{O}}, \\ C_l^{\text{CO}_2} = K^{\text{CO}_2} C_g^{\text{CO}_2}, \\ C_l^{\text{sel}} = K^{\text{sel}}, \\ \\ C_l^{\text{H}_2\text{O}} \geq 0, C_l^{\text{CO}_2} \geq 0, C_l^{\text{sel}} \geq 0, \\ C_g^{\text{H}_2\text{O}} \geq 0, C_g^{\text{CO}_2} \geq 0. \end{array} \right.$$

Il est possible d'expliciter la solution analytique à ce problème. Par souci de clarté on note alors,

$$D^{\text{CO}_2} = \frac{1 - K^{\text{H}_2\text{O}} (1 - K^{\text{sel}})}{1 - K^{\text{H}_2\text{O}} K^{\text{CO}_2}}.$$

La solution analytique est alors donnée par,

$$\left\{ \begin{array}{l} C_l^{\text{sel}} = K^{\text{sel}}, \\ C_g^{\text{CO}_2} = D^{\text{CO}_2}, \\ C_l^{\text{CO}_2} = K^{\text{CO}_2} D^{\text{CO}_2}, \\ C_l^{\text{H}_2\text{O}} = 1 - K^{\text{sel}} - K^{\text{CO}_2} D^{\text{CO}_2}, \\ C_g^{\text{H}_2\text{O}} = K^{\text{H}_2\text{O}} (1 - K^{\text{sel}} - K^{\text{CO}_2} D^{\text{CO}_2}). \end{array} \right.$$

On supposera alors que les constantes d'équilibre sont telles que la positivité des compositions soit vérifiée. Les fractions $(\theta_\alpha)_{\alpha=l,g,m}$ peuvent alors se déduire de ces concentrations. Les frontières de la zone triphasique sont donc données par les droites représentées sur le diagramme de phase $(Z^{\text{CO}_2}, Z^{\text{sel}})$ illustré sur la Figure 3.14 et passant par,

- $\theta_l = 1, \theta_g = \theta_m = 0 \implies E_5 = (Z^{\text{CO}_2} = K^{\text{CO}_2} D^{\text{CO}_2}, Z^{\text{sel}} = K^{\text{sel}})$,
- $\theta_g = 1, \theta_l = \theta_m = 0 \implies E_3 (Z^{\text{CO}_2} = D^{\text{CO}_2}, Z^{\text{sel}} = 0)$,
- $\theta_l = 1, \theta_g = \theta_m = 0 \implies (Z^{\text{CO}_2} = 0, Z^{\text{sel}} = 1)$.

Les frontières des zones diphasiques sont alors déterminées en résolvant les trois flashes étendus diphasiques. Par la suite, on réutilise abusivement les mêmes notations.

Le flash diphasique liquide–gaz est régi par le système d'équations suivant,

$$\left\{ \begin{array}{l} Z^{\text{H}_2\text{O}} = \theta_g C_g^{\text{H}_2\text{O}} + \theta_l C_l^{\text{H}_2\text{O}}, \\ Z^{\text{CO}_2} = \theta_g C_g^{\text{CO}_2} + \theta_l C_l^{\text{CO}_2}, \\ Z^{\text{sel}} = \theta_l C_l^{\text{sel}}, \\ \\ \theta_l + \theta_g = 1, \\ \\ C_l^{\text{H}_2\text{O}} + C_l^{\text{CO}_2} + C_l^{\text{sel}} = 1, \\ C_g^{\text{H}_2\text{O}} + C_g^{\text{CO}_2} = 1, \\ \\ C_g^{\text{H}_2\text{O}} = K^{\text{H}_2\text{O}} C_l^{\text{H}_2\text{O}}, \\ C_l^{\text{CO}_2} = K^{\text{CO}_2} C_g^{\text{CO}_2}, \end{array} \right.$$

La solution de ce flash est obtenue à l'aide l'équation de Radchford Rice (3.57) que l'on peut expliciter comme suit,

$$F(\theta_l) = \theta_l^2 + \theta_l [\delta_{\text{H}_2\text{O}}(1 - Z^{\text{H}_2\text{O}}) + \delta_{\text{CO}_2}(1 - Z^{\text{CO}_2})] + \delta_{\text{H}_2\text{O}}\delta_{\text{CO}_2}Z^{\text{sel}},$$

avec $\delta_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{K^{\text{H}_2\text{O}}}{1 - K^{\text{H}_2\text{O}}}$ et $\delta_{\text{CO}_2} = \frac{1}{K^{\text{CO}_2} - 1}$. La fraction θ_l est donc déterminée en résolvant analytiquement l'équation du second degré $F(\theta_l) = 0$. On en déduit donc simplement θ_g ainsi que les compositions des phases,

$$\left\{ \begin{array}{l} C_l^{\text{H}_2\text{O}} = \frac{Z^{\text{H}_2\text{O}}}{\theta_l + \theta_g K^{\text{H}_2\text{O}}} \\ C_g^{\text{H}_2\text{O}} = \frac{Z^{\text{H}_2\text{O}} K^{\text{H}_2\text{O}}}{\theta_l + \theta_g K^{\text{H}_2\text{O}}} \\ \\ C_g^{\text{CO}_2} = \frac{Z^{\text{CO}_2}}{\theta_l K^{\text{CO}_2} + \theta_g} \\ C_l^{\text{CO}_2} = \frac{Z^{\text{CO}_2} K^{\text{CO}_2}}{\theta_l K^{\text{CO}_2} + \theta_g} \\ \\ C_l^{\text{sel}} = 1 - C_l^{\text{H}_2\text{O}} - C_l^{\text{CO}_2}. \end{array} \right.$$

La frontière de la zone diphasique liquide–gaz est alors donnée par les points,

- $\theta_l = 1, \theta_g = 0 \implies E_1 = (Z^{\text{CO}_2} = \frac{(1 - K^{\text{H}_2\text{O}}) K^{\text{CO}_2}}{1 - K^{\text{H}_2\text{O}} K^{\text{CO}_2}}, Z^{\text{sel}} = 0)$,
- $\theta_g = 1, \theta_l = 0 \implies E_2 = (Z^{\text{CO}_2} = \frac{1 - K^{\text{H}_2\text{O}}}{1 - K^{\text{H}_2\text{O}} K^{\text{CO}_2}}, Z^{\text{sel}} = 0)$.

Le flash diphasique gaz–minéral est régi par le système d'équations suivant,

$$\left\{ \begin{array}{l} Z^{\text{H}_2\text{O}} = \theta_g C_g^{\text{H}_2\text{O}}, \\ Z^{\text{CO}_2} = \theta_g C_g^{\text{CO}_2}, \\ Z^{\text{sel}} = \theta_m, \\ \\ \theta_g + \theta_m = 1, \\ \\ C_g^{\text{H}_2\text{O}} + C_g^{\text{CO}_2} = 1. \end{array} \right.$$

La solution de ce flash est triviale et est donnée par,

$$\left\{ \begin{array}{l} \theta_g = Z^{\text{H}_2\text{O}} + Z^{\text{CO}_2} \\ \theta_m = Z^{\text{sel}} \\ \\ C_g^{\text{H}_2\text{O}} = \frac{Z^{\text{H}_2\text{O}}}{Z^{\text{H}_2\text{O}} + Z^{\text{CO}_2}} \\ \\ C_g^{\text{CO}_2} = \frac{Z^{\text{CO}_2}}{Z^{\text{H}_2\text{O}} + Z^{\text{CO}_2}}. \end{array} \right.$$

La frontière de la zone diphasique gaz–minéral est alors donnée par les points,

- $\theta_g = 1, \theta_m = 0 \implies (Z^{\text{CO}_2} = 1, Z^{\text{sel}} = 0)$,
- $\theta_m = 1, \theta_g = 0 \implies (Z^{\text{CO}_2} = 0, Z^{\text{sel}} = 1)$.

Le flash diphasique liquide–minéral est régi par le système d'équations suivant,

$$\left\{ \begin{array}{l} Z^{\text{H}_2\text{O}} = \theta_l C_l^{\text{H}_2\text{O}}, \\ Z^{\text{CO}_2} = \theta_l C_l^{\text{CO}_2}, \\ Z^{\text{sel}} = \theta_l C_l^{\text{sel}} + \theta_m, \\ \\ \theta_l + \theta_m = 1, \\ \\ C_l^{\text{sel}} = K^{\text{sel}}, \\ \\ C_l^{\text{H}_2\text{O}} + C_l^{\text{CO}_2} + C_l^{\text{sel}} = 1. \end{array} \right.$$

La solution de ce flash est triviale et est donnée par,

$$\left\{ \begin{array}{l} \theta_l = \frac{1 - Z^{sel}}{1 - K^{sel}} \\ \theta_m = 1 - \theta_l \\ C_l^{H_2O} = \frac{Z^{H_2O}}{\theta_l} \\ C_l^{CO_2} = \frac{Z^{CO_2}}{\theta_l} \\ C_l^{sel} = K^{sel}. \end{array} \right.$$

La frontière de la zone diphasique liquide–minéral est alors donnée par les points,

- $\theta_l = 1, \theta_m = 0 \implies E_4 = (Z^{CO_2} = 0, Z^{sel} = K^{sel})$,
- $\theta_m = 1, \theta_l = 0 \implies (Z^{CO_2} = 0, Z^{sel} = 1)$.

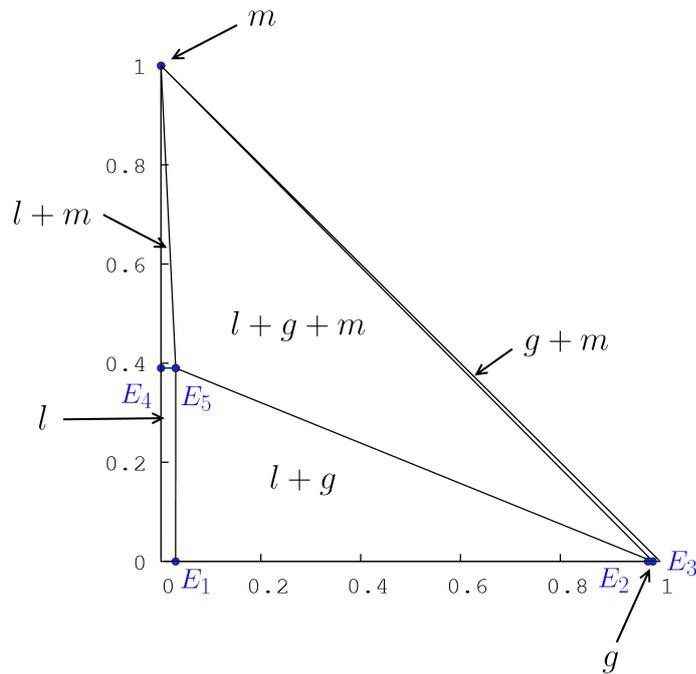


FIGURE 3.14 – Diagramme de phases dans l'espace (Z_{CO_2}, Z_{salt}) .

Bibliographie

- [1] I. Aavatsmark, T. Barkve, O. Boe, and T. Mannseth. Discretization on non-orthogonal, curvilinear grids for multi-phase flow. In *Proceedings of ECMOR IV-4th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery, EAGE, Roros, Norway*, 1994.
- [2] I. Aavatsmark, T. Barkve, O. Boe, and T. Mannseth. Discretization on non-orthogonal, quadrilateral grids for inhomogeneous, anisotropic media. *Journal of computational physics*, 127(1) :2–14, 1996.
- [3] I. Aavatsmark, T. Barkve, O. Boe, and T. Mannseth. Discretization on unstructured grids for inhomogeneous, anisotropic media. part 1 : Derivation of the methods. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 19 :1700, 1998.
- [4] I. Aavatsmark, T. Barkve, O. Bøe, and T. Mannseth. Discretization on unstructured grids for inhomogeneous, anisotropic media. part 2 : Discussion and numerical results. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 19 :1717, 1998.
- [5] I. Aavatsmark, G. Eigestad, B. Heimsund, B. Mallison, J. Nordbotten, and E. øian. A new finite-volume approach to efficient discretization on challenging grids. *SPE Journal*, 15(3) :658–669, 2010.
- [6] I. Aavatsmark, G.T. Eigestad, B.T. Mallison, and J.M. Nordbotten. A compact multipoint flux approximation method with improved robustness. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 24(5) :1329–1360, 2008.
- [7] I. Aavatsmark and R.A. Klausen. Well index in reservoir simulation for slanted and slightly curved wells in 3d grids. *SPE Journal*, 8(1) :41–48, 2003.
- [8] L. Agélas. *Schémas volumes finis multipoints pour grilles non orthogonales*. PhD thesis, Université Paris-Est Marne-la-Vallée, 2009.
- [9] L. Agélas, D.A. Di Pietro, and J. Droniou. The g method for heterogeneous anisotropic diffusion on general meshes. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 44(04) :597–625, 2010.
- [10] L. Agélas, D.A. Di Pietro, R. Eymard, and R. Masson. An abstract analysis framework for nonconforming approximations of diffusion on general meshes. *International Journal on Finite Volumes*, 7(1), 2010.

- [11] L. Agélas, D.A. Di Pietro, and R. Masson. A symmetric and coercive finite volume scheme for multiphase porous media flow problems with applications in the oil industry. In R. Eymard and J.-M. Hérard, editors, *Finite Volumes for Complex Applications V*, pages 35–52. Wiley, 2008.
- [12] L. Agélas, R. Eymard, and R. Herbin. A nine-point finite volume scheme for the simulation of diffusion in heterogeneous media. *Comptes Rendus Mathématique*, 347(11-12) :673–676, 2009.
- [13] L. Agélas, C. Guichard, and R. Masson. Convergence of finite volume mpfa o type schemes for heterogeneous anisotropic diffusion problems on general meshes. *International Journal on Finite Volumes*, 7(2), 2010.
- [14] L. Agélas and R. Masson. Convergence of the finite volume mpfa o scheme for heterogeneous anisotropic diffusion problems on general meshes. *Comptes Rendus Mathématique*, 346(17-18) :1007–1012, 2008.
- [15] B. Andreianov, F. Hubert, and S. Krell. Benchmark 3d : a version of the ddfv scheme with cell/vertex unknowns on general meshes. In J. Fort, J. Furst, J. Halama, R. Herbin, and F. Hubert, editors, *Finite Volumes for Complex Applications VI – Problems and Perspectives*, volume 2, pages 137–148. Springer Proceedings in Mathematics, 2011.
- [16] O. Angelini. *Étude de schémas numériques pour les écoulements diphasiques en milieu poreux déformable pour des maillages quelconques : application au stockage de déchets radioactifs*. PhD thesis, Université Paris-Est Marne-la-Vallée, 2010.
- [17] R.P. Batycky, M.J. Blunt, and M.R. Thiele. A 3d field-scale streamline-based reservoir simulator. *SPE Reservoir Engineering*, 12(4) :246–254, 1997.
- [18] J. Brac, R. Eymard, C. Guichard, and R. Masson. Finite volume schemes for multiphase flow simulation on near well grids. In *Proceedings of ECMOR XII–12th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery, EAGE, Oxford, UK*, 2010.
- [19] F. Brezzi, K. Lipnikov, and V. Simoncini. A family of mimetic finite difference methods on polygonal and polyhedral meshes. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 15(10) :1533–1552, 2005.
- [20] H. Cao. *Development of techniques for general purpose simulators*. PhD thesis, University of Stanfords, 2002.
- [21] C. Chainais-Hillairet and J. Droniou. Convergence analysis of a mixed finite volume scheme for an elliptic-parabolic system modeling miscible fluid flows in porous media. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 45(5) :2228–2258, 2006.
- [22] K.H. Coats. Implicit compositional simulation of single-porosity and dual-porosity reservoirs. In *SPE Symposium on Reservoir Simulation*, 1989.
- [23] K.H. Coats, L.K. Thomas, and R.G. Pierson. Compositional and black oil reservoir simulation. In *SPE Reservoir Simulation Symposium*, 1995.

- [24] Y. Coudière, F. Hubert, and G. Manzini. Benchmark 3d : Cevfe-ddfv, a discrete duality scheme with cell/vertex/face+ edge unknowns. In J. Fort, J. Furst, J. Halama, R. Herbin, and F. Hubert, editors, *Finite Volumes for Complex Applications VI – Problems and Perspectives*, volume 2, pages 177–184. Springer Proceedings in Mathematics, 2011.
- [25] S. Delcourte, K. Domelevo, and P. Omnes. A discrete duality finite volume approach to hodge decomposition and div-curl problems on almost arbitrary two-dimensional meshes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 45(3) :1142–1174, 2008.
- [26] J. Droniou, R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. A unified approach to mimetic finite difference, hybrid finite volume and mixed finite volume methods. In *Mathematical models and methods in applied sciences*. Citeseer, 2009.
- [27] M.G. Edwards and C.F. Rogers. A flux continuous scheme for the full tensor pressure equation. in prov. of the 4th european conf. on the mathematics of oil recovery, 1994.
- [28] M.G. Edwards and C.F. Rogers. Finite volume discretization with imposed flux continuity for the general tensor pressure equation. *Computational Geosciences*, 2(4) :259–290, 1998.
- [29] G. Enchéry, R. Eymard, and A. Michel. Numerical approximation of a two-phase flow problem in a porous medium with discontinuous capillary forces. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 43(6) :2402–2422, 2006.
- [30] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. Finite volume methods. *Handbook of Numerical Analysis*, 7 :713–1018, 2000.
- [31] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. Discretisation of heterogeneous and anisotropic diffusion problems on general non-conforming meshes, sushi : a scheme using stabilisation and hybrid interfaces. *IMA J. Numer. Anal.*, 30(4) :1009–1043, 2010.
- [32] R. Eymard, C. Guichard, and R. Herbin. Small-stencil 3d schemes for diffusive flows in porous media. *accepted for publication in M2AN*, 2010.
- [33] R. Eymard, C. Guichard, and R. Herbin. Benchmark 3d : the vag scheme. In J. Fort, J. Furst, J. Halama, R. Herbin, and F. Hubert, editors, *Finite Volumes for Complex Applications VI – Problems and Perspectives*, volume 2, pages 213–222. Springer Proceedings in Mathematics, 2011.
- [34] R. Eymard, C. Guichard, R. Herbin, and R. Masson. Multiphase flow in porous media using the VAG scheme,. In J. Fort, J. Furst, J. Halama, R. Herbin, and F. Hubert, editors, *Finite Volumes for Complex Applications VI – Problems and Perspectives*, volume 1, pages 409–417. Springer Proceedings in Mathematics, 2011.
- [35] R. Eymard, G. Henry, R. Herbin, F. Hubert, R. Klöfkorn, and G. Manzini. Benchmark 3d on discretization schemes for anisotropic diffusion problem on general grids. In J. Fort, J. Furst, J. Halama, R. Herbin, and F. Hubert, editors, *Finite Volumes for Complex Applications VI – Problems and Perspectives*. Springer Proceedings in Mathematics, 2011.
- [36] R. Eymard and R. Herbin. A new collocated finite volume scheme for the incompressible Navier-Stokes equations on general non matching grids. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 344(10) :659–662, 2007.

- [37] R. Eymard and R. Herbin. Gradient schemes approximations for diffusion problem. In J. Fort, J. Furst, J. Halama, R. Herbin, and F. Hubert, editors, *Finite Volumes for Complex Applications VI – Problems and Perspectives*. Springer Proceedings in Mathematics, 2011.
- [38] R. Eymard, R. Herbin, and J.C. Latché. Convergence analysis of a colocated finite volume scheme for the incompressible navier-stokes equations on general 2 or 3d meshes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 45(1) :1–36, 2007.
- [39] G. Grospellier and B. Lelandais. The Arcane development framework. In *Proceedings of the 8th workshop on Parallel/High-Performance Object-Oriented Scientific Computing*, pages 1–11. ACM, 2009.
- [40] S.S. Mundal. *Conservative numerical methods for elliptic problems with applications to simulation of near-well flow*. PhD thesis, University of Bergen, 2009.
- [41] S.S. Mundal, E. Keilegavlen, and I. Aavatsmark. Simulation of anisotropic heterogeneous near-well flow using MPFA methods on flexible grids. *Computational Geosciences*, pages 1–17, 2009.
- [42] D. Peaceman. Interpretation of well-block pressures in numerical reservoir simulation. *SPE Journal*, 18(3) :183–194, 1978.
- [43] D. Peaceman. Interpretation of well-block pressures in numerical reservoir simulation with nonsquare grid blocks and anisotropic permeability. *SPE Journal*, 23 :531–543, 1983.
- [44] JW Watts. A compositional formulation of the pressure and saturation equations. *SPE Reservoir Engineering*, 1(3) :243–252, 1986.
- [45] M.F. Wheeler, J.A. Wheeler, and M. Peszynska. A distributed computing portal for coupling multi-physics and multiple domains in porous media. *Computational Methods in Water Resources*, pages 167–174, 2000.

Troisième partie

Etude mathématique

Chapter 4

Small stencil 3D schemes for diffusive flows in porous media

This chapter consists of an article accepted for publication in the journal M2AN, written with Robert Eymard and Raphaèle Herbin.

Sommaire

4.1	Introduction	112
4.2	Approximate gradient schemes	115
4.2.1	Definition and properties	115
4.2.2	Examples	119
4.3	A small-stencil hybrid vertex scheme	121
4.3.1	Construction of the scheme	121
4.3.2	Implementation of the scheme	123
4.3.3	Mathematical properties	123
4.4	A small-stencil cell-centred scheme	129
4.4.1	Harmonic averaging points	129
4.4.2	Definition of the scheme	130
4.4.3	Mathematical analysis	135
4.5	Numerical results	136
4.5.1	Randomly distorted Cartesian meshes	137
4.5.2	Near-well meshes	139
4.6	Conclusion	141
	Bibliography	141

In this paper, we study some discretization schemes for diffusive flows in heterogeneous anisotropic porous media. We first introduce the notion of gradient scheme, and show that several existing schemes fall into this framework. Then, we construct two new gradient schemes which have the advantage of a small stencil. Numerical results obtained for real reservoir meshes show the efficiency of the new schemes, compared to existing ones.

4.1 Introduction

Underground engineering simulations often involve computations of the flow on meshes that are adapted to the geological layers. This geology fitting is likely to produce a number of complex geometrical features, such as faults, vanishing layers, slanted wells, highly heterogeneous permeability fields. . . The resulting grid cells may feature non-planar faces and they are defined in most cases by 8 vertices; they can be locally defined by 7, 6 or 5 vertices for layers which are not present over the whole domain. These grid cells are often called generalised hexahedra. For instance Figure 4.1 presents a typical near-well mesh used in reservoir engineering; the mesh

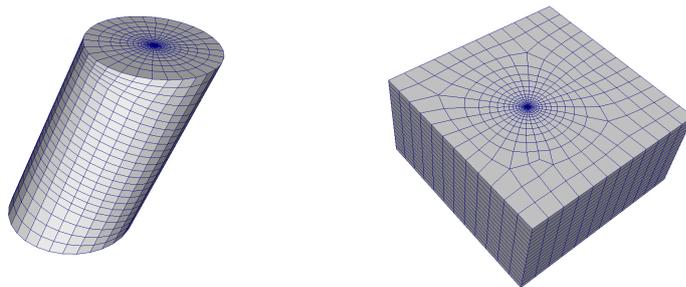


Figure 4.1: Near-well grid : radial mesh without (left) and with transition zone (right).

on the right features distorted cells, high contrasted sizes and non-conforming connections between the radial part (on the left) and the Cartesian part.

Since most of the coupled phenomena which occur in underground flow involve diffusion terms, we focus in this paper on the following simple diffusion problem posed on an open bounded subset $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, with boundary $\partial\Omega = \overline{\Omega} \setminus \Omega$:

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\Lambda(\mathbf{x})\nabla\bar{u}) = f & \text{in } \Omega, \\ \bar{u} = 0 & \text{on } \partial\Omega, \end{cases}$$

where \bar{u} is an unknown field (temperature, pressure, . . .), $\Lambda(\mathbf{x})$ is a linear operator which is usually self-adjoint, and with eigenvalues belonging to $[\underline{\lambda}, \bar{\lambda}]$, $0 < \underline{\lambda} \leq \bar{\lambda}$, and $f \in L^2(\Omega)$ is a volumetric source term.

Hence we wish to approximate the function \bar{u} solution of the weak form of the problem, that is:

$$\bar{u} \in H_0^1(\Omega) \text{ and } \forall \bar{v} \in H_0^1(\Omega), \int_{\Omega} \Lambda(\mathbf{x})\nabla\bar{u}(\mathbf{x}) \cdot \nabla\bar{v}(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \int_{\Omega} f(\mathbf{x})\bar{v}(\mathbf{x})d\mathbf{x}. \quad (4.1)$$

The discretization of Problem (4.1) by a finite volume method requires the approximation of the diffusion flux $\bar{\Phi}_{K,\sigma}(\bar{u})$ through any face σ of a control volume K , defined by $\bar{\Phi}_{K,\sigma}(\bar{u}) = - \int_{\sigma} \Lambda(\mathbf{x}) \nabla \bar{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}(\mathbf{x}) ds(\mathbf{x})$, and $\mathbf{n}_{K,\sigma}(\mathbf{x})$ is the outward unit normal vector to σ at the point \mathbf{x} . An intense research activity has recently been devoted to the numerical approximation $\Phi_{K,\sigma}$ of $\bar{\Phi}_{K,\sigma}(\bar{u})$, particularly in the oil engineering framework, where such problems are of utmost importance; we refer for instance to the various schemes presented at the FVCA5 and FVCA6 benchmarks [25, 23].

In the case where Λ is a heterogeneous isotropic diffusion operator, if the mesh satisfies a standard orthogonality condition, then the continuous flux $\bar{\Phi}_{K,\sigma}(\bar{u})$ through the interface σ between the control volumes K and L may be consistently approximated by the two points approximation $\Phi_{K,\sigma} = \tau_{K,L}(u_K - u_L)$, where u_K and u_L are the approximate values of u at points \mathbf{x}_K and \mathbf{x}_L and where $\tau_{K,L}$ depends on the geometric properties of the mesh and on Λ via the harmonic mean value of Λ between K and L . The standard orthogonality is satisfied in the particular case of rectangular meshes (2D or 3D), or acute angle triangular meshes (note that this does not generalise to 3D tetrahedra), Voronoï meshes (2D or 3D). An advantage of the above two point approximation is that it provides monotonicity properties, under the form of a local maximum principle. The mathematical properties of the resulting scheme are extensively studied in [18] for example.

Unfortunately, it is seldom possible to use a two point flux in the general case. Indeed, the natural diffusion operators involved in underground flows are in general heterogeneous, accounting for the geological constitution of the layers by sedimentation processes. Furthermore, the geometry of the grid cells resulting from the design of the above depicted 3D mesh does not satisfy the aforementioned orthogonality condition needed for the consistency of the two point approximated flux with $\nabla \bar{u} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}$.

In order to obtain a consistent approximation in the general case, a first idea is to use more than two points in the approximation of $\Phi_{K,\sigma}(u)$, but in a careful way so as to keep a conservative flux. This has been the object of several studies [24], [18, Chapter 3], [14], [1] .

However these schemes usually fail to meet two properties which are of some interest in practice, namely symmetry and positive-definiteness. Indeed, except in some particular cases, multi point schemes are not symmetric; recall that the symmetry of the matrices allows for important savings in computing time; moreover, except again in some particular cases, there is no evidence that the matrix obtained with these coefficients is positive definite, and that convergence properties can be expected; in fact, there exist particular meshes on which these methods lead to noninvertible linear systems.

In order to obtain a consistent approximation of the diffusion flux, a second idea is to use a gradient-type scheme. The construction of such a scheme is based on a non-conformal approximation of the weak formulation of the problem. In this sense, it relates to nonconforming finite element methods. Defining the set $X_{\mathcal{D},0}$ of all families of discrete unknowns, for $u \in X_{\mathcal{D},0}$, we denote by $\nabla_{\mathcal{D}}u \in L^2(\Omega)^d$ a discrete gradient and by $\Pi_{\mathcal{D}}u \in L^2(\Omega)$ a reconstruction of a space function. Then Problem (4.1) is approximated by the scheme

$$u \in X_{\mathcal{D},0}, \forall v \in X_{\mathcal{D},0}, \int_{\Omega} \Lambda(\mathbf{x}) \nabla_{\mathcal{D}}u(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathcal{D}}v(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \Pi_{\mathcal{D}}v(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (4.2)$$

In Section 4.2, we present the properties which are sufficient for the convergence of the scheme (4.2). We also give examples of gradient schemes, among which the SUSHI scheme, whose discrete gradient is obtained using the Stokes formula and relies on the use of auxiliary unknowns u_σ located on the interfaces σ between control volumes and a stabilisation in order to obtain a coercive scheme. A drawback of such schemes is the difficulty to eliminate the auxiliary unknowns u_σ algebraically, in order for the diffusion terms to be only expressed with respect to the unknowns u_K [5], leading to unacceptable computational costs in the engineering framework. Therefore, the scheme can be modified, defining the auxiliary unknowns u_σ as linear interpolations of the unknowns u_K meeting some properties with respect to the diffusion operator $\Lambda(\boldsymbol{x})$ (see [20]). Then the scheme becomes cell-centred, but the stencil of the corresponding term $B_{i,j,k}$ becomes too wide.

This analysis leads us to the construction of two new 3D schemes: a hybrid vertex scheme and a cell centred scheme, which we present in this paper. Both meet the advantages of multi point schemes (in particular, a stencil with at most 27 points) and the symmetry and convergence properties of the SUSHI scheme.

The first one, detailed in Section 4.3, follows the idea proposed in [21] of introducing vertex unknowns, which we adapt to general meshes using the discrete gradient introduced in [20]. Note that the same type of idea was also used in [10]. It is applicable to any polyhedral mesh, whether the faces of the control volumes are planar or not. Its main characteristics are the following:

1. the discrete unknowns are the values u_K at the centre of the control volumes and the values $u_{\boldsymbol{s}}$ at the vertices, allowing to express the auxiliary unknowns u_σ (used in the discrete gradient) as linear interpolations of the unknowns $u_{\boldsymbol{s}}$,
2. after a local elimination of the cell unknowns, we get a small stencil on the interior vertices which is 27-point on structured hexahedral meshes,
3. it provides the exact solution if Λ is piecewise constant in polygonal sub-domains and u is affine in each of these sub-domains (this property is sought in the multi-point flux approximation schemes given for instance in [2]),
4. the scheme is always a gradient scheme in the sense developed in Section 4.2 and thus the scheme is well posed, leads to a symmetric positive definite matrix, whatever the geometry and the diffusion operator, and the approximate solutions converge to the exact solution of the problem as the grid size tends to 0, for general heterogeneous anisotropic diffusion problems.

Even though this scheme yields a 27-point linear system on the vertex unknowns, it does not lead to a 27-point linear system on the cell unknowns themselves, which is required in some situations. Hence a second scheme, proposed in section 4.4, extends to the 3D case the 2D scheme which was presented in [6]. Its implementation presents a few new difficulties, which have to be overcome. As in the 2D case, the scheme is based on the so-called harmonic averaging points, which allow for a consistent 2-point interpolation on an interface σ between two neighbouring control volumes K and L , of any function u whose regularity properties are

those of a solution of the diffusion problem. This study is recalled in Section 4.4.1. Such an interpolation is then used to construct a discrete gradient on the subcells which are delimited by a cell centre, a cell vertex and the two (in 2D) or four (in 3D) harmonic average points of the edges (in 2D) or faces (in 3D) corresponding to the vertex. This discrete gradient is the same (on the subcells) as the one which is used in the SUSHI scheme [20], and therefore, the convergence analysis of the resulting scheme is analogous to that of the SUSHI scheme. However, thanks to the use of the harmonic points and the subcells, its stencil is much smaller. The full scheme is presented in Section 4.4.2. Its main characteristics are the following:

1. it may be used on a large class of non-regular polyhedral meshes,
2. it again provides the exact solution if Λ is piecewise constant in polygonal sub-domains and u is affine in each of these sub-domains,
3. it leads to a 27-point scheme in the case of quadrilateral meshes which are not too distorted (in a sense involving the diffusion matrix Λ),
4. it is shown to be a gradient scheme.

Numerical results are provided in Section 4.5, followed by a short conclusion in Section 4.6.

4.2 Approximate gradient schemes

The approximate gradient schemes are written on the weak form of the diffusion problem. From the set of discrete unknowns, a function and a discrete gradient are reconstructed: they are defined almost everywhere and are expected to be an approximation of the unknown function of the problem and its gradient. In order for the scheme to be consistent and convergent, the discrete gradient and the reconstruction operator must be carefully chosen with respect to one another. We first give the definition and convergence properties of a gradient scheme and then give some examples of existing schemes that can be seen as gradient schemes.

4.2.1 Definition and properties

Definition 4.2.1 (Approximate gradient discretization and gradient scheme) *Let Ω be a bounded open domain of \mathbb{R}^d , with $d \in \mathbb{N}^*$. An approximate gradient discretization \mathcal{D} is defined by $\mathcal{D} = (X_{\mathcal{D},0}, h_{\mathcal{D}}, \Pi_{\mathcal{D}}, \nabla_{\mathcal{D}})$, where:*

1. *the set of discrete unknowns $X_{\mathcal{D},0}$ is a finite dimensional vector space on \mathbb{R} ,*
2. *the space step $h_{\mathcal{D}} \in (0, +\infty)$ is a positive real number,*
3. *the mapping $\Pi_{\mathcal{D}} : X_{\mathcal{D},0} \rightarrow L^2(\Omega)$ is the reconstruction of the approximate function,*
4. *the mapping $\nabla_{\mathcal{D}} : X_{\mathcal{D},0} \rightarrow L^2(\Omega)^d$ is the reconstruction of the gradient of the function; it must be chosen such that $\|\nabla_{\mathcal{D}} \cdot\|_{L^2(\Omega)^d}$ is a norm on $X_{\mathcal{D},0}$.*

Then the **coercivity** of the discretization is measured through the norm $C_{\mathcal{D}}$ of the linear mapping $\Pi_{\mathcal{D}}$, defined by

$$C_{\mathcal{D}} = \max_{v \in X_{\mathcal{D},0} \setminus \{0\}} \frac{\|\Pi_{\mathcal{D}}v\|_{L^2(\Omega)}}{\|\nabla_{\mathcal{D}}v\|_{L^2(\Omega)^d}}. \quad (4.3)$$

Note that (4.3) yields the following “discrete Poincaré” inequality:

$$\|\Pi_{\mathcal{D}}v\|_{L^2(\Omega)} \leq C_{\mathcal{D}}\|\nabla_{\mathcal{D}}v\|_{L^2(\Omega)^d}, \quad \forall v \in X_{\mathcal{D},0}.$$

The **strong consistency** of the discretization is measured through the interpolation error function $S_{\mathcal{D}} : H_0^1(\Omega) \rightarrow [0, +\infty)$, defined by

$$S_{\mathcal{D}}(\varphi) = \min_{v \in X_{\mathcal{D},0}} \left(\|\Pi_{\mathcal{D}}v - \varphi\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla_{\mathcal{D}}v - \nabla\varphi\|_{L^2(\Omega)^d}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \forall \varphi \in H_0^1(\Omega), \quad (4.4)$$

The **dual consistency** of the discretization is measured through the function $W_{\mathcal{D}} : H_{\text{div}}(\Omega) \rightarrow [0, +\infty)$, defined by

$$W_{\mathcal{D}}(\varphi) = \max_{u \in X_{\mathcal{D},0} \setminus \{0\}} \frac{1}{\|\nabla_{\mathcal{D}}u\|_{L^2(\Omega)^d}} \left| \int_{\Omega} (\nabla_{\mathcal{D}}u(\mathbf{x}) \cdot \varphi(\mathbf{x}) + \Pi_{\mathcal{D}}u(\mathbf{x})\text{div}\varphi(\mathbf{x})) \, d\mathbf{x} \right|, \quad \forall \varphi \in H_{\text{div}}(\Omega). \quad (4.5)$$

If $\mathcal{D} = (X_{\mathcal{D},0}, h_{\mathcal{D}}, \Pi_{\mathcal{D}}, \nabla_{\mathcal{D}})$ is an approximate gradient discretization, we shall say that (4.2) is a gradient scheme.

The following lemma may be seen as the so-called “Strang second lemma”, which was introduced in the framework of non nonconforming finite element approximations [29]. We give its formulation in the present setting (along with its proof, which is quite simple).

Lemma 4.2.2 (Control of the approximation error) *Let Ω be a bounded open domain of \mathbb{R}^d , with $d \in \mathbb{N}^*$, let $f \in L^2(\Omega)$ and let Λ be a measurable function from Ω to the set $\mathcal{M}_d(\mathbb{R})$ of $d \times d$ matrices, such that for a.e. $\mathbf{x} \in \Omega$, $\Lambda(\mathbf{x})$ is symmetric, and such that the set of its eigenvalues is included in $[\underline{\lambda}, \bar{\lambda}]$, where $0 < \underline{\lambda} \leq \bar{\lambda}$. Let $\bar{u} \in H_0^1(\Omega)$ be the solution of (4.1) (remark that since $f \in L^2(\Omega)$, one has $\Lambda\nabla\bar{u} \in H_{\text{div}}(\Omega)$).*

Let \mathcal{D} be an approximate gradient discretization in the sense of Definition 4.2.1. Then there exists one and only one $u_{\mathcal{D}} \in X_{\mathcal{D},0}$, solution to the approximate gradient scheme (4.2), which moreover satisfies the following inequalities:

$$\|\nabla\bar{u} - \nabla_{\mathcal{D}}u_{\mathcal{D}}\|_{L^2(\Omega)^d} \leq \frac{1}{\underline{\lambda}}(W_{\mathcal{D}}(\Lambda\nabla\bar{u}) + (\bar{\lambda} + \underline{\lambda})S_{\mathcal{D}}(\bar{u})), \quad (4.6)$$

and

$$\|\bar{u} - \Pi_{\mathcal{D}}u_{\mathcal{D}}\|_{L^2(\Omega)} \leq \frac{1}{\underline{\lambda}}(C_{\mathcal{D}}W_{\mathcal{D}}(\Lambda\nabla\bar{u}) + (C_{\mathcal{D}}\bar{\lambda} + \underline{\lambda})S_{\mathcal{D}}(\bar{u})). \quad (4.7)$$

PROOF. Assume that $u \in X_{\mathcal{D},0}$ satisfies (4.2); taking $v = u$ in (4.2) and using (4.3), we get

$$\int_{\Omega} \Lambda(\mathbf{x}) \nabla_{\mathcal{D}} u(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathcal{D}} u(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \Pi_{\mathcal{D}} u(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \leq \|f\|_{L^2(\Omega)} C_{\mathcal{D}} \|\nabla_{\mathcal{D}} u\|_{L^2(\Omega)^d}. \quad (4.8)$$

This leads, thanks to the hypotheses on Λ , to

$$\Delta \|\nabla_{\mathcal{D}} u\|_{L^2(\Omega)^d} \leq \|f\|_{L^2(\Omega)} C_{\mathcal{D}}; \quad (4.9)$$

hence, taking $f = 0$ yields $\nabla_{\mathcal{D}} u = 0$. Thanks to the hypotheses on the approximate gradient, $\|\nabla_{\mathcal{D}} \cdot\|_{L^2(\Omega)^d}$ is a norm on $X_{\mathcal{D},0}$, we thus get $u = 0$. Remarking that the discrete system (4.2) leads to a square linear system, we therefore obtain the existence and uniqueness of $u \in X_{\mathcal{D},0}$ solution to (4.2).

Let us take in (4.5), $\varphi = \Lambda \nabla \bar{u} \in H_{\text{div}}(\Omega)$. We then obtain, for a given $v \in X_{\mathcal{D},0}$,

$$\left| \int_{\Omega} (\nabla_{\mathcal{D}} v(\mathbf{x}) \cdot \Lambda(\mathbf{x}) \nabla \bar{u}(\mathbf{x}) + \Pi_{\mathcal{D}} v(\mathbf{x}) \operatorname{div}(\Lambda(\mathbf{x}) \nabla \bar{u})(\mathbf{x})) d\mathbf{x} \right| \leq \|\nabla_{\mathcal{D}} v\|_{L^2(\Omega)^d} W_{\mathcal{D}}(\Lambda \nabla \bar{u}),$$

which leads, since \bar{u} is the solution to (4.1), to

$$\left| \int_{\Omega} (\nabla_{\mathcal{D}} v(\mathbf{x}) \cdot \Lambda(\mathbf{x}) \nabla \bar{u}(\mathbf{x}) - \Pi_{\mathcal{D}} v(\mathbf{x}) f(\mathbf{x})) d\mathbf{x} \right| \leq \|\nabla_{\mathcal{D}} v\|_{L^2(\Omega)^d} W_{\mathcal{D}}(\Lambda \nabla \bar{u}).$$

Since $u_{\mathcal{D}}$ is the unique solution to (4.2), we get

$$\left| \int_{\Omega} \Lambda \nabla_{\mathcal{D}} v \cdot (\nabla \bar{u} - \nabla_{\mathcal{D}} u_{\mathcal{D}}) d\mathbf{x} \right| \leq \|\nabla_{\mathcal{D}} v\|_{L^2(\Omega)^d} W_{\mathcal{D}}(\Lambda \nabla \bar{u}).$$

Defining

$$P_{\mathcal{D}} \bar{u} = \arg \min_{v \in X_{\mathcal{D},0}} (\|\Pi_{\mathcal{D}} v - \bar{u}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla_{\mathcal{D}} v - \nabla \bar{u}\|_{L^2(\Omega)^d}^2),$$

and thanks to (4.4), we get

$$\begin{aligned} \left| \int_{\Omega} \Lambda \nabla_{\mathcal{D}} v \cdot (\nabla_{\mathcal{D}} P_{\mathcal{D}} \bar{u} - \nabla_{\mathcal{D}} u_{\mathcal{D}}) d\mathbf{x} \right| &\leq \|\nabla_{\mathcal{D}} v\|_{L^2(\Omega)^d} W_{\mathcal{D}}(\Lambda \nabla \bar{u}) + \left| \int_{\Omega} \Lambda \nabla_{\mathcal{D}} v \cdot (\nabla_{\mathcal{D}} P_{\mathcal{D}} \bar{u} - \nabla \bar{u}) d\mathbf{x} \right| \\ &\leq \|\nabla_{\mathcal{D}} v\|_{L^2(\Omega)^d} \left(W_{\mathcal{D}}(\Lambda \nabla \bar{u}) + \bar{\lambda} \|\nabla_{\mathcal{D}} P_{\mathcal{D}} \bar{u} - \nabla \bar{u}\|_{L^2(\Omega)^d} \right) \\ &\leq \|\nabla_{\mathcal{D}} v\|_{L^2(\Omega)^d} (W_{\mathcal{D}}(\Lambda \nabla \bar{u}) + \bar{\lambda} S_{\mathcal{D}}(\bar{u})). \end{aligned}$$

Choosing $v = P_{\mathcal{D}} \bar{u} - u_{\mathcal{D}}$ yields

$$\Delta \|\nabla_{\mathcal{D}} (P_{\mathcal{D}} \bar{u} - u_{\mathcal{D}})\|_{L^2(\Omega)^d} \leq W_{\mathcal{D}}(\Lambda \nabla \bar{u}) + \bar{\lambda} S_{\mathcal{D}}(\bar{u}).$$

Remarking that $\|\nabla \bar{u} - \nabla_{\mathcal{D}} P_{\mathcal{D}} \bar{u}\|_{L^2(\Omega)^d} \leq S_{\mathcal{D}}(\bar{u})$, we obtain (4.6). Using (4.3), we get

$$\Delta \|\Pi_{\mathcal{D}} P_{\mathcal{D}} \bar{u} - \Pi_{\mathcal{D}} u_{\mathcal{D}}\|_{L^2(\Omega)} \leq C_{\mathcal{D}} (W_{\mathcal{D}}(\Lambda \nabla \bar{u}) + \bar{\lambda} S_{\mathcal{D}}(\bar{u})),$$

which yields (4.7), since $\|\bar{u} - \Pi_{\mathcal{D}} P_{\mathcal{D}} \bar{u}\|_{L^2(\Omega)^d} \leq S_{\mathcal{D}}(\bar{u})$. \square

We deduce from (4.6) and (4.7) the following convergence result:

Corollary 4.2.3 (Convergence) *Under the assumptions of Lemma 4.2.2, let \mathcal{F} be a family of gradient discretizations in the sense of Definition 4.2.1, which satisfies the following assumptions:*

(P1) *there exists $C_P \in \mathbb{R}$ such that $C_{\mathcal{D}} \leq C_P$ for any $\mathcal{D} \in \mathcal{F}$,*

(P2) *for all $\varphi \in H_0^1(\Omega)$, $S_{\mathcal{D}}(\varphi)$ tends to 0 as $h_{\mathcal{D}} \rightarrow 0$,*

(P3) *for all $\varphi \in H_{\text{div}}(\Omega)$, $W_{\mathcal{D}}(\varphi)$ tends to 0 as $h_{\mathcal{D}} \rightarrow 0$.*

For $\mathcal{D} \in \mathcal{F}$, let $u_{\mathcal{D}} \in X_{\mathcal{D},0}$ be the solution to the approximate gradient scheme (4.2), then $\Pi_{\mathcal{D}}u_{\mathcal{D}}$ converges to \bar{u} in $L^2(\Omega)$ and $\nabla_{\mathcal{D}}u_{\mathcal{D}}$ converges to $\nabla\bar{u}$ in $L^2(\Omega)^d$ as $h_{\mathcal{D}} \rightarrow 0$.

Remark 1 (Error estimate) In the case where \bar{u} and Λ are sufficiently regular, we get for the SUSHI scheme [20] and for the schemes presented in this paper, that $W_{\mathcal{D}}(\Lambda\nabla\bar{u}) \leq Ch_{\mathcal{D}}$ and $S_{\mathcal{D}}(\bar{u}) \leq Ch_{\mathcal{D}}$, where $C > 0$ only depends on the regularity of the mesh.

The following lemma can be used for the practical verification of the assumptions (P2) and (P3) of Corollary 4.2.3.

Lemma 4.2.4 *Let Ω be a bounded open domain of \mathbb{R}^d , with $d \in \mathbb{N}^*$. Let \mathcal{F} be a family of approximate gradient discretizations in the sense of Definition 4.2.1 Then, for any dense subspace \mathcal{R} of $H_0^1(\Omega)$, the two properties:*

$$\lim_{h_{\mathcal{D}} \rightarrow 0} S_{\mathcal{D}}(\varphi) = 0, \quad \forall \varphi \in \mathcal{R}, \quad (4.10)$$

and

$$\lim_{h_{\mathcal{D}} \rightarrow 0} S_{\mathcal{D}}(u) = 0, \quad \forall u \in H_0^1(\Omega), \quad (4.11)$$

are equivalent. Furthermore, if there exists $C_P > 0$ such that the following uniform discrete Poincaré inequality holds:

$$C_{\mathcal{D}} \leq C_P, \quad \forall \mathcal{D} \in \mathcal{F}, \quad (4.12)$$

then, for any dense subspace \mathcal{S} of $H_{\text{div}}(\Omega)$, the two properties:

$$\lim_{h_{\mathcal{D}} \rightarrow 0} W_{\mathcal{D}}(\varphi) = 0, \quad \forall \varphi \in \mathcal{S}, \quad (4.13)$$

and

$$\lim_{h_{\mathcal{D}} \rightarrow 0} W_{\mathcal{D}}(\mathbf{U}) = 0, \quad \forall \mathbf{U} \in H_{\text{div}}(\Omega), \quad (4.14)$$

are equivalent.

PROOF. Let us prove that if (4.10) is satisfied then $\lim_{h_{\mathcal{D}} \rightarrow 0} S_{\mathcal{D}}(u) = 0$ for all $u \in H_0^1(\Omega)$. Let $\varepsilon > 0$ and $\varphi \in \mathcal{R}$, such that $\|u - \varphi\|_{H^1(\Omega)} \leq \varepsilon$. Thanks to (4.10), there exists $\eta > 0$ such that, for all $\mathcal{D} \in \mathcal{F}$ with $h_{\mathcal{D}} \leq \eta$, then

$$\min_{v \in X_{\mathcal{D},0}} (\|\Pi_{\mathcal{D}}v - \varphi\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla_{\mathcal{D}}v - \nabla\varphi\|_{L^2(\Omega)^d}^2) \leq \varepsilon^2.$$

Let us denote by

$$P_{\mathcal{D}}\varphi = \arg \min_{v \in X_{\mathcal{D},0}} (\|\Pi_{\mathcal{D}}v - \varphi\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla_{\mathcal{D}}v - \nabla\varphi\|_{L^2(\Omega)^d}^2).$$

We then get

$$\|\Pi_{\mathcal{D}}P_{\mathcal{D}}\varphi - u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla_{\mathcal{D}}P_{\mathcal{D}}\varphi - \nabla u\|_{L^2(\Omega)^d}^2 \leq 4\varepsilon^2.$$

This proves that $S_{\mathcal{D}}(u) \leq 2\varepsilon$, hence showing $\lim_{h_{\mathcal{D}} \rightarrow 0} S_{\mathcal{D}}(u) = 0$, which proves the first equivalence.

Let us now prove that, under hypothesis (4.13), for all $\mathbf{U} \in H_{\text{div}}(\Omega)$, $\lim_{h_{\mathcal{D}} \rightarrow 0} W_{\mathcal{D}}(\mathbf{U}) = 0$. Let $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{S}$ such that $\|\mathbf{U} - \boldsymbol{\varphi}\|_{H_{\text{div}}(\Omega)} \leq \varepsilon$, which means that $\|\mathbf{U} - \boldsymbol{\varphi}\|_{L^2(\Omega)^d} \leq \varepsilon$ and $\|\text{div}\mathbf{U} - \text{div}\boldsymbol{\varphi}\|_{L^2(\Omega)} \leq \varepsilon$. Thanks to (4.13), there exists $\eta > 0$ such that, for all $\mathcal{D} \in \mathcal{F}$ with $h_{\mathcal{D}} \leq \eta$, then, for all $v \in X_{\mathcal{D},0}$,

$$\left| \int_{\Omega} (\nabla_{\mathcal{D}}v(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) + \Pi_{\mathcal{D}}v(\mathbf{x})\text{div}\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}))d\mathbf{x} \right| \leq \varepsilon\|\nabla_{\mathcal{D}}v\|_{L^2(\Omega)^d}.$$

Thanks to the triangle and Cauchy-Schwarz inequalities, we have:

$$\left| \int_{\Omega} (\nabla_{\mathcal{D}}v(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{U}(\mathbf{x}) + \Pi_{\mathcal{D}}v(\mathbf{x})\text{div}\mathbf{U}(\mathbf{x}))d\mathbf{x} \right| \leq \varepsilon\|\nabla_{\mathcal{D}}v\|_{L^2(\Omega)^d} + \varepsilon\|\nabla_{\mathcal{D}}v\|_{L^2(\Omega)^d} + \varepsilon\|\Pi_{\mathcal{D}}v\|_{L^2(\Omega)}.$$

Thanks to Hypothesis (4.12), we get

$$\left| \int_{\Omega} (\nabla_{\mathcal{D}}v(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{U}(\mathbf{x}) + \Pi_{\mathcal{D}}v(\mathbf{x})\text{div}\mathbf{U}(\mathbf{x}))d\mathbf{x} \right| \leq (2 + C_P)\varepsilon\|\nabla_{\mathcal{D}}v\|_{L^2(\Omega)^d}.$$

Therefore $W_{\mathcal{D}}(\mathbf{U}) \leq (2 + C_P)\varepsilon$, hence showing (4.14). \square

4.2.2 Examples

Let us first notice that standard conforming finite element discretizations may be seen as approximate gradient discretizations. Indeed, let $V_h \subset H_0^1(\Omega)$ be the usual finite element space spanned by the basis functions $\varphi_1, \dots, \varphi_N$; the space $X_{\mathcal{D},0}$ is then \mathbb{R}^N and for $u = (u_1, \dots, u_N) \in X_{\mathcal{D},0}$, $\Pi_{\mathcal{D}}u = \sum_{i=1}^N u_i\varphi_i$, and $\nabla_{\mathcal{D}}u = \sum_{i=1}^N u_i\nabla\varphi_i = \nabla\Pi_{\mathcal{D}}u$. Hence

$$W_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{\varphi}) = 0 \text{ for all } \boldsymbol{\varphi} \in H_{\text{div}}(\Omega). \quad (4.15)$$

Note that in fact, an approximate gradient discretization is conforming if and only if (4.15) holds.

Let us now turn to the case of the non conforming P1 finite element discretization on simplicial meshes. In this case, the basis functions of the finite element space V_h are associated with the N internal faces of the mesh, and V_h is spanned by the basis functions $\varphi_1, \dots, \varphi_N$ which are piecewise affine and continuous at the centre of gravity of the faces. In this case, the space $X_{\mathcal{D},0}$ is again \mathbb{R}^N and for $u = (u_1, \dots, u_N) \in X_{\mathcal{D},0}$, $\Pi_{\mathcal{D}}u = \sum_{i=1}^N u_i\varphi_i$, but $\nabla_{\mathcal{D}}u$ cannot be defined as in the conformal case; it is only piecewise defined as the gradient of $\Pi_{\mathcal{D}}u$. It is

possible, under some geometrical conditions on the mesh (see e.g. [17]), to get from classical results that for all $\varphi \in (C^1(\mathbb{R}^d))^d$, $W_{\mathcal{D}}(\varphi) \leq h_{\mathcal{D}} C_{\varphi}$.

The SUSHI scheme [20] is explicitly defined through the space $X_{\mathcal{D},0}$, the reconstruction operator $\Pi_{\mathcal{D}}$ and the discrete gradient $\nabla_{\mathcal{D}}$. The fact that $W_{\mathcal{D}}$ tends to 0 may be proved in a similar way to that of the proof of Lemma 4.3.1 below. Note that the SUSHI scheme is also part of the Mimetic Mixed Hybrid family [16]; however, in the general form of mimetic schemes, we do not know how to include the stabilisation term (which is needed for the coercivity of the scheme) in the gradient term in order to write the scheme under the form (4.2).

The DDFV scheme, see [26, 15, 9] for the two dimensional case and [27, 12, 13, 28, 7, 11, 8] for the three dimensional case, may also be seen as a gradient scheme. Consider the case where the domain Ω is the union of octahedra which are the so-called diamond cells (such a cell is depicted in Figure 4.2). Octahedral meshes may be obtained from general hexahedral meshes by introducing an internal point to each hexahedron. We show in Figure 4.2 a locally refined face of hexahedral cell where we depict a octahedron constructed with an internal point of the cell and the barycentre of the four points of a face. (Here and throughout the paper, unless otherwise stated, "barycentre" will refer to a barycentre with equal weights.) With such a construction, we can easily take into account boundary conditions and heterogeneous media (each octahedron is homogeneous). The unknown at the centre of the internal faces (point B in right side of Figure 4.2), may be easily eliminated. Let us define the space $X_{\mathcal{D},0}$ as is $X_{\mathcal{D},0} = \{(u_s)_{s \in \mathcal{V}}\}$, where \mathcal{V} denotes the set of vertices of the octahedral mesh \mathcal{M} . Referring to Figure 4.2, we define a discrete piecewise constant gradient by its value on the octahedron K :

$$\nabla_{\mathcal{D}} u(\mathbf{x}) = \frac{1}{\Delta_K} \left((u_B - u_A) \overrightarrow{CD} \times \overrightarrow{EF} + (u_D - u_C) \overrightarrow{EF} \times \overrightarrow{AB} + (u_F - u_E) \overrightarrow{AB} \times \overrightarrow{CD} \right), \forall \mathbf{x} \in K, \quad (4.16)$$

where $\Delta_K = \text{Det}(\overrightarrow{AB}, \overrightarrow{CD}, \overrightarrow{EF})$. Let O be a well chosen point in \overline{K} , for instance the barycentre of the six vertices A, B, C, D, E and F . For the vertex F , we denote by σ_{EF} the union of the four triangles OAC, OCB, OBD and ODA , and we denote by $V_{K,F}$ the subset of K of all points which are on the same side of σ_{EF} as F . We proceed similarly for the five other vertices. The reconstruction operator is then defined for $\mathbf{x} \in K$ by:

$$\Pi_{\mathcal{D}} u(\mathbf{x}) = \frac{1}{3} (u_A 1_{V_{K,A}}(\mathbf{x}) + u_B 1_{V_{K,B}}(\mathbf{x}) + u_C 1_{V_{K,C}}(\mathbf{x}) + u_D 1_{V_{K,D}}(\mathbf{x}) + u_E 1_{V_{K,E}}(\mathbf{x}) + u_F 1_{V_{K,F}}(\mathbf{x}))$$

where 1_V is the characteristic function of the set V . With these definitions, (4.2) is a DDFV scheme.

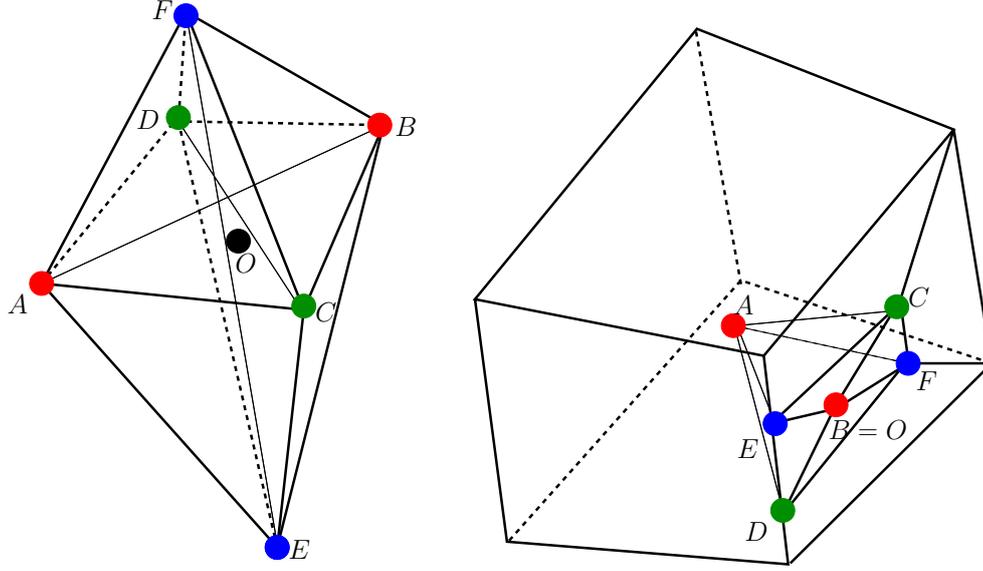


Figure 4.2: Left: A generic octahedral cell for the DDFV scheme - Right: An example of construction of an octahedron from a locally refined face of a hexahedron

4.3 A small-stencil hybrid vertex scheme

As stated in the introduction, the general idea of the small-stencil hybrid vertex scheme is to introduce a discrete gradient along the same line of thought as that of [19] (this discrete gradient depends on cell and faces unknowns), and to use this discrete gradient to build a discrete bilinear form. The specific point here is to express the face unknowns used in the discrete gradient as linear combinations of the vertex unknowns of the cell. It is then possible to algebraically eliminate the cell unknowns to obtain a linear system involving the vertex unknowns only.

4.3.1 Construction of the scheme

In this section, we provide a definition for all discrete quantities involved in Definition 4.2.1. We consider generalised polyhedral meshes of Ω . Let \mathcal{M} be the set of control volumes, that are disjoint open subsets of Ω such that $\bigcup_{K \in \mathcal{M}} \overline{K} = \overline{\Omega}$. Let $h_{\mathcal{D}} = \max_{K \in \mathcal{M}} h_K$, where h_K denotes the diameter of the cell K . For all K in \mathcal{M} , \mathbf{x}_K denotes the so-called "centre" of the control volume K under the assumption that K is star-shaped with respect to \mathbf{x}_K . Let \mathcal{F} denote the set of faces of the mesh; we do not assume that these faces are planar, hence the term "generalised polyhedral". We denote by \mathcal{V} the set of vertices of the mesh. Let \mathcal{V}_K , \mathcal{F}_K , \mathcal{V}_σ respectively denote the set of the vertices of $K \in \mathcal{M}$, faces of $K \in \mathcal{M}$, and vertices of $\sigma \in \mathcal{F}$. For any face $\sigma \in \mathcal{F}_K$, we have $\mathcal{V}_\sigma \subset \mathcal{V}_K$.

We assume that Λ is constant on all $K \in \mathcal{M}$, and we denote by Λ_K its value in K .

We define the set $X_{\mathcal{D}}$ as the set of all real families $u = ((u_K)_{K \in \mathcal{M}}, (u_s)_{s \in \mathcal{V}})$, and $X_{\mathcal{D},0} \subset X_{\mathcal{D}}$ as the set the families $u = ((u_K)_{K \in \mathcal{M}}, (u_s)_{s \in \mathcal{V}})$ such that $u_s = 0$ if s is a boundary vertex.

Each face $\sigma \in \mathcal{F}$ with vertices $\{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_\sigma\}$, is decomposed into planar subfaces τ ; there are several ways to obtain such a decomposition, possibly using auxiliary interior vertices which are then defined as barycentric combinations of the original vertices $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_\sigma$ with non-negative weights; these auxiliary vertices are not in \mathcal{V}_σ . Once these triangular subfaces are chosen, the centre of gravity \mathbf{x}_τ of each subface τ can then be expressed by the following barycentric combination:

$$\mathbf{x}_\tau = \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_\sigma} \beta_{\tau, \mathbf{s}} \mathbf{s} \text{ with } \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_\sigma} \beta_{\tau, \mathbf{s}} = 1,$$

where $\beta_{\tau, \mathbf{s}} \geq 0$ for all $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_\sigma$. We then define $\beta_{\tau, \mathbf{s}} = 0$ for all $\mathbf{s} \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{V}_\sigma$. Next, we reconstruct a value u_τ at the point \mathbf{x}_τ , by $u_\tau = \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_\sigma} \beta_{\tau, \mathbf{s}} u_\mathbf{s}$.

We denote by T_K the set of all subfaces of the faces of K and by $d_{K, \tau}$ the Euclidean distance between \mathbf{x}_K and τ . The definition of a consistent expression for the approximation of the gradient, see [20], relies on the following consequence of the Stokes formula

$$\frac{1}{|K|} \sum_{\tau \in T_K} |\tau| (\mathbf{x}_\tau - \mathbf{x}_K) \mathbf{n}_{K, \tau}^t = \text{Id},$$

which implies

$$\sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} \mathbf{b}_{K, \mathbf{s}} (\mathbf{s} - \mathbf{x}_K)^t = \text{Id}, \quad (4.17)$$

where

$$\mathbf{b}_{K, \mathbf{s}} = \frac{1}{|K|} \sum_{\tau \in T_K} \beta_{\tau, \mathbf{s}} |\tau| \mathbf{n}_{K, \tau}. \quad (4.18)$$

The equality (4.17) suggests the following constant value as an approximation of the gradient on cell K .

$$\nabla_K u = \frac{1}{|K|} \sum_{\tau \in T_K} |\tau| (u_\tau - u_K) \mathbf{n}_{K, \tau} = \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} (u_\mathbf{s} - u_K) \mathbf{b}_{K, \mathbf{s}}, \quad \forall u \in X_{\mathcal{D}}.$$

However, it is readily seen that this approximate gradient will not yield a gradient scheme: the coefficient of u_K in the above expression is zero; moreover it may be equal to zero on all cells for a non constant set of unknowns $(u_\mathbf{s})_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}}$ (checker-board modes). In fact, on a regular grid, it resumes to the centred gradient.

Let $(M_{K, \mathbf{s}})_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K}$ be a partition of K such that $|M_{K, \mathbf{s}}| = |K|/N_K$, where N_K is the number of vertices of K (there is no need to define this partition precisely). We first introduce the following consistency error:

$$R_{K, \mathbf{s}} u = u_\mathbf{s} - u_K - \nabla_K u \cdot (\mathbf{s} - \mathbf{x}_K),$$

and we define, for a given $\gamma > 0$, the constant value $\nabla_{K, \mathbf{s}} u$ in $M_{K, \mathbf{s}}$:

$$\nabla_{K, \mathbf{s}} u = \nabla_K u + \gamma R_{K, \mathbf{s}} u \mathbf{b}_{K, \mathbf{s}}, \quad \forall u \in X_{\mathcal{D}}. \quad (4.19)$$

In the numerical implementation, γ was set to 5, after some sensitivity tests.

We now define a piecewise constant gradient by $\nabla_{\mathcal{D}} u(\mathbf{x}) = \nabla_{K, \mathbf{s}} u$ for a.e. $\mathbf{x} \in M_{K, \mathbf{s}}$.

Let us then define the reconstruction operator $\Pi_{\mathcal{D}}$. If we wish the scheme to be a finite volume scheme, we choose the piecewise constant reconstruction operator defined by: $\Pi_{\mathcal{D}}^0 u(\mathbf{x}) = u_K$ for a.e. $\mathbf{x} \in K$. In the case where second order convergence is observed at the points x_K , the piecewise affine reconstruction defined by $\Pi_{\mathcal{D}} u(\mathbf{x}) = u_K + \nabla_K u \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_K)$ for a.e. $\mathbf{x} \in K$ yields a better approximate solution. We shall only perform the convergence analysis with this latter choice since the analysis for the former choice is simpler.

4.3.2 Implementation of the scheme

We remark that Scheme (4.2) may also be written

$$\text{find } u \in X_{\mathcal{D},0}, \forall v \in X_{\mathcal{D},0}, \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} |M_{K,\mathbf{s}}| \Lambda_K \nabla_{K,\mathbf{s}} u \cdot \nabla_{K,\mathbf{s}} v = \sum_{K \in \mathcal{M}} \int_K (v_K + \nabla_K v \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_K)) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

From Section 4.3.1, we get that $\nabla_{K,\mathbf{s}} u$ can be written under the form

$$\nabla_{K,\mathbf{s}} u = \sum_{\mathbf{s}' \in \mathcal{V}_K} (u_{\mathbf{s}'} - u_K) \mathbf{g}_{K,\mathbf{s}}^{\mathbf{s}'},$$

with

$$\mathbf{g}_{K,\mathbf{s}}^{\mathbf{s}'} = \mathbf{b}_{K,\mathbf{s}'} - \gamma \mathbf{b}_{K,\mathbf{s}} (\mathbf{s} - \mathbf{x}_K)^t \mathbf{b}_{K,\mathbf{s}'} + \gamma \delta_{\mathbf{s},\mathbf{s}'} \mathbf{b}_{K,\mathbf{s}}. \quad (4.20)$$

Defining

$$A_K^{\mathbf{s},\mathbf{s}'} = \sum_{\mathbf{s}'' \in \mathcal{V}_K} |M_{K,\mathbf{s}''}| \Lambda_K \mathbf{g}_{K,\mathbf{s}''}^{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{g}_{K,\mathbf{s}''}^{\mathbf{s}'},$$

we get that

$$\sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} |M_{K,\mathbf{s}}| \Lambda_K \nabla_{K,\mathbf{s}} u \cdot \nabla_{K,\mathbf{s}} v = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} \sum_{\mathbf{s}' \in \mathcal{V}_K} A_K^{\mathbf{s},\mathbf{s}'} (u_{\mathbf{s}} - u_K) (v_{\mathbf{s}'} - v_K).$$

Considering the test function $v \in X_{\mathcal{D},0}$ such that the only non zero component of v is $v_K = 1$, the above expression leads to a linear equation which only depends on u_K and $u_{\mathbf{s}}$ for $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K$, hence allowing a local elimination of u_K . Then a linear system on all $u_{\mathbf{s}}$, $\mathbf{s} \in \mathcal{V}$ is obtained by the elimination of all the cell values u_K , resulting in a 27-point stencil on a hexahedral mesh.

4.3.3 Mathematical properties

Lemma 4.3.1 (Gradient scheme properties of the vertex scheme) *Let $\mathcal{D} = (X_{\mathcal{D},0}, h_{\mathcal{D}}, \Pi_{\mathcal{D}}, \nabla_{\mathcal{D}})$ be a discretization in the sense of Definition 4.2.1 with $X_{\mathcal{D},0}, h_{\mathcal{D}}, \Pi_{\mathcal{D}}, \nabla_{\mathcal{D}}$ defined in section 4.3.1, then, for a fixed γ , the scheme (4.2) is a gradient scheme in the sense of Definition 4.2.1, and therefore there exists a unique solution to (4.2). Furthermore, if \mathcal{F} is a family of such discretizations for which there exists $\theta > 0$ such that, for all $\mathcal{D} \in \mathcal{F}$:*

$$\left\{ \begin{array}{l} \theta \leq \frac{d_{K,\tau}}{d_{L,\tau}} \leq 1/\theta \text{ for all neighbouring cells } K \text{ and } L \text{ and for all } \tau \in T_K \cap T_L, \\ d_{K,\tau} > \theta h_K \text{ for all grid cells } K \in \mathcal{M} \text{ and } \tau \in T_K, \\ N_K \leq \frac{1}{\theta}, \text{ for all grid cells } K \in \mathcal{M}, \\ h_K |\mathbf{b}_{K,\mathbf{s}}| \geq \theta, \text{ for all grid cells } K \in \mathcal{M} \text{ and } \mathbf{s} \in \mathcal{V}_K. \end{array} \right. \quad (4.21)$$

the property (P1) of Corollary 4.2.3 is satisfied. Moreover,

$$S_{\mathcal{D}}(\varphi) \leq C_{\varphi} h_{\mathcal{D}}, \quad \forall \varphi \in C_0^2(\overline{\Omega}), \forall \mathcal{D} \in \mathcal{F}, \quad (4.22)$$

where $C_0^2(\overline{\Omega})$ is the set of C^2 functions which vanish on $\partial\Omega$, and

$$W_{\mathcal{D}}(\varphi) \leq C_{\varphi} h_{\mathcal{D}}, \quad \forall \varphi \in (C^1(\overline{\mathbb{R}^d}))^d, \forall \mathcal{D} \in \mathcal{F}. \quad (4.23)$$

Therefore properties (P2) and (P3) of Corollary 4.2.3 are satisfied: the scheme (4.2) is convergent and an error estimate holds in the case of regular solutions.

PROOF. We first need to prove that there exists C_P not depending on the discretization \mathcal{D} , such that

$$\|\Pi_{\mathcal{D}} v\|_{L^2(\Omega)} \leq C_P \|\nabla_{\mathcal{D}} v\|_{L^2(\Omega)^d}, \quad \forall v \in X_{\mathcal{D},0},$$

which shows that $C_{\mathcal{D}}$ remains bounded by C_P .

From the discrete Sobolev embeddings proved in [20, Lemma 5.3], we have the following discrete Poincaré inequality:

$$\|\Pi_{\mathcal{D}}^0 v\|_{L^2(\Omega)} \leq C_1 \|v\|_{1,\mathcal{D}}, \quad \forall v \in X_{\mathcal{D},0}, \quad (4.24)$$

where $\Pi_{\mathcal{D}}^0 v$ is the piecewise constant reconstruction of v defined by: $\Pi_{\mathcal{D}}^0 v(x) = v_K$ for $\mathbf{x} \in K$, $C_1 \geq 0$ depends on Ω and θ only and $\|\cdot\|_{1,\mathcal{D}}$ is the discrete H^1 norm defined by:

$$\|v\|_{1,\mathcal{D}}^2 = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\tau \in T_K} \frac{|\tau|}{d_{K,\tau}} (v_{\tau} - v_K)^2.$$

Let us then show that $\|v\|_{1,\mathcal{D}} \leq C_2 \|\nabla_{\mathcal{D}} v\|_{L^2(\Omega)^d}$ for any $v \in X_{\mathcal{D},0}$, where C_2 only depends on Ω , θ and γ . Thanks to the fact that $|M_{K,s}| = \frac{|K|}{N_K}$, we have

$$\int_{\Omega} |\nabla_{\mathcal{D}} v|^2 \, d\mathbf{x} = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \frac{|K|}{N_K} |\nabla_K v + \gamma R_{K,s} v \mathbf{b}_{K,s}|^2.$$

But, thanks to (4.17), we get:

$$\sum_{s \in \mathcal{V}_K} R_{K,s} v \mathbf{b}_{K,s} = \sum_{s \in \mathcal{V}_K} (v_s - v_K) \mathbf{b}_{K,s} - \sum_{s \in \mathcal{V}_K} (s - \mathbf{x}_K) \mathbf{b}_{K,s}^t \nabla_K v = \nabla_K v - \nabla_K v = 0, \quad (4.25)$$

and therefore:

$$\int_{\Omega} |\nabla_{\mathcal{D}} v|^2 \, d\mathbf{x} = \sum_{K \in \mathcal{M}} \left(|K| |\nabla_K v|^2 + \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \frac{|K|}{N_K} \gamma^2 (R_{K,s} v)^2 |\mathbf{b}_{K,s}|^2 \right).$$

Since for all $a, b \in \mathbb{R}$, and $\mu > -1$ we have $(\frac{a}{\sqrt{1+\mu}} - b\sqrt{1+\mu})^2 \geq 0$, we obtain $(a - b)^2 \geq \frac{\mu}{1+\mu} a^2 - \mu b^2$, and therefore,

$$(R_{K,s} v)^2 \geq \frac{\mu_{K,s}}{1 + \mu_{K,s}} (v_s - v_K)^2 - \mu_{K,s} |\nabla_K v|^2 |s - \mathbf{x}_K|^2,$$

for any $\mu_{K,s} > 0$. Defining $\mu_{K,s} > 0$ by

$$1 - \mu_{K,s} \gamma^2 |\mathbf{s} - x_K|^2 |\mathbf{b}_{K,s}|^2 = 0,$$

we obtain

$$\int_{\Omega} |\nabla_{\mathcal{D}} v(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \geq \gamma^2 \frac{1}{1 + \max_{\substack{K \in \mathcal{M} \\ \mathbf{s} \in \mathcal{V}_K}} \mu_{K,s}} \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} \frac{|K|}{N_K} \frac{(v_{\mathbf{s}} - v_K)^2}{|\mathbf{s} - x_K|^2},$$

and therefore, thanks to the regularity assumption (4.21),

$$\int_{\Omega} |\nabla_{\mathcal{D}} v(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \geq \gamma^2 \frac{1}{1 + C_1} \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} \frac{|K|}{N_K} \frac{(v_{\mathbf{s}} - v_K)^2}{|\mathbf{s} - x_K|^2}. \quad (4.26)$$

where $C_1 \in \mathbb{R}_+$ depends only on θ and γ . Now, since we have

$$(v_{\tau} - v_K)^2 = \left(\sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} \beta_{\tau,s} (v_{\mathbf{s}} - v_K) \right)^2 \leq \left(\sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} \beta_{\tau,s} \right) \left(\sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} \beta_{\tau,s} (v_{\mathbf{s}} - v_K)^2 \right) = \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} \beta_{\tau,s} (v_{\mathbf{s}} - v_K)^2,$$

we get

$$\|v\|_{1,\mathcal{D}}^2 = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\tau \in T_K} \frac{|\tau|}{d(x_K, \tau)} (v_{\tau} - v_K)^2 \leq \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\tau \in T_K} \frac{|\tau|}{d(x_K, \tau)} \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} \beta_{\tau,s} (v_{\mathbf{s}} - v_K)^2,$$

and therefore

$$\|v\|_{1,\mathcal{D}}^2 \leq \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} C_{K,s} (v_{\mathbf{s}} - v_K)^2 \text{ with } C_{K,s} = \sum_{\tau \in T_K} \beta_{\tau,s} \frac{|\tau|}{d_{K,\tau}}.$$

Again thanks to the regularity assumption (4.21), we have $C_{K,s} \leq C_2 \frac{|K|}{N_K |\mathbf{s} - x_K|^2}$ where $C_2 \in \mathbb{R}_+$ only depends on θ . Together with (4.26), this yields that there exists $C_3 \in \mathbb{R}_+$ only depending on Ω , θ and γ such that

$$\|v\|_{1,\mathcal{D}} \leq C_3 \|\nabla_{\mathcal{D}} v\|_{L^2(\Omega)^d},$$

and therefore, thanks to (4.24):

$$\|\Pi_{\mathcal{D}}^0 v\|_{L^2(\Omega)} \leq C_1 C_2 \|\nabla_{\mathcal{D}} v\|_{L^2(\Omega)^d}.$$

Thanks to (4.25), we get that

$$\nabla_K v = \frac{1}{|K|} \int_K \nabla_{\mathcal{D}} v(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (4.27)$$

and therefore, by the triangle inequality:

$$\|\Pi_{\mathcal{D}} v\|_{L^2(\Omega)} \leq \|\Pi_{\mathcal{D}}^0 v\|_{L^2(\Omega)} + h_{\mathcal{D}} \|\nabla_{\mathcal{D}} v\|_{L^2(\Omega)^d}.$$

From the two above inequalities, we conclude the proof of (P1).

Property (P2) is a consequence of the Stokes formula, the proof is similar to that of [20, Lemma 4.3]. Let us now prove (P3). Let $\varphi \in (C^1(\mathbb{R}^d))^d$ be given, and let $v \in X_{\mathcal{D},0}$. Let us compute

$$T_1 = \int_{\Omega} (\nabla_{\mathcal{D}} v(\mathbf{x}) \cdot \varphi(\mathbf{x}) + \Pi_{\mathcal{D}} v(\mathbf{x}) \operatorname{div} \varphi(\mathbf{x})) d\mathbf{x}.$$

Denoting by $\bar{\varphi}_K$ the average value of φ in K , $\bar{\varphi}_{\tau}$ the average value of φ on τ and $\bar{\varphi}_{K,s}$ the average value of φ in $M_{K,s}$, we get $T_1 = T_2 + T_3 + T_4$ with

$$T_2 = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{s \in \mathcal{V}_K} |M_{K,s}| \nabla_{K,s} v \cdot \bar{\varphi}_{K,s}, T_3 = \sum_{K \in \mathcal{M}} v_K \sum_{\tau \in T_K} |\tau| \mathbf{n}_{K,\tau} \cdot \bar{\varphi}_{\tau}$$

$$\text{and } T_4 = \sum_{K \in \mathcal{M}} \int_K \nabla_K v \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_K) \operatorname{div} \varphi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

We have $T_2 = T_{21} + T_{22}$ with

$$T_{21} = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \frac{|K|}{N_K} \nabla_K v \cdot \bar{\varphi}_{K,s}, \text{ and } T_{22} = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \frac{|K|}{N_K} \gamma R_{K,s} v \mathbf{b}_{K,s} \cdot \bar{\varphi}_{K,s}.$$

We get

$$T_{21} = \sum_{K \in \mathcal{M}} |K| \nabla_K v \cdot \bar{\varphi}_K = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\tau \in T_K} |\tau| (v_{\tau} - v_K) \mathbf{n}_{K,\tau} \cdot \bar{\varphi}_K.$$

Remarking that if τ is on the boundary of Ω then $v_{\tau} = 0$ and that otherwise v_{τ} appears in two opposite terms from the two neighbouring cells sharing τ , we have

$$T_3 = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\tau \in T_K} (v_K - v_{\tau}) |\tau| \mathbf{n}_{K,\tau} \cdot \bar{\varphi}_{\tau},$$

we get

$$T_{21} + T_3 = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\tau \in T_K} (v_K - v_{\tau}) |\tau| \mathbf{n}_{K,\tau} \cdot (\bar{\varphi}_{\tau} - \bar{\varphi}_K).$$

Hence, thanks to the Cauchy-Schwarz inequality

$$|T_{21} + T_3| \leq \sqrt{|\Omega|} \|v\|_{1,\mathcal{D}} h_{\mathcal{D}} C_{\varphi}. \quad (4.28)$$

We then use (4.25), and we get

$$T_{22} = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \frac{|K|}{N_K} \gamma R_{K,s} v \mathbf{b}_{K,s} \cdot (\bar{\varphi}_{K,s} - \bar{\varphi}_K).$$

This leads to $|T_{22}| \leq |T_{221}| + |T_{222}|$, with

$$T_{221} = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \frac{|K|}{N_K} \gamma (v_s - v_K) \mathbf{b}_{K,s} \cdot (\bar{\varphi}_{K,s} - \bar{\varphi}_K),$$

and

$$T_{222} = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \frac{|K|}{N_K} \gamma \nabla_K v \cdot (s - \mathbf{x}_K) \mathbf{b}_{K,s} \cdot (\bar{\varphi}_{K,s} - \bar{\varphi}_K).$$

Using the Cauchy-Schwarz inequality and (4.26), we conclude that

$$|T_{22}| \leq h_{\mathcal{D}} C_{\varphi} \|\nabla_{\mathcal{D}} v\|_{L^2(\Omega)^d}. \quad (4.29)$$

Turning now to T_4 and using (4.27), we may write:

$$T_4 \leq h_{\mathcal{D}} \|\nabla_{\mathcal{D}} v\|_{L^2(\Omega)^d} \|\operatorname{div} \boldsymbol{\varphi}\|_{L^2(\Omega)}. \quad (4.30)$$

From (5), (6) and (4.30), we get (4.23), which concludes the proof. \square

Let us now verify the following consistency property, that is useful to assess the precision of the scheme on coarse meshes often used in the industrial setting: if the continuous problem admits an exact piecewise affine solution, then its interpolate is the solution to the scheme. This property is automatically satisfied when using a conforming approximation such as the P1 finite element scheme, but it must be checked for nonconforming approximations.

Lemma 4.3.2 (Exact solution on piecewise affine functions) *Let $\bar{u} = ((\bar{u}_K)_{K \in \mathcal{M}}, (\bar{u}_{\mathbf{s}})_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}}) \in X_{\mathcal{D}}$ such that for all $K \in \mathcal{M}$, there exists $\mathbf{G}_K \in \mathbb{R}^d$ with*

$$\bar{u}_{\mathbf{s}} - \bar{u}_K = (\mathbf{s} - \mathbf{x}_K)^t \cdot \mathbf{G}_K, \quad \forall K \in \mathcal{M}, \quad \forall \mathbf{s} \in \mathcal{V}_K, \quad (4.31)$$

and, such that for any $\tau \in T_K \cap T_L$ included in the interface between two neighbouring blocks K and L ,

$$\Lambda_K \mathbf{G}_K \cdot \mathbf{n}_{K,\tau} + \Lambda_L \mathbf{G}_L \cdot \mathbf{n}_{L,\tau} = 0. \quad (4.32)$$

Then \bar{u} is the unique solution of the discrete diffusion problem with non homogeneous Dirichlet boundary conditions (existence and uniqueness follow from Lemma 4.3.1):

$$u \in X_{\mathcal{D},0} + \bar{u}, \quad \forall v \in X_{\mathcal{D},0}, \quad \int_{\Omega} \Lambda(\mathbf{x}) \nabla_{\mathcal{D}} u(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathcal{D}} v(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0. \quad (4.33)$$

PROOF.

From the definition (4.20) of $\mathbf{g}_{K,\mathbf{s}}^{s'}$, we have:

$$\sum_{\mathbf{s}' \in \mathcal{V}_K} \mathbf{g}_{K,\mathbf{s}}^{s'} = N_K \mathbf{b}_{K,\mathbf{s}'} - \gamma \mathbf{b}_{K,\mathbf{s}'} + \gamma \mathbf{b}_{K,\mathbf{s}'} = N_K \mathbf{b}_{K,\mathbf{s}'}. \quad (4.34)$$

We also have, thanks to (4.17) and (4.31),

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{s}' \in \mathcal{V}_K} (\bar{u}_{\mathbf{s}'} - \bar{u}_K) \mathbf{g}_{K,\mathbf{s}}^{s'} &= \sum_{\mathbf{s}' \in \mathcal{V}_K} \mathbf{b}_{K,\mathbf{s}'} (\mathbf{s}' - \mathbf{x}_K)^t \mathbf{G}_K \\ &\quad - \gamma \sum_{\mathbf{s}' \in \mathcal{V}_K} \mathbf{b}_{K,\mathbf{s}} (\mathbf{s} - \mathbf{x}_K)^t \mathbf{b}_{K,\mathbf{s}'} (\mathbf{s}' - \mathbf{x}_K)^t \mathbf{G}_K + \gamma \mathbf{b}_{K,\mathbf{s}} (\mathbf{s} - \mathbf{x}_K)^t \mathbf{G}_K = \mathbf{G}_K. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Let us write the discrete operator associated to an interior vertex \mathbf{s} :

$$E_{\mathbf{s}} = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\mathbf{s}' \in \mathcal{V}_K} A_K^{s,s'} (\bar{u}_{\mathbf{s}'} - \bar{u}_K) = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\mathbf{s}' \in \mathcal{V}_K} \sum_{\mathbf{s}'' \in \mathcal{V}_K} |M_{K,\mathbf{s}''}| \Lambda_K \mathbf{g}_{K,\mathbf{s}''}^s \cdot \mathbf{g}_{K,\mathbf{s}''}^{s'} (\bar{u}_{\mathbf{s}'} - \bar{u}_K).$$

We then get, using (4.35), that

$$E_s = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{s'' \in \mathcal{V}_K} \frac{|K|}{N_K} \Lambda_K \mathbf{g}_{K,s''}^s \cdot \mathbf{G}_K,$$

and then, using (4.34),

$$E_s = \sum_{K \in \mathcal{M}} \frac{|K|}{N_K} \Lambda_K N_K \mathbf{b}_{K,s} \cdot \mathbf{G}_K.$$

Now we get, setting $\mathbf{n}_{K,\tau} = 0$ if $\tau \notin T_K$, defining $T = \bigcup_{K \in \mathcal{M}} T_K$ and using (4.18) and (4.32),

$$E_s = \sum_{K \in \mathcal{M}} \Lambda_K \sum_{\tau \in T_K} \beta_{\tau,s} |\tau| \mathbf{n}_{K,\tau} \cdot \mathbf{G}_K = \sum_{\tau \in T} \beta_{\tau,s} |\tau| \sum_{K \in \mathcal{M}} \Lambda_K \mathbf{n}_{K,\tau} \cdot \mathbf{G}_K = 0.$$

Hence the discrete operator applied to this particular solution and associated to an internal vertex is indeed equal to 0.

Let us now check that the discrete operator applied to this particular solution and associated to a control volume is also equal to 0.

$$E_K = - \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \sum_{s' \in \mathcal{V}_K} A_K^{s,s'} (\bar{u}_{s'} - \bar{u}_K) = - \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \sum_{s' \in \mathcal{V}_K} \sum_{s'' \in \mathcal{V}_K} |M_{K,s''}| \Lambda_K \mathbf{g}_{K,s''}^s \cdot \mathbf{g}_{K,s''}^{s'} (\bar{u}_{s'} - \bar{u}_K),$$

then, using (4.35),

$$E_K = - \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \sum_{s'' \in \mathcal{V}_K} \frac{|K|}{N_K} \Lambda_K \mathbf{g}_{K,s''}^s \cdot \mathbf{G}_K,$$

which gives, using (4.34),

$$E_K = - \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \frac{|K|}{N_K} \Lambda_K N_K \mathbf{b}_{K,s} \cdot \mathbf{G}_K,$$

and then, thanks to (4.18),

$$E_K = -|K| \Lambda_K \mathbf{G}_K \cdot \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \mathbf{b}_{K,s} = -\Lambda_K \mathbf{G}_K \cdot \sum_{\tau \in T_K} \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \beta_{\tau,s} |\tau| \mathbf{n}_{K,\tau},$$

and finally

$$E_K = -\Lambda_K \mathbf{G}_K \cdot \sum_{\tau \in T_K} |\tau| \mathbf{n}_{K,\tau} = 0.$$

□

Remark 2 In the above proof, we showed in fact that $W_{\mathcal{D}}(\Lambda \nabla \hat{u}) = 0$, where $\hat{u} \in H^1(\Omega)$ is the piecewise affine solution of the non-homogeneous continuous problem. Furthermore, naturally extending the definition of $S_{\mathcal{D}}$ to $H^1(\Omega)$, we also have $S_{\mathcal{D}}(\hat{u}) = 0$.

4.4 A small-stencil cell-centred scheme

Because of the heterogeneity of Λ and the possible coupling with a transport equation, it is often not advisable to apply the above hybrid vertex scheme to the dual cells whose vertices are the cell centres, which would seem to be the simplest approach. Therefore our aim is to again define a scheme by (4.2) and suitable discrete quantities (discrete space, discrete reconstruction, interpolation and gradient), under the constraint that the scheme should be cell centred after the elimination of auxiliary unknowns.

Again, in order for the stencil to remain small (and in particular 27-points on hexahedral structured meshes), the discrete gradient on one given cell should only depend on the values of the cell and its immediate neighbours. Following the idea of the MPFA O-scheme, the most natural strategy is to build some subcells whose vertices are the cell centre, a cell vertex, and some additional points, chosen thanks to suitable properties with respect to the location of the discontinuities of Λ . This is the purpose of the definition of the so-called ‘‘harmonic averaging points’’.

Using the notations of Section 4.3.1, we furthermore assume that, for all $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K$, there exist exactly three faces in \mathcal{F}_K and three edges in \mathcal{E}_K having \mathbf{s} as a vertex, and for all $e \in \mathcal{E}_K$, there exist exactly two faces in \mathcal{F}_K having e as an edge.

4.4.1 Harmonic averaging points

In this section, we recall the construction of the so-called harmonic averaging points, presented in [6]. The idea is to be able, as in the isotropic case, to express the value of u at some point of the interface between two control volumes as a convex combination of the two values of u at the control volume centres. In the case of an homogeneous medium, this point is simply the intersection between the segment formed by the two cell centres and their interface, and the value of u is its linear interpolation. In the case of an heterogeneous isotropic medium, this point is obtained by a harmonic averaging procedure, using (4.37) below, and the value of u is also the harmonic average of the values of u at the two cell centres, using (4.39). Let us then see how we may obtain such a point in the heterogeneous anisotropic case. Consider two domains K and L of \mathbb{R}^3 with different diffusion matrices (or permeabilities) Λ_K and Λ_L , separated by a planar interface σ as depicted in Figure 4.3, and let $\mathbf{x}_K \in K$ and $\mathbf{x}_L \in L$. Let $d_{K,\sigma}$ (resp. $d_{L,\sigma}$) denote the orthogonal distance from x_K (resp. x_L) to σ . We seek some point \mathbf{y}_σ in σ where there exists $\alpha_{K,\sigma} > 0$ and $\alpha_{L,\sigma} > 0$ with $\alpha_{K,\sigma} + \alpha_{L,\sigma} = 1$ such that the relation $u(\mathbf{y}_\sigma) = \alpha_{K,\sigma}u(\mathbf{x}_K) + \alpha_{L,\sigma}u(\mathbf{x}_L)$, holds for any function u such that:

1. u is affine in both K and L ,
2. u is continuous on $\sigma = \partial K \cap \partial L$,
3. the relation

$$\Lambda_K \nabla u(\mathbf{x}_K) \cdot \mathbf{n}_{KL} + \Lambda_L \nabla u(\mathbf{x}_L) \cdot \mathbf{n}_{LK} = 0, \quad (4.36)$$

holds, where \mathbf{n}_{KL} denotes the unit vector, normal to σ , oriented from K to L .

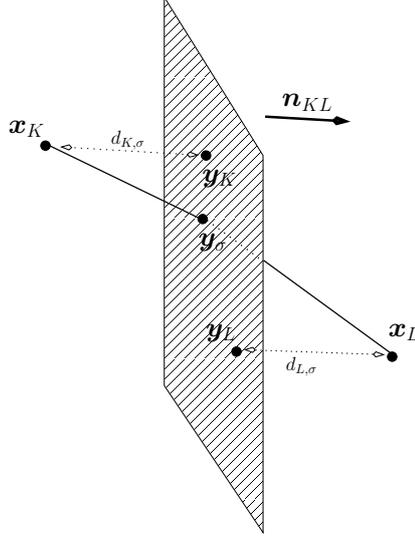


Figure 4.3: Construction of a particular point at the interface

Let $\mathcal{A}_{\sigma,\Lambda}$ denote the set of all functions which satisfy the three above properties; notice that any function $u \in \mathcal{A}_{\sigma,\Lambda}$ is solution to a non homogeneous diffusion problem $-\text{div}(\Lambda(\mathbf{x})\nabla u(\mathbf{x})) = 0$ for a.e. $\mathbf{x} \in K \cup L$.

Therefore, the sought point \mathbf{y}_σ exists and is given by the following formula (see [6]):

$$\mathbf{y}_\sigma = \frac{\lambda_L d_{K,\sigma} \mathbf{y}_L + \lambda_K d_{L,\sigma} \mathbf{y}_K + d_{K,\sigma} d_{L,\sigma} (\boldsymbol{\lambda}_L^\sigma - \boldsymbol{\lambda}_K^\sigma)}{\lambda_L d_{K,\sigma} + \lambda_K d_{L,\sigma}}, \quad (4.37)$$

where, denoting by $\mathcal{P}(\mathbf{x}, \sigma)$ the orthogonal projection on σ of any point \mathbf{x} , we set

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_K &= \mathcal{P}(\mathbf{x}_K, \sigma), & \lambda_K &= \mathbf{n}_{KL} \cdot \Lambda_K \mathbf{n}_{KL}, & \boldsymbol{\lambda}_K^\sigma &= \Lambda_K \mathbf{n}_{KL} - \lambda_K \mathbf{n}_{KL}, \\ \mathbf{y}_L &= \mathcal{P}(\mathbf{x}_L, \sigma), & \lambda_L &= \mathbf{n}_{KL} \cdot \Lambda_L \mathbf{n}_{KL}, & \boldsymbol{\lambda}_L^\sigma &= \Lambda_L \mathbf{n}_{KL} - \lambda_L \mathbf{n}_{KL}. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Then the following averaging formula holds:

$$u(\mathbf{y}_\sigma) = \frac{\lambda_L d_{K,\sigma} u(\mathbf{x}_L) + \lambda_K d_{L,\sigma} u(\mathbf{x}_K)}{\lambda_L d_{K,\sigma} + \lambda_K d_{L,\sigma}}, \quad \forall u \in \mathcal{A}_{\sigma,\Lambda}. \quad (4.39)$$

The verification of this relation relies on the fact that the set of all functions $u \in \mathcal{A}_{\sigma,\Lambda}$ whose values at \mathbf{x}_K and \mathbf{x}_L are imposed is an affine set of dimension 2; indeed, the degrees of freedom of such a function u are for instance the two components of the gradient \mathbf{g}^σ of the restriction of u to σ . We can then show that

$$u(\mathbf{y}) = \frac{\lambda_L d_{K,\sigma} u(\mathbf{x}_L) + \lambda_K d_{L,\sigma} u(\mathbf{x}_K)}{\lambda_L d_{K,\sigma} + \lambda_K d_{L,\sigma}} + \mathbf{g}^\sigma \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{y}_\sigma), \quad \forall \mathbf{y} \in \sigma,$$

which shows (4.39).

4.4.2 Definition of the scheme

As in the case of the vertex scheme, we build a piecewise constant discrete gradient. Let us first define a submesh $(M_{K,\mathbf{s}})_{K \in \mathcal{M}, \mathbf{s} \in \mathcal{V}_K}$ by the following steps:

1. define harmonic averaging points in the faces $\sigma \in \mathcal{F}$;
2. define the “centres” of the edges of the mesh $(\mathbf{y}_e)_{e \in \mathcal{E}}$;
3. define the subcells $M_{K,s}$ of the submesh.

Let us now describe in details each step, all of them referring to Figure 4.4.

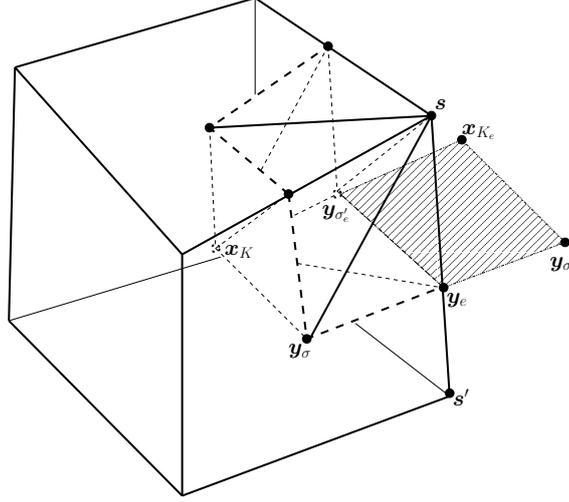


Figure 4.4: Construction of the submesh $M_{K,s}$ of a control volume

4.4.2.1 Definition of harmonic averaging points on the faces

Since we do not assume the faces to be planar, the construction of the harmonic averaging points on the faces are somewhat more tricky than in the 2D case. Let us denote \mathbf{x}_σ the barycentre of the vertices $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_\sigma$, and \mathbf{n}_σ an average unit vector normal to σ (it can be defined as the average of normal vectors to all triangles defined by \mathbf{x}_σ and two consecutive vertices \mathbf{s}, \mathbf{s}' of σ). Let $\sigma \in \mathcal{F}$ be an interface between the two control volumes K and L . We consider the plane P_σ , containing the point \mathbf{x}_σ , orthogonal to \mathbf{n}_σ . We assume that the geometry of the mesh is sufficiently regular, so that:

1. the two points \mathbf{x}_K and \mathbf{x}_L are not on the same side of P_σ ;
2. the harmonic averaging point $\mathbf{y}_\sigma \in P_\sigma$, defined by (4.37), is such that, denoting by \mathbf{s}_i , $i = 1, \dots, N_\sigma$ the ordered vertices of σ (setting $j = i + 1$ for $i < N_\sigma$ and $j = 1$ for $i = N_\sigma$, the determinant of the three vectors $\mathbf{s}_i - \mathbf{y}_\sigma, \mathbf{s}_j - \mathbf{y}_\sigma, \mathbf{n}_\sigma$ is strictly positive) the determinants of the three vectors $\mathbf{s}_i - \mathbf{y}_\sigma, \mathbf{s}_j - \mathbf{y}_\sigma$ and $\mathbf{x}_K - \mathbf{y}_\sigma$ have all the same sign, opposite to that of the determinants of the three vectors $\mathbf{s}_i - \mathbf{y}_\sigma, \mathbf{s}_j - \mathbf{y}_\sigma$ and $\mathbf{x}_L - \mathbf{y}_\sigma$.

The second assumption may not be satisfied in practice in case of a large aspect ratio or large anisotropy ratio. In this case, it is advisable to add a face unknown, as was done in the 2D

case [6]. In Table 4.5 below, we show the number of face unknowns (the so-called hybrid face unknowns) that were added during the implementation the scheme.

We then denote by $\alpha_{K,\sigma}$ and $\alpha_{L,\sigma}$ the two coefficients issued from (4.39):

$$\alpha_{K,\sigma} = \frac{\lambda_K d_{L,\sigma}}{\lambda_L d_{K,\sigma} + \lambda_K d_{L,\sigma}}, \quad \alpha_{L,\sigma} = \frac{\lambda_L d_{K,\sigma}}{\lambda_L d_{K,\sigma} + \lambda_K d_{L,\sigma}}. \quad (4.40)$$

4.4.2.2 Definition of the “edge centres”

For a given edge $e \in \mathcal{E}$, we consider the subset \mathcal{M}_e of all $K \in \mathcal{M}$, such that $e \in \mathcal{E}_K$. For any $K \in \mathcal{M}_e$, let σ and σ' be the two faces of K such that e is an edge of σ and σ' . Assuming that the points \mathbf{x}_K , \mathbf{y}_σ and $\mathbf{y}_{\sigma'}$ are not aligned (this is the case for any reasonable mesh), we can consider the unique plane containing the three points \mathbf{x}_K , \mathbf{y}_σ and $\mathbf{y}_{\sigma'}$: its intersection with the straight line containing e is exactly equal to a unique point, denoted $\mathbf{y}_{K,e}$. We denote by K_e an element of \mathcal{M}_e , such that the point $\mathbf{y}_{K_e,e}$ is the closest to the middle of e . We then assume that $\mathbf{y}_{K_e,e}$, denoted \mathbf{y}_e for simple and called the “centre” of e , belongs to e (see Figure 4.4).

The corresponding faces σ and σ' are then denoted σ_e and σ'_e , to which we associate two coefficients β_e and β'_e such that:

$$\mathbf{y}_e = \mathbf{x}_{K_e} + \beta_e(\mathbf{y}_{\sigma_e} - \mathbf{x}_{K_e}) + \beta'_e(\mathbf{y}_{\sigma'_e} - \mathbf{x}_{K_e}). \quad (4.41)$$

4.4.2.3 Definition of the submesh

Let us now consider, for $K \in \mathcal{M}$ and $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K$, the three faces σ_i , $i = 1, 2, 3$ and the three edges e_i , $i = 1, 2, 3$ having \mathbf{s} as a vertex. We assume that e_i is a common edge to the faces σ_i and σ_j , where $j = i + 1$ for $i = 1, 2$ and $j = 1$ for $i = 3$. We then define $M_{K,\mathbf{s}}$ as the polyhedron such that:

1. its vertices are \mathbf{x}_K , \mathbf{s} , \mathbf{y}_{σ_i} and \mathbf{y}_{e_i} , for $i = 1, 2, 3$;
2. its “hybrid” faces (which will lead to the definition of hybrid unknowns in the sense of [20]) are the triangles with vertices \mathbf{s} , \mathbf{y}_{σ_i} , \mathbf{y}_{e_i} and \mathbf{s} , \mathbf{y}_{σ_j} , \mathbf{y}_{e_i} , where $j = i + 1$ for $i = 1, 2$ and $j = 1$ for $i = 3$; the set of these 6 triangular faces is denoted by $\widehat{\mathcal{F}}_{K,\mathbf{s}}$; we then denote by $\mathbf{y}_{\widehat{\tau}}$ the centre of gravity of such a triangular face $\widehat{\tau}$;
3. its “barycentric” faces (which will lead to the definition of barycentric unknowns in the sense of [20]) are the triangles with vertices \mathbf{x}_K , \mathbf{y}_{σ_i} , \mathbf{y}_{e_i} and \mathbf{x}_K , \mathbf{y}_{σ_j} , \mathbf{y}_{e_i} , where $j = i + 1$ for $i = 1, 2$ and $j = 1$ for $i = 3$; the set of these 6 triangular faces is denoted by $\widetilde{\mathcal{F}}_{K,\mathbf{s}}$; we then denote by $\mathbf{y}_{\widetilde{\tau}}$ the centre of gravity of such a triangular face $\widetilde{\tau}$.

It results from this definition that the volume $M_{K,\mathbf{s}}$ has 8 vertices and 12 triangular faces. We finally define the set $\mathcal{F}_{K,\mathbf{s}} = \widehat{\mathcal{F}}_{K,\mathbf{s}} \cup \widetilde{\mathcal{F}}_{K,\mathbf{s}}$.

4.4.2.4 Definition of the discrete unknown space

Setting $\widehat{\mathcal{F}} = \bigcup_{K \in \mathcal{M}, s \in \mathcal{V}_K} \widehat{\mathcal{F}}_{K,s}$ and $\widetilde{\mathcal{F}} = \bigcup_{K \in \mathcal{M}, s \in \mathcal{V}_K} \widetilde{\mathcal{F}}_{K,s}$, we define the set $X_{\mathcal{D},0}$ as the set of all real families $u = ((u_K)_{K \in \mathcal{M}}, (u_\sigma)_{\sigma \in \mathcal{F}}, (u_e)_{e \in \mathcal{E}}, (u_{\widehat{\tau}})_{\widehat{\tau} \in \widehat{\mathcal{F}}}, (u_{\widetilde{\tau}})_{\widetilde{\tau} \in \widetilde{\mathcal{F}}})$ such that:

1. for all exterior face $\sigma \in \mathcal{F}$, $u_\sigma = 0$, for all exterior face $\widehat{\tau} \in \widehat{\mathcal{F}}$, $u_{\widehat{\tau}} = 0$, for all exterior edge $e \in \mathcal{E}$, $u_e = 0$;
2. for all interior face $\sigma \in \mathcal{F}$, interface between the two control volumes K and L , using (4.40),

$$u_\sigma = \alpha_{K,\sigma} u_K + \alpha_{L,\sigma} u_L;$$

3. for all interior edge $e \in \mathcal{E}$, and K_e defined as in Section 4.4.2.2. Then, using (4.41),

$$u_e = u_{K_e} + \beta_e (u_{\sigma_e} - u_{K_e}) + \beta'_e (u_{\sigma'_e} - u_{K_e});$$

4. for all "barycentric" triangular face $\widetilde{\tau} \in \widetilde{\mathcal{F}}$ with vertices $\mathbf{x}_K, \mathbf{y}_\sigma, \mathbf{y}_e$ set

$$u_{\widetilde{\tau}} = \frac{1}{3} (u_K + u_\sigma + u_e).$$

Hence the degrees of freedom of $X_{\mathcal{D},0}$ are the values u_K , for $K \in \mathcal{M}$, and the values u_σ , for $\sigma \in \widehat{\mathcal{F}}_{\text{int}}$, which are the interior faces of $\widehat{\mathcal{F}}$.

4.4.2.5 Definition of an approximate gradient and of a reconstruction operator

We first define, for all $u \in X_{\mathcal{D},0}$, for all $K \in \mathcal{M}$ and $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K$:

$$\nabla_{K,\mathbf{s}} u = \frac{1}{|M_{K,\mathbf{s}}|} \sum_{\tau \in \mathcal{F}_{K,\mathbf{s}}} |\tau| (u_\tau - u_K) \mathbf{n}_{K,\mathbf{s}}^\tau, \quad (4.42)$$

where $\mathbf{n}_{K,\mathbf{s}}^\tau$ is the unit normal vector, outward to $M_{K,\mathbf{s}}$, to the triangular face τ . As in the vertex centred case, this expression yields a consistent expression of the gradient. In order to enhance the stability of this gradient, we define

$$R_{K,\mathbf{s}}^\tau u = u_\tau - u_K - \nabla_{K,\mathbf{s}} u \cdot (\mathbf{y}_\tau - \mathbf{x}_K), \quad \forall \tau \in \mathcal{F}_{K,\mathbf{s}}, \quad (4.43)$$

and

$$\nabla_{K,\mathbf{s}}^\tau u = \nabla_{K,\mathbf{s}} u + \gamma R_{K,\mathbf{s}}^\tau u \frac{|\tau|}{|M_{K,\mathbf{s}}|} \mathbf{n}_{K,\mathbf{s}}^\tau. \quad (4.44)$$

where $\gamma > 0$ is a positive coefficient, whose standard value is 1 in the numerical tests. We then denote by $(M_{K,\mathbf{s}}^\tau)_{\tau \in \mathcal{F}_{K,\mathbf{s}}}$ a partition of $M_{K,\mathbf{s}}$ such that $|M_{K,\mathbf{s}}^\tau| = |M_{K,\mathbf{s}}|/N_{K,\mathbf{s}}$, where $N_{K,\mathbf{s}}$ is the number of elements of $\mathcal{F}_{K,\mathbf{s}}$; note that again, this partition does not need to be defined precisely. We then define $\nabla_{\mathcal{D}} u$ by the constant value $\nabla_{K,\mathbf{s}}^\tau u$ in $M_{K,\mathbf{s}}^\tau$.

As in Section 4.3, the piecewise constant reconstruction $\Pi_{\mathcal{D}}^0 v$ is defined as the function equal to v_K in each K , and the piecewise affine reconstruction is defined by $\Pi_{\mathcal{D}} u(\mathbf{x}) = u_K + \nabla_{K,\mathbf{s}} u \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_K)$ for a.e. $\mathbf{x} \in M_{K,\mathbf{s}}$ for all $K \in \mathcal{M}$.

4.4.2.6 Definition and implementation of the scheme

Problem (4.1) is again approximated by (4.2), which can also be written in the framework of this scheme

$$\begin{aligned} & \text{find } u \in X_{\mathcal{D},0}, \forall v \in X_{\mathcal{D},0}, \\ & \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} \sum_{\tau \in \mathcal{F}_{K,\mathbf{s}}} |M_{K,\mathbf{s}}^\tau| \Lambda_K \nabla_{K,\mathbf{s}}^\tau u \cdot \nabla_{K,\mathbf{s}}^\tau v = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} \int_{M_{K,\mathbf{s}}} (v_K + \nabla_{K,\mathbf{s}} v \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_K)) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Let us now detail the equations resulting from Scheme (4.45).

We first define the linear forms $F_{K,\mathbf{s}}^\tau$, only depending on $(u_{\tau'} - u_K)_{\tau' \in \widehat{\mathcal{F}}_{K,\mathbf{s}}}$, such that the relation

$$\sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} \sum_{\tau \in \mathcal{F}_{K,\mathbf{s}}} |M_{K,\mathbf{s}}^\tau| \Lambda_K \nabla_{K,\mathbf{s}}^\tau u \cdot \nabla_{K,\mathbf{s}}^\tau v = \sum_{\tau \in \mathcal{F}_{K,\mathbf{s}}} F_{K,\mathbf{s}}^\tau u (v_K - v_\tau) \quad (4.46)$$

holds for all real values $(u_{\tau'} - u_K)_{\tau' \in \mathcal{F}_{K,\mathbf{s}}}$ and $(v_{\tau'} - v_K)_{\tau' \in \mathcal{F}_{K,\mathbf{s}}}$. Assume that $\widehat{\tau}$ is a common face to $M_{K,\mathbf{s}}$ and $M_{L,\mathbf{s}'}$. Then the equation, resulting from setting $v_{\widehat{\tau}} = 1$ and all other degrees of freedom equal to 0, is

$$F_{K,\mathbf{s}}^{\widehat{\tau}} u + F_{L,\mathbf{s}'}^{\widehat{\tau}} u = \rho^{\widehat{\tau}}(f), \quad (4.47)$$

where

$$\rho^{\widehat{\tau}}(f) = \frac{1}{|M_{K,\mathbf{s}}|} \int_{M_{K,\mathbf{s}}} |\tau| \mathbf{n}_{K,\mathbf{s}}^\tau \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_K) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \frac{1}{|M_{L,\mathbf{s}'}|} \int_{M_{L,\mathbf{s}'}} |\tau| \mathbf{n}_{L,\mathbf{s}'}^\tau \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_L) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

Note that if we use $\Pi_{\mathcal{D}}^0$ instead of $\Pi_{\mathcal{D}}$, $\rho^{\widehat{\tau}}(f) = 0$ and therefore the flux conservation of the external faces is ensured. Since there are as many equations (4.47), as there are triangular faces having \mathbf{s} as a vertex, it is possible to eliminate all the unknowns $u_{\widehat{\tau}}$, expressing them with respect to all $(u_K)_{K \in \mathcal{M}_{\mathbf{s}}}$, where $\mathcal{M}_{\mathbf{s}}$ denotes, for a given $\mathbf{s} \in \mathcal{V}$, the subset of all $K \in \mathcal{M}$ such that $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K$. We indeed show in the next section that the system (4.47) is invertible. Let us now study the stencil of the scheme. Using the definition of the space $X_{\mathcal{D},0}$, due to the definition of harmonic averaging values at the faces and due to the interpolation u_e at the point \mathbf{y}_e , we can write, for $v \in X_{\mathcal{D},0}$ and for a given triangular face $\widetilde{\tau} \in \widetilde{\mathcal{F}}_{K,\mathbf{s}}$,

$$v_{\widetilde{\tau}} = \sum_{L \in \mathcal{M}_e} \beta_{\widetilde{\tau},L} v_L, \quad (4.48)$$

where $e \in \mathcal{E}$ is an edge such that \mathbf{y}_e is a vertex of $\widetilde{\tau}$, and where we denote \mathcal{M}_e the set of all $L \in \mathcal{M}$ such that $e \in \mathcal{E}_L$. Note that the condition

$$\sum_{L \in \mathcal{M}_e} \beta_{\widetilde{\tau},L} = 1$$

holds in the case where the control volume K has no vertex on the boundary of the domain. An important consequence is that, if $\mathcal{V}_e = \{\mathbf{s}, \mathbf{s}'\}$ (see Figure 4.4), then

$$\mathcal{M}_e \subset \mathcal{M}_{\mathbf{s}} \cap \mathcal{M}_{\mathbf{s}'}$$

We then set $\beta_{\widetilde{\tau},L} = 0$ for all $L \in (\mathcal{M}_{\mathbf{s}} \cup \mathcal{M}_{\mathbf{s}'}) \setminus \mathcal{M}_e$.

It results from this relation that the equation, obtained by setting $v_K = 1$ in (4.45) and all other degrees of freedom equal to 0, reads

$$\sum_{s \in \mathcal{V}_K} \left(\sum_{\hat{\tau} \in \hat{\mathcal{F}}_{K,s}} F_{K,s}^{\hat{\tau}} u + \sum_{\tilde{\tau} \in \tilde{\mathcal{F}}_{K,s}} F_{K,s}^{\tilde{\tau}} u - \sum_{L \in \mathcal{M}_s} \sum_{\tilde{\tau} \in \tilde{\mathcal{F}}_{L,s}} \beta_{\tilde{\tau},K} F_{L,s}^{\tilde{\tau}} u \right) = \rho_K(f), \quad (4.49)$$

where

$$\rho_K(f) = \int_K f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \sum_{\hat{\tau} \in \hat{\mathcal{F}}_{K,s}} \frac{1}{|M_{K,s}|} \int_{M_{K,s}} |\tau| \mathbf{n}_{K,s}^{\tau} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_K) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

Note that if we use $\Pi_{\mathcal{D}}^0$ instead of $\Pi_{\mathcal{D}}$, we get $\rho_K(f) = \int_K f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$. From (4.49), we get that (4.45) is indeed a symmetric 27-point stencil scheme in the case of a structured mesh.

4.4.3 Mathematical analysis

Lemma 4.4.1 (Gradient scheme properties and invertibility of the local systems)

Let $\mathcal{D} = (X_{\mathcal{D},0}, h_{\mathcal{D}}, \Pi_{\mathcal{D}}, \nabla_{\mathcal{D}})$ be defined in the present section 4.4, then, for a fixed γ , the scheme (4.2) is a gradient scheme in the sense of Definition 4.2.1, and therefore there exists a unique solution to (4.2). Furthermore, the local systems (4.47) are invertible.

PROOF. The proof of this lemma follows the first steps of the proof of Lemma 4.3.1. We first remark that, for any $u \in X_{\mathcal{D},0}$,

$$\int_{\Omega} |\nabla_{\mathcal{D}} u(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{s \in \mathcal{V}_K} \sum_{\tau \in \mathcal{F}_{K,s}} \frac{|M_{K,s}|}{N_{K,s}} |\nabla_{K,s}^{\tau} u|^2.$$

The following property (which is similar to (4.25)) holds

$$\begin{aligned} \sum_{\tau \in \mathcal{F}_{K,s}} R_{K,s}^{\tau} u \frac{|\tau|}{|M_{K,s}|} \mathbf{n}_{K,s}^{\tau} &= \sum_{\tau \in \mathcal{F}_{K,s}} \left((u_{\tau} - u_K) \frac{|\tau|}{|M_{K,s}|} \mathbf{n}_{K,s}^{\tau} - \frac{|\tau|}{|M_{K,s}|} (\mathbf{y}_{\tau} - \mathbf{x}_K) (\mathbf{n}_{K,s}^{\tau})^t \nabla_{K,s} u \right) \\ &= \nabla_{K,s} u - \nabla_{K,s} u = 0. \end{aligned} \quad (4.50)$$

It implies

$$\sum_{\tau \in \mathcal{F}_{K,s}} \frac{|M_{K,s}|}{N_{K,s}} |\nabla_{K,s}^{\tau} u|^2 = |M_{K,s}| |\nabla_{K,s} u|^2 + \sum_{\tau \in \mathcal{F}_{K,s}} \frac{|M_{K,s}|}{N_{K,s}} \left(\gamma R_{K,s}^{\tau} u \frac{|\tau|}{|M_{K,s}|} \right)^2.$$

As in the proof of Lemma 4.4.1, we again have, for a value $\mu_{K,s}^{\tau}$ chosen later, that

$$(R_{K,s}^{\tau} u)^2 \geq \frac{\mu_{K,s}^{\tau}}{1 + \mu_{K,s}^{\tau}} (u_{\tau} - u_K)^2 - \mu_{K,s}^{\tau} |\nabla_{K,s} u|^2 |\mathbf{y}_{\tau} - \mathbf{x}_K|^2. \quad (4.51)$$

We define $\mu_{K,s}^\tau > 0$ by

$$1 - \mu_{K,s}^\tau \gamma^2 |\mathbf{y}_\tau - \mathbf{x}_K|^2 \left(\frac{|\tau|}{|M_{K,s}|} \right)^2 = 0, \quad \forall K \in \mathcal{M}_s.$$

This proves, introducing C_μ as the maximum value of all $\mu_{K,s}^\tau$,

$$\int_{\Omega} |\nabla_{\mathcal{D}} u(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \geq \frac{1}{1 + C_\mu} \|u\|_{1,\mathcal{D}}^2, \quad (4.52)$$

where:

$$\|u\|_{1,\mathcal{D}}^2 = \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K} \sum_{\tau \in \mathcal{F}_{K,s}} \frac{|M_{K,s}|}{N_{K,s}} \frac{(u_\tau - u_K)^2}{|\mathbf{y}_\tau - \mathbf{x}_K|^2}.$$

A first consequence of (4.52) is that the local system of equations (4.47), written for all $\hat{\tau} \in \bigcup_{K \in \mathcal{M}_s} \hat{\mathcal{F}}_{K,s}$, whose unknowns are the values $u_{\hat{\tau}}$, is invertible. Indeed, assume that all $u_K = 0$ for all $K \in \mathcal{M}$ and $u_\tau = 0$ for all $\tau \notin \bigcup_{K \in \mathcal{M}_s} \hat{\mathcal{F}}_{K,s}$. We multiply (4.47) by $-u_{\hat{\tau}}$, and sum the resulting equation on $\hat{\tau} \in \bigcup_{K \in \mathcal{M}_s} \hat{\mathcal{F}}_{K,s}$. We get

$$\sum_{K \in \mathcal{M}_s} \sum_{\hat{\tau} \in \hat{\mathcal{F}}_{K,s}} (0 - u_{\hat{\tau}}) F_{K,s}^{\hat{\tau}} u = 0.$$

For this particular choice of $u \in X_{\mathcal{D},0}$, we get from (4.46) that

$$\sum_{K \in \mathcal{M}_s} \sum_{\hat{\tau} \in \hat{\mathcal{F}}_{K,s}} (0 - u_{\hat{\tau}}) F_{K,s}^{\hat{\tau}} u = \int_{\Omega} \Lambda(\mathbf{x}) \nabla_{\mathcal{D}} u(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathcal{D}} u(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

From (4.52), we then prove that $(u_\tau - u_K) = 0$ for all $K \in \mathcal{M}$, $\mathbf{s} \in \mathcal{V}_K$ and $\tau \in \mathcal{F}_{K,s}$. This implies in particular that $u_{\hat{\tau}} = 0$ for all $\hat{\tau} \in \bigcup_{K \in \mathcal{M}_s} \hat{\mathcal{F}}_{K,s}$, thus proving the invertibility of system (4.47).

A second consequence of (4.52) is that $\|\nabla_{\mathcal{D}} \cdot\|_{L^2(\Omega)^d}$ is a norm on $X_{\mathcal{D},0}$, which concludes the proof. \square

This scheme may then be shown to be convergent and exact for piecewise affine solutions with the same tools as those developed in Section 4.3, thanks to the fact that the barycentric extrapolations involved in the definition of the scheme are all defined through the values taken within the closure of the same cell.

4.5 Numerical results

In this section, some test cases have been done in order to compare the exact solution and the approximate solutions obtained with MPFA O and L schemes and the new gradient schemes which we denote by VAG for the Vertex Approximate Gradient scheme, and HAG for the Harmonic Approximate Gradient scheme. Several tests are taken from the FVCA Benchmark 3D [23]. Therein additional results on the VAG scheme are presented for a larger family of numerical tests and for several criteria of comparison.

4.5.1 Randomly distorted Cartesian meshes

A family of uniform Cartesian meshes of the domain $\Omega = [0, 1]^3$ of step size h is considered. A displacement of maximum length $\frac{h}{3}$ is applied in the xyz -directions to each node of the Cartesian meshes as exhibited in Figure 4.6(a).

Homogeneous case. The right hand side f and the Dirichlet boundary condition are such that the exact solution is $u(x, y, z) = \sin(\pi x)\sin(\pi y)\sin(\pi z)$. Two different diffusion tensors $\Lambda_1 = \text{diag}(1, 1, 100)$ and $\Lambda_2 = \text{diag}(1, 1, 1000)$ are considered. Tables 4.1 and 4.2 below exhibit the discrete L^2 norm of the error between the exact solution and the approximate solutions obtained with MPFA O and L schemes and the new gradient schemes.

	mesh 1	mesh 2	mesh 3	mesh 4
VAG Scheme	4.57e-02	1.23e-02	2.85e-03	7.18e-04
HAG Scheme	7.58e-02	2.28e-02	7.29e-03	1.79e-03
O Scheme	8.04e-02	2.30e-02	5.31e-03	1.38e-03
L Scheme	2.76e-02	9.83e-03	2.53e-03	7.07e-04

Table 4.1: L^2 norm of the error for Λ_1 and randomly distorted Cartesian meshes.

	mesh 1	mesh 2	mesh 3	mesh 4
VAG Scheme	4.59e-02	1.24e-02	2.91e-03	7.39e-04
HAG Scheme	7.81e-02	2.46e-02	9.76e-03	2.77e-03
O Scheme	9.70e-01	1.85e-01	8.92e-01	9.02e-01
L Scheme	2.40e-02	9.98e-03	4.01e-03	1.94e-03

Table 4.2: L^2 norm of the error for Λ_2 and randomly distorted Cartesian meshes.

In Figure 4.5 the L^2 norm of the error is plotted as a function of h . Observe first that the smallest errors are obtained with the L scheme or the VAG scheme. Comparing the Figures 4.5(a) and 4.5(b), we clearly see the failure of the O scheme when the anisotropy increases while the L scheme, the VAG scheme and the HAG schemes remain convergent. This is due to the loss of coercivity of the O scheme when a large anisotropic ratio is combined with a distortion of the mesh. Note that for these tests, harmonic points were found for all the interfaces with the HAG scheme, so that no additional hybrid unknown was required.

Heterogeneous case. The test case presented here is described in [3]. We still consider a family of randomly perturbed grids of the domain $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ where $\Omega_1 = [0, 1] \times [0, 0.5] \times [0, 1]$ and $\Omega_2 = [0, 1] \times [0.5, 1] \times [0, 1]$. Notice that the perturbation is applied in the xy -directions on each nodes except at $y = 0.5$ such that the discontinuity is planar as shown in Figure 4.6(b).

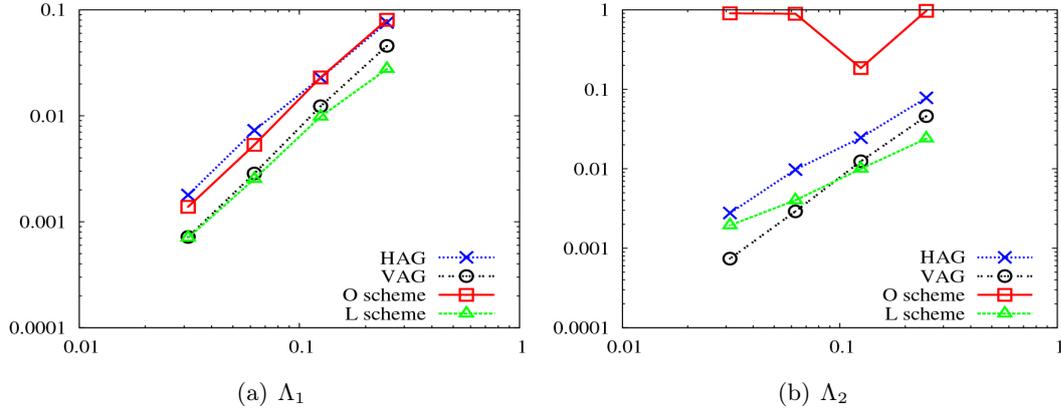


Figure 4.5: L^2 pressure error function of h - randomly distorted Cartesian meshes.

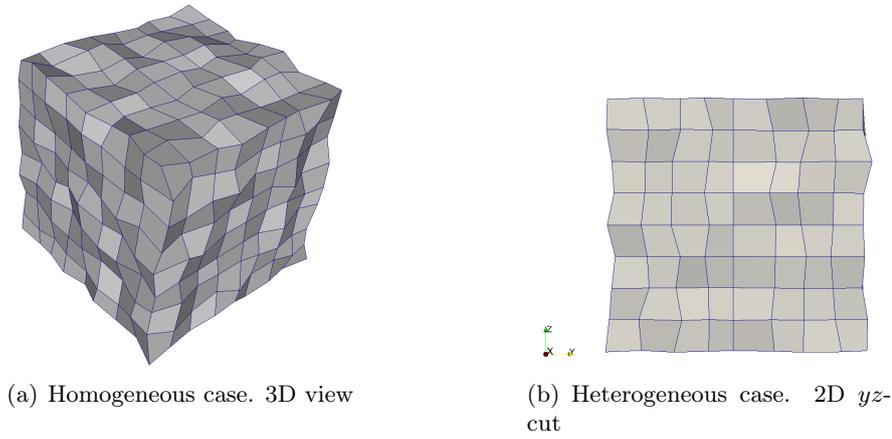


Figure 4.6: Randomly distorted hexahedral mesh for $h = \frac{1}{8}$.

The right hand side is $f = 0$ and the Dirichlet boundary condition are given by the exact solution $u(x, y, z)$ defined by

$$u(x, y, z) = \begin{cases} x + y + z & \text{in } \Omega_1, \\ x - \frac{y}{2} + z + \frac{3}{4} & \text{in } \Omega_2. \end{cases}$$

The following permeability tensors Λ_1 and Λ_2 are respectively assigned to the subdomains Ω_1 and Ω_2 ,

$$\Lambda_1 = \text{diag}(1, 1, 1) \quad \text{and} \quad \Lambda_2 = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

As expected, the VAG and HAG schemes provide the exact solution if Λ is piecewise constant in polygonal sub-domains and $u(x, y, z)$ is affine in each of these sub-domains.

4.5.2 Near-well meshes

As we mentioned in the introduction, in reservoir engineering, a proper well modelling requires an accurate multiphase flow simulation which takes into account the singular pressure distribution in the well vicinity and the large difference of scales between the wellbore radius and the reservoir dimension. In this example, we consider the numerical simulation of a single-phase flow in near-well regions for a deviated well. The medium is homogeneous, but anisotropic. An analytical solution of this problem is described in [4] for a diagonal diffusion tensor in the xyz -coordinate system. Diagonal elements are denoted as Λ_x , Λ_y and Λ_z .

The near-well model proposed here is based on 3D meshes that are refined around the well as illustrated in Figure 4.1. The first step of the discretization is to create a radial mesh that is exponentially refined down to the well boundary. This radial local refinement requires a matching mesh between the radial grid and the reservoir Cartesian (or "corner point geometry") grid using hexaedra.

Given $\Lambda_x = \Lambda_y = \eta\Lambda_z$, two anisotropy ratios η are tested, $\eta = 5$ and $\eta = 20$. The discrete equation is solved as a Dirichlet problem, with the analytical solution imposed both on the wellbore boundary and the outer boundary. Figure 4.7 exhibits the discrete solution. It can be noticed that the isobars shade into ellipses away from the circular wellbore.

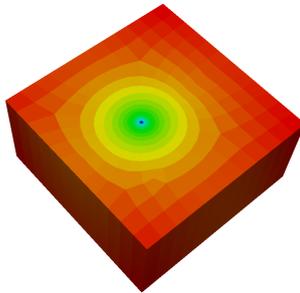


Figure 4.7: Solution computed with the near-well mesh 4 and $\eta = 5$.

Tables 4.3 and 4.4 below exhibit the error measured in L^2 norm between the exact solution and the approximate solutions obtained with the MPFA O and L schemes and the new gradient schemes.

The new gradient schemes are more accurate than the O and L schemes, particularly on coarse meshes. For finer meshes, the non planarity of the faces diminishes, and therefore the behaviour of the schemes is more uniform. On coarse meshes, the fact that the VAG and HAG schemes define subcells with triangular subfaces makes them less sensitive to the non planarity problems than the O and L schemes.

	mesh 1	mesh 2	mesh 3	mesh 4	mesh 5	mesh 6	mesh 7
VAG Scheme	4.82e-03	2.02e-03	8.56e-04	5.54e-04	2.99e-04	1.47e-04	1.52e-04
HAG Scheme	3.80e-03	1.90e-03	9.21e-04	5.46e-04	3.86e-04	2.70e-04	2.34e-04
O Scheme	7.49e-03	3.00e-03	1.31e-03	7.88e-04	4.70e-04	2.94e-04	2.04e-04
L Scheme	7.34e-03	2.95e-03	1.33e-03	8.03e-04	5.00e-04	3.44e-04	2.34e-04

Table 4.3: L^2 norm of the error for $\eta = 5$ and near-well meshes.

	mesh 1	mesh 2	mesh 3	mesh 4	mesh 5	mesh 6	mesh 7
VAG Scheme	5.50e-03	2.42e-03	1.04e-03	6.57e-04	3.22e-04	1.37e-04	1.25e-04
HAG Scheme	4.82e-03	2.32e-03	1.17e-03	6.14e-04	3.94e-04	2.63e-04	2.01e-04
O Scheme	9.25e-03	3.71e-03	1.63e-03	9.66e-04	5.69e-04	3.55e-04	2.44e-04
L Scheme	9.03e-03	3.62e-03	1.65e-03	9.83e-04	6.07e-04	4.23e-04	2.84e-04

Table 4.4: L^2 norm of the error for $\eta = 20$ and near-well meshes.

In Figure 4.8, the L^2 norm of the error is plotted as a function of h , where h is the diameter of the largest cell in the radial part of meshes. Comparing the Figures 4.8(a) and 4.8(b), we see that the gradient schemes are more robust when the ratio of anisotropy increases especially on the finest mesh. The rate of convergence is h^2 for all schemes.

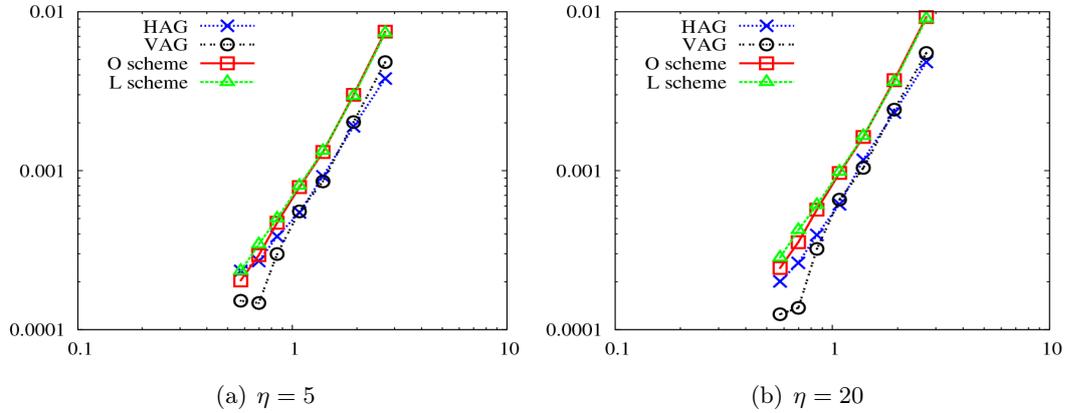


Figure 4.8: L^2 pressure error function of h - near-well meshes.

Table 4.5 below shows that the number of hybrid unknowns introduced by the HAG scheme is negligible compared to the number of the cell-centred unknowns.

	mesh 1	mesh 2	mesh 3	mesh 4	mesh 5	mesh 6	mesh 7
# control volumes	890	2232	5016	11220	23210	42633	74679
# hybrid faces	0	32	0	0	24	40	44

Table 4.5: Number of hybrid unknowns introduced by the HAG scheme with near-well meshes.

4.6 Conclusion

In this paper, a simple theoretical framework for the study of gradient schemes was shown to include some classical schemes along with two new schemes which were specially designed to obtain small stencils. Thanks to this theoretical framework, these two schemes are shown to be symmetric, coercive and convergent. A numerical comparison with classical multi-point schemes on realistic industrial 3D cases allows to check the numerical performance of the schemes.

The robustness of such schemes gives them a large advantage over schemes whose coercivity properties are not shown nor numerically verified on some very heterogeneous anisotropic realistic cases. Their symmetry properties allow the use of conjugate gradient methods, whereas BICGStab or GMRES methods are needed in the case of non-symmetric methods. Moreover, their small stencil is adapted to domain decomposition techniques and parallelization.

On going research includes the numerical study of the use of these new schemes for industrial compositional/chemical multi-phase flows in porous media, which occur in reservoir engineering, CO₂ storage studies and environmental studies. Recently, we implemented the VAG scheme in the framework of multiphase flow [22] with promising results. This implementation is based on exchange terms between vertices and cells, thus showing that there is no need to identify a real control volume interface to compute the Darcy fluxes.

Bibliography

- [1] I. Aavatsmark. An introduction to multipoint flux approximations for quadrilateral grids. *Comput. Geosci.*, 6(3-4):405–432, 2002. Locally conservative numerical methods for flow in porous media.
- [2] I. Aavatsmark, T. Barkve, O. Boe, and T. Mannseth. Discretization on non-orthogonal, quadrilateral grids for inhomogeneous, anisotropic media. *J. Comput. Phys.*, 127(1):2–14, 1996.
- [3] I. Aavatsmark, G. Eigestad, B. Heimsund, B. Mallison, J. Nordbotten, and E. Oian. A New Finite-Volume Approach to Efficient Discretization on Challenging Grids. *SPE Journal*, 15(3):658–669, 2010.
- [4] I. Aavatsmark and R. Klausen. Well index in reservoir simulation for slanted and slightly curved wells in 3D grids. *SPE Journal*, 8(1):41–48, 2003.
- [5] L. Agelas, D. A. Di Pietro, and R. Masson. A symmetric and coercive finite volume scheme for multiphase porous media flow problems with applications in the oil industry. In *Finite volumes for complex applications V*, pages 35–51. ISTE, London, 2008.
- [6] L. Agelas, R. Eymard, and R. Herbin. A nine-point finite volume scheme for the simulation of diffusion in heterogeneous media. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 347(11-12):673–676, 2009.
- [7] B. Andreianov, M. Bendahmane, and K. Karlsen. A gradient reconstruction formula for finite-volume schemes and discrete duality. In *Finite volumes for complex applications V*, pages 161–168. ISTE, London, 2008.
- [8] B. Andreianov, M. Bendahmane, K. H. Karlsen, and C. Pierre. Convergence of discrete duality finite volume schemes for the cardiac bidomain model. *Networks and Heterogeneous Media*, In Press:1–45, 2011.
- [9] F. Boyer and F. Hubert. Finite volume method for 2D linear and nonlinear elliptic problems with discontinuities. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 46(6):3032–3070, 2008.

- [10] F. Brezzi, A. Buffa, and K. Lipnikov. Mimetic finite differences for elliptic problems. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 43(2):277–295, 2008.
- [11] Y. Coudière and F. Hubert. A 3D discrete duality finite volume method for nonlinear elliptic equations. 35J65, 65N15, 74S10.
- [12] Y. Coudière, C. Pierre, O. Rousseau, and R. Turpault. 2D/3D discrete duality finite volume scheme (DDFV) applied to ECG simulation. A DDFV scheme for anisotropic and heterogeneous elliptic equations, application to a bio-mathematics problem: electrocardiogram simulation. In *Finite volumes for complex applications V*, pages 313–320. ISTE, London, 2008.
- [13] Y. Coudière, C. Pierre, O. Rousseau, and R. Turpault. A 2D/3D discrete duality finite volume scheme. Application to ECG simulation. *Int. J. Finite Vol.*, 6(1):24, 2009.
- [14] Y. Coudière, J.-P. Vila, and P. Villedieu. Convergence rate of a finite volume scheme for a two-dimensional convection-diffusion problem. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 33(3):493–516, 1999.
- [15] K. Domelevo and P. Omnes. A finite volume method for the Laplace equation on almost arbitrary two-dimensional grids. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 39(6):1203–1249, 2005.
- [16] J. Droniou, R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. A unified approach to mimetic finite difference, hybrid finite volume and mixed finite volume methods. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 20(2):265–295, 2010.
- [17] A. Ern and J.-L. Guermond. *Theory and practice of finite elements*, volume 159 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 2004.
- [18] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. Finite volume methods. In *Handbook of numerical analysis, Vol. VII*, Handb. Numer. Anal., VII, pages 713–1020. North-Holland, Amsterdam, 2000.
- [19] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. A new finite volume scheme for anisotropic diffusion problems on general grids: convergence analysis. *C. R., Math., Acad. Sci. Paris*, 344(6):403–406, 2007.
- [20] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. Discretisation of heterogeneous and anisotropic diffusion problems on general non-conforming meshes, SUSHI: a scheme using stabilisation and hybrid interfaces. *IMA J. Numer. Anal.*, 30(4):1009–1043, 2010. see also <http://hal.archives-ouvertes.fr/>.
- [21] R. Eymard, T. Gallouët, and P. Joly. Hybrid finite element techniques for oil recovery simulation. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 74(1):83–98, 1989.
- [22] R. Eymard, C. Guichard, R. Herbin, and R. Masson. Multiphase flow in porous media using the VAG scheme,. In J. Fort, J. Furst, J. Halama, R. Herbin, and F. Hubert, editors, *Finite Volumes for Complex Applications VI – Problems and Perspectives*, pages 409–417. Springer Proceedings in Mathematics, 2011.

- [23] R. Eymard, G. Henry, R. Herbin, F. Hubert, R. Kloefkorn, and G. Manzini. 3D benchmark on discretization schemes for anisotropic diffusion problem on general grids. In J. Fort, J. Furst, J. Halama, R. Herbin, and F. Hubert, editors, *Finite Volumes for Complex Applications VI – Problems and Perspectives*, pages 95–130. Springer Proceedings in Mathematics, 2011.
- [24] I. Faille. A control volume method to solve an elliptic equation on a two-dimensional irregular mesh. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 100(2):275–290, 1992.
- [25] R. Herbin and F. Hubert. Benchmark on discretization schemes for anisotropic diffusion problems on general grids for anisotropic heterogeneous diffusion problems. In R. Eymard and J.-M. Hérard, editors, *Finite Volumes for Complex Applications V*, pages 659–692. Wiley, 2008.
- [26] F. Hermeline. Approximation of diffusion operators with discontinuous tensor coefficients on distorted meshes. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 192(16-18):1939–1959, 2003.
- [27] F. Hermeline. Approximation of 2-D and 3-D diffusion operators with variable full tensor coefficients on arbitrary meshes. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 196, 2007.
- [28] F. Hermeline. A finite volume method for approximating 3D diffusion operators on general meshes. *Journal of Computational Physics*, 228(16):5763–5786, 2009.
- [29] G. Strang. Variational crimes in the finite element method. In *The mathematical foundations of the finite element method with applications to partial differential equations (Proc. Sympos., Univ. Maryland, Baltimore, Md., 1972)*, pages 689–710. Academic Press, New York, 1972.

Chapter 5

Grid Orientation Effect in coupled Finite Volume Schemes

This chapter consists of an article submitted, written with Robert Eymard and Roland Masson.

Sommaire

5.1	Introduction	146
5.2	Mesh, stencils and fluxes	148
5.2.1	Construction of the new fluxes	148
5.2.2	Example: construction of a 9-point stencil scheme	151
5.2.3	Properties of the new fluxes	152
5.3	Convergence analysis in a simplified case	153
5.3.1	Approximation by an upstream weighting scheme	154
5.3.2	Estimates	155
5.3.3	Convergence study	158
5.4	Numerical results	164
5.4.1	A 2D case with radial symmetry	164
5.4.2	A 3D test case with three layers	168
5.5	Conclusion	169
	Bibliography	170

The numerical simulation of two-phase flow in a porous medium may lead, when using structured grids, to the apparition of the so-called Grid Orientation Effect (GOE). We propose in this paper a procedure to eliminate this phenomenon, based on the use of new fluxes with a new stencil in the discrete version of the convection equation, without changing the discrete scheme for computing the pressure field. A mathematical study, based on a weak BV inequality using the new fluxes, shows the convergence of the modified scheme in a particular case. Finally, numerical results show the efficiency and the accuracy of the method.

5.1 Introduction

In the 1980's, numerous papers have been concerned with the so-called grid orientation effect, in the framework of oil reservoir simulation. This effect is due to the anisotropy of the numerical diffusion induced by the upstream weighting scheme, and the computation of a pressure field, solution to an elliptic equation in which the diffusion coefficient depends on the value of the convected unknown. This problem has been partly solved in the framework of industrial codes, in which the meshes are structured and regular (mainly based on squares and cubes). The literature on this problem is huge, and is impossible to exhaustively quote; let us only cite [4, 5, 8, 12, 13] and references therein. In the 2000's, a series of new schemes have been introduced in order to compute these coupled problems on general grids [1, 3, 6, 10]. But, in most of the cases, the non regular meshes conserve structured directions, although the shape of the control volumes is no longer that of a regular cube. This is the case for the Corner Point Geometries [11] widely used in industrial reservoir simulations. The control volumes which are commonly used in 3D reservoir simulations are generalised "hexahedra", in the sense that each of them is neighboured by 6 other control volumes. In this case, the stencil for the pressure resolution may have a 27-point stencil, using for instance a Multi-Point Flux Approximation (MPFA) scheme, see [1]. Nevertheless, selecting a 27-point stencil instead of a 7-point stencil for the pressure resolution has no influence on the Grid Orientation Effect, which results from the stencil used in upstream weighted mass exchanges coupled with the pressure resolution.

In order to overcome this problem, we study here a new method consisting in changing the stencil of the convection equation, without modifying the pressure equation. This method is presented on a simplified problem, modelling immiscible two-phase flow within a porous medium. Let $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ (with $d = 2$ or 3) be the considered bounded open connected space domain, with a regular boundary denoted by $\partial\Omega$. We consider the following two-phase flow problem in Ω ,

$$\begin{cases} u_t - \operatorname{div}(k_1(u)\Lambda\nabla p) & = \max(s, 0)f(c) + \min(s, 0)f(u) \\ (1 - u)_t - \operatorname{div}(k_2(u)\Lambda\nabla p) & = \max(s, 0)(1 - f(c)) + \min(s, 0)(1 - f(u)), \\ f(u) = \frac{k_1(u)}{k_1(u) + k_2(u)}, \end{cases} \quad (5.1)$$

where, for $\mathbf{x} \in \Omega$ and $t \geq 0$, $u(\mathbf{x}, t) \in [0, 1]$ is the saturation of phase 1 (for example water), and therefore $1 - u(\mathbf{x}, t)$ is the saturation of phase 2, k_1 is the mobility of phase 1 (increasing function such that $k_1(0) = 0$), k_2 is the mobility of phase 2 (decreasing function such

that $k_2(1) = 0$), the function s represents a volumic source term, corresponding to injection/pumping fluids into the domain, p is the common pressure of both phases (the capillary pressure is assumed to be negligible in front of the pressure gradients due to injection and production wells) and $\Lambda(\mathbf{x})$ denotes the permeability tensor (that is defined by a symmetric positive definite matrix which may depend on the point $\mathbf{x} \in \Omega$). The volumic composition of the injected fluid is tuned by the function c , assumed to vary between 0 and 1. We assume that there is no flow across the boundary, which corresponds to homogeneous Neumann boundary conditions.

We may see System (5.1) as the coupling of an elliptic problem with unknown p and a nonlinear scalar hyperbolic problem with unknown u ,

$$\begin{cases} \operatorname{div} \mathbf{v} = s & \text{with } \mathbf{v} = -(k_1(u) + k_2(u))\Lambda\nabla p, \\ u_t + \operatorname{div}(f(u)\mathbf{v}) = \max(s, 0)f(c) + \min(s, 0)f(u). \end{cases} \quad (5.2)$$

Let us now consider a coupled finite volume scheme for the approximation of Problem (5.1), written under the form (5.2):

$$\begin{aligned} \sum_{L, (K,L) \in S} F_{K,L}^{n+1} &= s_K^{n+1} \\ F_{K,L}^{n+1} + F_{L,K}^{n+1} &= 0 \\ |K| (u_K^{n+1} - u_K^n) + \tau^n \sum_{L, (K,L) \in S} &\left(f(u_K^m)(F_{K,L}^{n+1})^{(+)} - f(u_L^m)(F_{L,K}^{n+1})^{(+)} \right) = \\ &\tau^n ((s_K^{n+1})^{(+)} f(c_K^{n+1}) - (s_K^{n+1})^{(-)} f(u_K^m)). \end{aligned}$$

In the above system, we denote by K, L the control volumes, by $|K|$ the measure of K (volume in 3D, area in 2D), by S the initial stencil of the scheme, defined as the set of pairs (K, L) having a common interface denoted $K|L$, by n the time index, by τ^n the time step ($\tau^n = t^{n+1} - t^n$), by u_K^n the saturation in control volume K at time t^n , by s_K^{n+1} the quantity $\frac{1}{\tau^n} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_K s(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt$ and by c_K^{n+1} the quantity $\frac{1}{\tau^n |K|} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_K c(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt$. The flux $F_{K,L}^{n+1} = (F_{K,L}^{n+1})^{(+)} - (F_{L,K}^{n+1})^{(+)}$ is a generally implicit approximation of the flux $\int_{K|L} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{K,L} ds$ at the interface $K|L$ at time step n (where $\mathbf{n}_{K,L}$ is the unit normal vector to $K|L$ oriented from K to L), and, for all real a , the values $a^{(+)}$ and $a^{(-)}$ are non-negative and such that $a^{(+)} - a^{(-)} = a$. The value m is set to n in the case of the ‘‘IMPES’’ scheme (IMPlicit in Pressure and EXplicit in Saturation), and to $n + 1$ for the implicit scheme.

We refer to [1, 3, 6, 10] for possible expressions of $F_{K,L}^{n+1}$ allowing for the computation of an approximate pressure field; in this paper, we consider that these expressions are the data used in the definition of new fluxes dedicated to suppress Grid Orientation Effects. Hence Section 5.2 of this paper proposes a general method for defining a new stencil \widehat{S} and new fluxes $\widehat{F}_{K,L}^{n+1}$ verifying at least the two following properties. We require that the flux continuity holds

$$\widehat{F}_{K,L}^{n+1} + \widehat{F}_{L,K}^{n+1} = 0, \quad \forall (K, L) \in \widehat{S},$$

and that the balance in the control volumes is the same as that satisfied by the fluxes $(F_{K,L}^{n+1})_{(K,L) \in S}$:

$$\sum_{L, (K,L) \in \widehat{S}} \widehat{F}_{K,L}^{n+1} = \sum_{L, (K,L) \in S} F_{K,L}^{n+1}, \quad \forall K \in \mathcal{M}.$$

With these new fluxes and stencil, we write the following new scheme:

$$|K| (u_K^{n+1} - u_K^n) + \tau^n \sum_{L, (K,L) \in \widehat{S}} \left(f(u_K^m) (\widehat{F}_{K,L}^{n+1})^{(+)} - f(u_L^m) (\widehat{F}_{L,K}^{n+1})^{(+)} \right) = \tau^n \left((s_K^{n+1})^{(+)} f(c_K^{n+1}) - (s_K^{n+1})^{(-)} f(u_K^m) \right). \quad (5.3)$$

The present method is illustrated by the example of the design of a nine-point scheme, starting from a five-point scheme. This new scheme is mathematically analysed in Section 5.3 in the particular case where $f(u) = u$ and $k_1(u) + k_2(u)$ is constant, allowing for the fluxes to not depend on the time. Then numerical results show in Section 5.4 the efficiency of the method. A first test case, where Problem (5.1) has a radial analytical solution, allows for assessing the accuracy of the method, and a second test case which is a simple 3D case with three 2D layers shows the possibility to implement the scheme in industrial reservoir simulators. A short conclusion is finally proposed.

5.2 Mesh, stencils and fluxes

5.2.1 Construction of the new fluxes

This section is devoted to the method of construction of the new fluxes, using the old ones. Let us first precise the definition for the admissible discretizations which will be considered here.

Definition 5.2.1 *We assume that $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, with $d \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ is a bounded open connected domain. We say that $\mathcal{D} = (\mathcal{M}, \mathcal{F}, S)$ is an admissible discretization of Ω if,*

1. *The set \mathcal{M} of the control volumes is such that all elements of \mathcal{M} are disjoint open connected subsets of Ω with regular boundary, and such that $\overline{\Omega} = \bigcup_{K \in \mathcal{M}} \overline{K}$. The d -dimensional measure of K (resp. Ω) is denoted by $|K|$ (resp. $|\Omega|$) and the diameter of K is denoted h_K . We denote by $h_{\mathcal{D}}$ the maximum value of $(h_K)_{K \in \mathcal{M}}$.*
2. *The interior faces of the mesh $\sigma \in \mathcal{F}_{\text{int}}$ are obtained by $\overline{K} \cap \overline{L} := K|L$, for all pairs of neighbouring control volumes $K \in \mathcal{M}$ and $L \in \mathcal{M}$. They are assumed to be planar, with constant unit normal vector $\mathbf{n}_{K,L}$ oriented from K to L . The exterior faces of the mesh $\sigma \in \mathcal{F}_{\text{ext}}$ are obtained by $\sigma = \overline{K} \cap \partial\overline{\Omega}$, for all control volumes $K \in \mathcal{M}$. The set of all the faces of the mesh \mathcal{F} is defined by $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{\text{int}} \cup \mathcal{F}_{\text{ext}}$. The $d - 1$ -dimensional measure of $\sigma \in \mathcal{F}$ is denoted by $|\sigma|$, assumed to be strictly positive. For all $K \in \mathcal{M}$, it is assumed that there exists a subset of \mathcal{F} , denoted by \mathcal{F}_K , such that $\partial K = \bigcup_{\sigma \in \mathcal{F}_K} \sigma$.*
3. *The stencil S is the set of all pairs (K, L) such that $K \in \mathcal{M}$, $L \in \mathcal{M} \setminus \{K\}$ and $|K|L| > 0$.*

We then define

$$\theta_{\mathcal{D}} = \max_{K \in \mathcal{M}} \frac{h_K \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} |\sigma|}{|K|}. \quad (5.4)$$

For an admissible discretization $\mathcal{D} = (\mathcal{M}, \mathcal{F}, S)$, we consider a real family $(F_{K,L})_{(K,L) \in S}$, which satisfies the following symmetry property:

$$F_{K,L} + F_{L,K} = 0, \quad \forall (K, L) \in S. \quad (5.5)$$

For any $(K, L) \in S$, we assume that is defined a non empty set $\widehat{\mathcal{P}}_{K,L}$ (called the set of the paths from K to L) such that

1. For all $P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}$, there exist $m \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ and a set of m different control volumes $\{K_1, \dots, K_m\} \subset \mathcal{M}$ with $K_1 = K$ and $K_m = L$ such that

$$P = \{(K_i, K_{i+1}), i = 1, \dots, m-1\}.$$

2. For any $P = \{(K_i, K_{i+1}), i = 1, \dots, m-1\} \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}$, we denote by P^\leftarrow the inverse path from L to K , defined by $P^\leftarrow = \{(K_{i+1}, K_i), i = 1, \dots, m-1\}$. We assume that, for all $(K, L) \in S$, $\widehat{\mathcal{P}}_{L,K} = \{P^\leftarrow, P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}\}$.

3. The new stencil $\widehat{S} \subset \mathcal{M}^2$, defined by

$$\widehat{S} = \bigcup_{(K,L) \in S, P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} P \quad (5.6)$$

satisfies therefore that for all $(K, L) \in \widehat{S}$, $(L, K) \in \widehat{S}$.

4. We denote by $\theta_{\widehat{\mathcal{P}}}$ the maximum between:

- the ratio between the diameter of the reunion of all control volumes of a given path and the minimum diameter of the control volumes of the path,
- the number of elements in a path.

This may be written as

$$\theta_{\widehat{\mathcal{P}}} = \max\left\{\max\left(\frac{\text{diam}(\bigcup_{(I,J) \in P} (I \cup J))}{\min_{(I,J) \in P} (\min(h_I, h_J))}, \#P\right), (K, L) \in S, P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}\right\}. \quad (5.7)$$

For all $(K, L) \in S$, let $(F_{K,L}^P)_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}}$ be a family such that

$$\forall (K, L) \in S, \quad \forall P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}, \quad F_{K,L}^P F_{K,L} \geq 0, \quad (5.8)$$

$$\forall (K, L) \in S, \quad \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} F_{K,L}^P = F_{K,L}, \quad (5.9)$$

and

$$\forall (K, L) \in S, \quad \forall P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}, \quad F_{L,K}^{P^\leftarrow} = -F_{K,L}^P. \quad (5.10)$$

We define the families $(\widetilde{F}_{K,L}, \widetilde{F}_{K,L}^{(+)})_{(K,L) \in \widehat{S}}$ by

$$\begin{aligned} \forall (I, J) \in \widehat{S}, \\ \widetilde{F}_{I,J}^{(+)} &= \sum_{(K,L) \in S} \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} \xi_{I,J}^P \max(F_{K,L}^P, 0), \\ \widetilde{F}_{I,J} &= \widetilde{F}_{I,J}^{(+)} + \widetilde{F}_{J,I}^{(+)} = \sum_{(K,L) \in S} \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} \xi_{I,J}^P |F_{K,L}^P|, \end{aligned} \quad (5.11)$$

where $\xi_{I,J}^P$ is such that $\xi_{I,J}^P = 1$ if $(I, J) \in P$ and $\xi_{I,J}^P = 0$ otherwise. We finally define, for a given $\nu \in [0, 1]$, the families $(\widehat{F}_{I,J}, \widehat{F}_{I,J}^{(+)})_{(I,J) \in \widehat{S}}$ used in the new convection scheme (5.3) by

$$\forall (I, J) \in \widehat{S}, \widehat{F}_{I,J}^{(+)} = G_\nu(\widetilde{F}_{I,J}^{(+)}, \widetilde{F}_{J,I}^{(+)}) \quad \text{and} \quad \widehat{F}_{I,J} = \widetilde{F}_{I,J}^{(+)} - \widetilde{F}_{J,I}^{(+)} = \widehat{F}_{I,J}^{(+)} - \widehat{F}_{J,I}^{(+)}, \quad (5.12)$$

where the function G_ν is defined by

$$\forall \nu \in [0, 1], \forall (a, b) \in (\mathbb{R}^+)^2, G_\nu(a, b) = \max(a - b, \frac{1}{2}(a - b + \nu(a + b)), 0). \quad (5.13)$$

The function G_ν is designed in order to minimise $G_\nu(a, b) + G_\nu(b, a)$ (hence introducing the smallest additional numerical diffusion) under the constraints $G_\nu(a, b) \geq 0$ (for monotonicity purposes), $G_\nu(a, b) - G_\nu(b, a) = b - a$ (hence ensuring the conservativity) and $G_\nu(a, b) + G_\nu(b, a) \geq \nu(a + b)$ (this property is using for controlling the fluxes $(\widetilde{F}_{K,L})_{(K,L) \in \widehat{S}}$ from the weak BV inequality). Indeed, it is straightforward to check that the continuous function $G_\nu(a, b)$ ensures the following property: if $|a - b| > \nu(a + b)$, we have $G_\nu(a, b) = \max(a - b, 0)$ and $G_\nu(b, a) = \max(b - a, 0)$. Otherwise, we have $G_\nu(a, b) = \frac{1}{2}(a - b + \nu(a + b))$ and $G_\nu(b, a) = \frac{1}{2}(b - a + \nu(a + b))$. Therefore we get

$$\begin{aligned} (G_\nu(a, b), G_\nu(b, a)) &= \operatorname{argmin}\{c + d, (c, d) \in (\mathbb{R}^+)^2, c - d = a - b, c + d \geq \nu(a + b)\}, \\ \forall (a, b) &\in (\mathbb{R}^+)^2, \forall \nu \in [0, 1]. \end{aligned} \quad (5.14)$$

We can then deduce that

$$\forall (I, J) \in \widehat{S}, \widehat{F}_{I,J} = \widehat{F}_{I,J}^{(+)} - \widehat{F}_{J,I}^{(+)} = \sum_{(K,L) \in S} \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} \xi_{I,J}^P F_{K,L}^P. \quad (5.15)$$

Remark 3 If the fluxes F_{KL} are computed using a MPFA scheme (i.e. there exist coefficients $(a_{K,L}^M)_{M \in \mathcal{M}}$ such that $F_{K,L} = \sum_{M \in \mathcal{M}} a_{K,L}^M p_M$ and $\sum_{M \in \mathcal{M}} a_{K,L}^M = 0$), and if $F_{K,L}^P = \omega_{K,L}^P F_{KL}$ with $\omega_{K,L}^P \geq 0$ and $\sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} \omega_{K,L}^P = 1$, we get, using (5.15), $\widehat{F}_{I,J} = \sum_{M \in \mathcal{M}} \widehat{a}_{I,J}^M p_M$ with

$$\widehat{a}_{I,J}^M = \sum_{(K,L) \in S} \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} \xi_{I,J}^P \omega_{K,L}^P a_{K,L}^M,$$

and

$$\sum_{M \in \mathcal{M}} \widehat{a}_{I,J}^M = \sum_{(K,L) \in S} \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} \xi_{I,J}^P \omega_{K,L}^P \sum_{M \in \mathcal{M}} a_{K,L}^M = 0.$$

Besides, if we let $\nu = 0$, the relation

$$\widehat{F}_{I,J}^{(+)} = \max(\widehat{F}_{I,J}, 0)$$

holds, which leads to a standard upstream weighting scheme coupled with a MPFA scheme for the pressure, which may be implemented in standard codes with a simple modification of the stencils and transmissivities. Note that the value $\nu = 0$ is excluded in the mathematical analysis provided in Section 5.3, but that the numerical tests given in Section 5.4 show that this value seems to be efficient in practice. On the contrary, for $\nu > 0$, which is assumed in the mathematical analysis, the expression of the new fluxes cannot be obtained from a simple MPFA expression.

Remark 4 If we let $\mathcal{P}_{K,L} = \{P_0\}$ with $P_0 = \{(K,L)\}$ (which leads to $\widehat{S} = S$), the new fluxes are identical to the initial ones, independently of ν chosen in $[0, 1]$.

Let us provide an example of application of this method.

5.2.2 Example: construction of a 9-point stencil scheme

We apply the method described in Section 5.2.1 to 2D structured quadrilateral meshes, which implies that the initial stencil S is the five-point stencil. For a given pair of neighbouring control volumes (K, L) , we define $\widehat{\mathcal{P}}_{K,L}$ by $\widehat{\mathcal{P}}_{K,L} = \{P_i, i = 0, \dots, 4\}$ with $P_0 = \{(K, L)\}$ and $P_i = \{(K, M_i), (M_i, L)\}$ for $i = 1, 2, 3, 4$ (see Figure 5.1). Then we define $(F_{K,L}^P)_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}}$ as follows. For a given $\omega > 0$ (the value for ω is chosen at 0.1 in the numerical examples), we take

$$\begin{cases} F_{K,L}^{P_0} = (1 - 4\omega)F_{K,L} \text{ for } P_0 = \{(K, L)\}, \\ F_{K,L}^{P_i} = \omega F_{K,L} \text{ for } P_i = \{(K, M_i), (M_i, L)\}, \forall i = 1, 2, 3, 4. \end{cases}$$

Then the new stencil \widehat{S} is the classical nine-point stencil (see Figure 5.1), defined by

$$\widehat{S} = S \cup \{(K, L) \in \mathcal{M}^2, \overline{K} \text{ and } \overline{L} \text{ have a common point}\}.$$

This method is illustrated by Figure 5.1, in which the double solid arrows represent the initial connectivity of the five-point stencil S and the double dashed arrows represent the new connectivity of the nine-point stencil \widehat{S} .

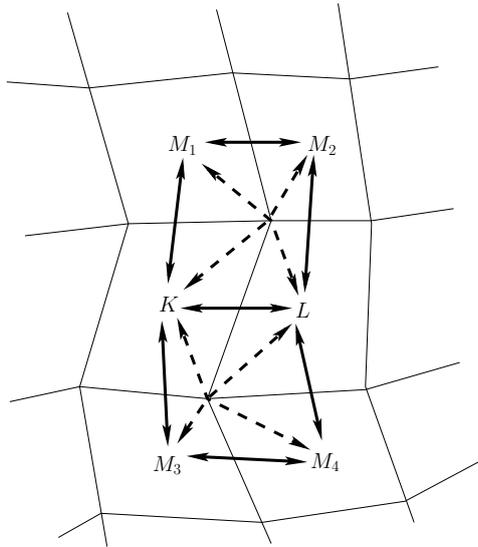


Figure 5.1: Five and nine point stencils on a structured quadrilateral mesh.

Assuming that this procedure has been applied to the whole mesh, let us give two examples of computation of $\tilde{F}_{K,L}^{(+)}$ resulting from (5.11):

$$\begin{cases} \tilde{F}_{K,L}^{(+)} = & (1 - 4\omega) \max(F_{K,L}, 0) \\ & + \omega (\max(F_{K,M_1}, 0) + \max(F_{M_2,L}, 0) + \max(F_{K,M_3}, 0) + \max(F_{M_4,L}, 0)) \\ \tilde{F}_{K,M_2}^{(+)} = & \omega (\max(F_{K,L}, 0) + \max(F_{L,M_2}, 0) + \max(F_{K,M_1}, 0) + \max(F_{M_1,M_2}, 0)). \end{cases}$$

The values $\hat{F}_{K,L}^{(+)}$ are then obtained using (5.12).

5.2.3 Properties of the new fluxes

We may now state the following result.

Lemma 5.2.2 (New stencil and fluxes) *Let $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, with $d \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ be a bounded open connected domain. Let $\mathcal{D} = (\mathcal{M}, \mathcal{F}, \mathcal{S})$ be an admissible discretization of Ω in the sense of Definition 5.2.1. Let $(F_{K,L})_{(K,L) \in \mathcal{S}}$ be such that (5.5) holds. Let $(\hat{\mathcal{P}}_{K,L})_{(K,L) \in \mathcal{S}}$, $\hat{\mathcal{S}}$ and $(F_{K,L}^P)_{(K,L) \in \mathcal{S}, P \in \hat{\mathcal{P}}_{K,L}}$ such that (5.6)-(5.10) hold. Let $(\tilde{F}_{K,L}, \tilde{F}_{K,L}^{(+)})_{(K,L) \in \hat{\mathcal{S}}}$ be defined by (5.11), let $\nu \in [0, 1]$ be given and let $(\hat{F}_{I,J}, \hat{F}_{I,J}^{(+)})_{(I,J) \in \hat{\mathcal{S}}}$ be defined by (5.12). Then the following properties hold:*

$$\forall (I, J) \in \hat{\mathcal{S}}, \nu \tilde{F}_{I,J} \leq \hat{F}_{I,J}^{(+)} + \hat{F}_{J,I}^{(+)}, \quad (5.16)$$

$$\sum_{L, (K,L) \in \hat{\mathcal{S}}} \hat{F}_{K,L} = \sum_{L, (K,L) \in \mathcal{S}} F_{K,L}, \quad \forall K \in \mathcal{M}, \quad (5.17)$$

and

$$\sum_{(K,L) \in \hat{\mathcal{S}}} \max(h_K, h_L) |\tilde{F}_{K,L}| \leq \theta_{\hat{\mathcal{P}}}^2 \sum_{(K,L) \in \mathcal{S}} \max(h_K, h_L) |F_{K,L}|. \quad (5.18)$$

PROOF. We get (5.16), using the properties (5.14) of the function G_ν defined by (5.13).

Let us turn to (5.17). For a given $I \in \mathcal{M}$, by reordering the sums, we can write that

$$\sum_{J, (I,J) \in \hat{\mathcal{S}}} \hat{F}_{I,J} = \sum_{J, (I,J) \in \hat{\mathcal{S}}} \sum_{(K,L) \in \mathcal{S}} \sum_{P \in \hat{\mathcal{P}}_{K,L}} \xi_{I,J}^P F_{K,L}^P = \sum_{(K,L) \in \mathcal{S}} \sum_{P \in \hat{\mathcal{P}}_{K,L}} \chi_{I,P} F_{K,L}^P$$

where $\chi_{I,P} = \sum_{J, (I,J) \in \hat{\mathcal{S}}} \xi_{I,J}^P$ is equal to 1 if there exists $J \in \mathcal{M}$ such that $(I, J) \in P$ (therefore

$I \neq L$), and to 0 otherwise. Note that, for $(K, L) \in \mathcal{S}$ with $K \neq I$ and for $P \in \hat{\mathcal{P}}_{K,L}$ with $\chi_{I,P} = 1$, we have $I \neq L$, $(L, K) \in \mathcal{S}$, $P^{\leftarrow} \in \hat{\mathcal{P}}_{L,K}$ and $\chi_{I,P^{\leftarrow}} = 1$. So, using (5.10), we obtain

$$\sum_{(K,L) \in \mathcal{S} \text{ s.t. } K \neq I} \sum_{P \in \hat{\mathcal{P}}_{K,L}} \chi_{I,P} F_{K,L}^P = 0.$$

Therefore we can write, using (5.9),

$$\sum_{J,(I,J) \in \widehat{S}} \widehat{F}_{I,J} = \sum_{L,(I,L) \in S} \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{I,L}} \chi_{I,P} F_{I,L}^P = \sum_{L,(I,L) \in S} \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{I,L}} F_{I,L}^P = \sum_{L,(I,L) \in S} F_{I,L},$$

which proves (5.17). Finally, let us prove (5.18). Thanks to (5.11), reordering the sums and using (5.7) and (5.8), we obtain

$$\begin{aligned} \sum_{(I,J) \in \widehat{S}} \max(h_I, h_J) \widetilde{F}_{I,J} &= \sum_{(I,J) \in \widehat{S}} \max(h_I, h_J) \sum_{(K,L) \in S} \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} \xi_{I,J}^P |F_{K,L}^P| \\ &\leq \theta_{\widehat{\mathcal{P}}} \sum_{(I,J) \in \widehat{S}} \sum_{(K,L) \in S} \max(h_K, h_L) \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} \xi_{I,J}^P |F_{K,L}^P| \\ &= \theta_{\widehat{\mathcal{P}}} \sum_{(K,L) \in S} \max(h_K, h_L) \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} \#P |F_{K,L}^P| \\ &\leq \theta_{\widehat{\mathcal{P}}}^2 \sum_{(K,L) \in S} \max(h_K, h_L) \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} |F_{K,L}^P| \\ &= \theta_{\widehat{\mathcal{P}}}^2 \sum_{(K,L) \in S} \max(h_K, h_L) |F_{K,L}|. \end{aligned}$$

□

5.3 Convergence analysis in a simplified case

For the sake of the mathematical analysis, we only consider Problem (5.1) in the case where $f(u) = u$ and where the function $k_1(u) + k_2(u)$ is constant. Indeed, the analysis of Problem (5.1) in the case $k_1(u) + k_2(u)$ not constant is an open problem, and the case of a general function f may be studied using the methods of [7]. Hence the mathematical study is focused on the convergence of the new approximate scheme for the following problem on $\Omega \times (0, T)$:

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = s, \quad (5.19)$$

$$u_t + \operatorname{div}(u\mathbf{v}) = \max(s, 0)c + \min(s, 0)u \text{ in } \Omega \times (0, T), \quad (5.20)$$

together with the initial condition

$$u = u_{\text{ini}} \text{ in } \Omega, \quad (5.21)$$

under the following hypotheses, denoted (H) in this section:

Definition 5.3.1 (Hypotheses (H))

1. Ω is a bounded open connected subset of \mathbb{R}^d , $T > 0$ is the period of observation.
2. We assume that $\mathbf{v} \in C^1(\overline{\Omega})$ is such that $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} = 0$ on $\partial\Omega$. We denote by $s = \operatorname{div} \mathbf{v}$.
3. We assume that $c \in L^\infty(\Omega \times (0, +\infty))$ and $u_{\text{ini}} \in L^\infty(\Omega)$, where the functions c and u_{ini} are essentially bounded by 0 and 1.

Then Problem (5.20)-(5.21) is considered in the following weak sense:

$$\int_0^{+\infty} \int_{\Omega} (u\varphi_t + u\mathbf{v} \cdot \nabla\varphi + (\max(s, 0)c + \min(s, 0)u)\varphi) d\mathbf{x}dt + \int_{\Omega} u_{\text{ini}}(\mathbf{x})\varphi(\mathbf{x}, 0) d\mathbf{x} = 0, \\ \forall \varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}), \varphi = 0 \text{ in } \mathbb{R}^d \times [T, +\infty). \quad (5.22)$$

5.3.1 Approximation by an upstream weighting scheme

We first extend the definition 5.2.1 to space-time discretizations.

Definition 5.3.2 Let $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, with $d \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ be a bounded open connected domain and let $T > 0$ be given. We say that $\mathcal{D} = (\mathcal{M}, \mathcal{F}, S, N, (t^n)_{n=0, \dots, N})$ is an admissible time-space discretization of $\Omega \times (0, T)$ if

1. $(\mathcal{M}, \mathcal{F}, S)$ is an admissible discretization of Ω in the sense of Definition 5.2.1,
2. $N \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ and $(t^n)_{n=0, \dots, N}$ is a real family such that $t_0 = 0 < t^1 \dots < t^N = T$.

We then denote $\tau^n = t^{n+1} - t^n$ for $n = 0, \dots, N - 1$. We continue to use \mathcal{D} as index for all quantities depending only on the space discretization.

Assuming Hypotheses (H), let $\mathcal{D} = (\mathcal{M}, \mathcal{F}, S, N, (t^n)_{n=0, \dots, N})$ be an admissible time-space discretization of $\Omega \times (0, T)$ in the sense of Definition 5.3.2. Let $(F_{K,L})_{(K,L) \in S}$ be such that (5.5) hold. We then denote, for $\sigma \in \mathcal{F}_K$ such that $\sigma = K|L$, $F_{K,\sigma} = F_{K,L}$, and for $\sigma \in \mathcal{F}_K \cap \mathcal{F}_{\text{ext}}$, $F_{K,\sigma} = 0$. We assume that $(F_{K,L})_{(K,L) \in S}$ satisfies the following discrete conservation property

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} F_{K,\sigma} = \sum_{L, (K,L) \in S} F_{K,L} = s_K, \quad \forall K \in \mathcal{M}, \quad (5.23)$$

where we denote

$$s_K = \int_K s(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad \forall K \in \mathcal{M}, \quad (5.24)$$

Let \widehat{S} , $(\widehat{\mathcal{P}}_{K,L})_{(K,L) \in S}$ and $(F_{K,L}^P)_{(K,L) \in S, P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}}$ such that (5.6)-(5.10) hold. Let $(\widetilde{F}_{K,L}, \widetilde{F}_{K,L}^{(+)})_{(K,L) \in \widehat{S}}$ be defined by (5.11), let $\nu \in (0, 1]$ be given (the value $\nu = 0$ is excluded, since some bounds in Lemma 5.3.4 and Theorem 5.3.5 are obtained with respect to $1/\nu$, see also Remark 3) and let $(\widehat{F}_{I,J}, \widehat{F}_{I,J}^{(+)})_{(I,J) \in \widehat{S}}$ be defined by (5.12).

The implicit version of the upstream weighting scheme devoted for approximating (5.22) on $[0, T]$ writes

$$|K| \frac{u_K^{n+1} - u_K^n}{\tau^n} + \sum_{L \in \mathcal{M}} \left(\widehat{F}_{K,L}^{(+)} u_K^{n+1} - \widehat{F}_{L,K}^{(+)} u_L^{n+1} \right) + s_K^{(-)} u_K^{n+1} - s_K^{(+)} c_K^{n+1} = 0, \quad (5.25) \\ \forall n = 0, \dots, N - 1, \quad \forall K \in \mathcal{M},$$

letting $\widehat{F}_{I,J}^{(+)} = 0$ for pairs of control volumes $(I, J) \notin \widehat{S}$, and where

$$c_K^{n+1} = \frac{1}{|K| \tau^n} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_K c(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt, \quad \forall n = 0, \dots, N-1, \quad \forall K \in \mathcal{M}, \quad (5.26)$$

$$s_K^{(+)} = \int_K \max(s(\mathbf{x}), 0) d\mathbf{x}, \quad s_K^{(-)} = \int_K \max(-s(\mathbf{x}), 0) d\mathbf{x}, \quad \forall K \in \mathcal{M}, \quad (5.27)$$

and

$$u_K^0 = \frac{1}{|K|} \int_K u_{\text{ini}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad \forall K \in \mathcal{M}. \quad (5.28)$$

5.3.2 Estimates

In this section, one proves the existence and uniqueness of the discrete solution, as well as an L^∞ estimate and a weak-BV inequality.

Lemma 5.3.3 (L^∞ estimate and existence, uniqueness of the discrete solution)

Under Hypotheses (H), let $\mathcal{D} = (\mathcal{M}, \mathcal{F}, S, N, (t^n)_{n=0, \dots, N})$ be an admissible time-space discretization of $\Omega \times (0, T)$ in the sense of Definition 5.3.2. Let $(F_{K,L})_{(K,L) \in S}$ be such that (5.5), (5.23) and (5.24) hold. Let $(\widehat{P}_{K,L})_{(K,L) \in S}$, \widehat{S} and $(F_{K,L}^P)_{(K,L) \in S, P \in \widehat{P}_{K,L}}$ such that (5.6)-(5.10) hold. Let $(\widetilde{F}_{K,L}, \widetilde{F}_{K,L}^{(+)})_{(K,L) \in \widehat{S}}$ be defined by (5.11), let $\nu \in (0, 1]$ be given and let $(\widehat{F}_{I,J}, \widehat{F}_{I,J}^{(+)})_{(I,J) \in \widehat{S}}$ be defined by (5.12). Let $(u_K^n)_{K \in \mathcal{M}, n=0, \dots, N}$ be such that (5.25)-(5.28) hold. Then

$$0 \leq u_K^n \leq 1, \quad \forall n = 0, \dots, N, \quad \forall K \in \mathcal{M}. \quad (5.29)$$

Moreover, there exists one and only one $(u_K^n)_{K \in \mathcal{M}, n=0, \dots, N}$ such that (5.25)-(5.28) hold.

PROOF. We prove the lemma by induction. Using Definition (5.28) for u_K^0 , we have $0 \leq u_K^0 \leq 1$, for all $K \in \mathcal{M}$. Let us assume that, for a given $n = 0, \dots, N-1$, $(u_K^n)_{K \in \mathcal{M}}$ is given with $0 \leq u_K^n \leq 1$, for all $K \in \mathcal{M}$. Let us prove that, for a given $(u_K^{n+1})_{K \in \mathcal{M}}$ such that (5.25) holds, then $0 \leq u_K^{n+1} \leq 1$, for all $K \in \mathcal{M}$.

Let us multiply (5.25) by τ^n . We get,

$$|K| (u_K^{n+1} - u_K^n) + \tau^n \sum_{L \in \mathcal{M}} \widehat{F}_{K,L}^{(+)} u_K^{n+1} - \tau^n \sum_{L \in \mathcal{M}} \widehat{F}_{L,K}^{(+)} u_L^{n+1} + \tau^n s_K^{(-)} u_K^{n+1} - \tau^n s_K^{(+)} c_K^{n+1} = 0, \quad \forall K \in \mathcal{M}, \quad (5.30)$$

Using (5.17) and (5.23), we have,

$$\sum_{L \in \mathcal{M}} (\widehat{F}_{K,L}^{(+)} - \widehat{F}_{L,K}^{(+)}) + s_K^{(-)} - s_K^{(+)} = 0, \quad \forall K \in \mathcal{M} \quad (5.31)$$

Multiplying (5.31) by $\tau^n u_K^{n+1}$ and subtracting from (5.30), we obtain

$$|K| (u_K^{n+1} - u_K^n) + \tau^n \sum_{L \in \mathcal{M}} \widehat{F}_{L,K}^{(+)} (u_K^{n+1} - u_L^{n+1}) + \tau^n s_K^{(+)} (u_K^{n+1} - c_K^{n+1}) = 0, \quad \forall K \in \mathcal{M}. \quad (5.32)$$

Let K_1 denote some cell where the maximum of $(u_K^{n+1})_{K \in \mathcal{M}}$ is reached (K_1 is not necessarily unique). We suppose that $u_{K_1}^{n+1} > 1$, thus,

- $|K_1|(u_{K_1}^{n+1} - u_{K_1}^n) > 0$,
- $\widehat{F}_{L,K_1}^{(+)}(u_{K_1}^{n+1} - u_L^{n+1}) \geq 0$ by using (H),
- $s_{K_1}^{(+)}(u_{K_1}^{n+1} - c_{K_1}^{n+1}) \geq 0$ by using (5.26) and (H),

This is in contradiction with (5.32) for $K = K_1$, which proves that, for all $K \in \mathcal{M}$, $u_K^{n+1} \leq 1$. By using a similar argument on the minimum of u_K^{n+1} , we prove that $u_K^{n+1} \geq 0$, for all $K \in \mathcal{M}$, hence concluding that $0 \leq u_K^{n+1} \leq 1$, for all $K \in \mathcal{M}$.

We now remark that, for $U = (u_K^{n+1})_{K \in \mathcal{M}}$ satisfying (5.25), then U is solution to a linear system under the form $AU = B$, where A is a square matrix. Let U be such that $AU = 0$. Since the arguments used above remain true if $u_K^n = 0$ and $c_K^{n+1} = 0$, for all $K \in \mathcal{M}$, we conclude that all components of U are bounded which implies $U = 0$. Hence the matrix A is invertible, which proves that there exists one and only one $(u_K^{n+1})_{K \in \mathcal{M}}$ satisfying (5.25). This concludes the proof. \square

Lemma 5.3.4 (Weak BV-inequality)

Under Hypotheses (H), let $\mathcal{D} = (\mathcal{M}, \mathcal{F}, S, N, (t^n)_{n=0, \dots, N})$ be an admissible time-space discretization of $\Omega \times (0, T)$ in the sense of Definition 5.3.2. Let $(F_{K,L})_{(K,L) \in \mathcal{S}}$ be such that (5.5), (5.23) and (5.24) hold. Let $(\widehat{\mathcal{P}}_{K,L})_{(K,L) \in \mathcal{S}}$, \widehat{S} and $(F_{K,L}^P)_{(K,L) \in \mathcal{S}, P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}}$ such that (5.6)-(5.10) hold. Let $(\widetilde{F}_{K,L}, \widetilde{F}_{K,L}^{(+)})_{(K,L) \in \widehat{\mathcal{S}}}$ be defined by (5.11), let $\nu \in (0, 1]$ be given and let $(\widehat{F}_{I,J}, \widehat{F}_{I,J}^{(+)})_{(I,J) \in \widehat{\mathcal{S}}}$ be defined by (5.12). Let $(u_K^n)_{K \in \mathcal{M}, n=0, \dots, N}$ be such that (5.25)-(5.28) hold.

Then there exists $C_{\text{BV}} > 0$, only depending on Ω , s and T such that :

$$\sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{(K,L) \in \widehat{\mathcal{S}}} \widetilde{F}_{K,L} (u_K^{n+1} - u_L^{n+1})^2 \leq \frac{C_{\text{BV}}}{\nu}. \quad (5.33)$$

PROOF.

Let us multiply (5.32) by u_K^{n+1} , sum on $n = 0, \dots, N-1$ and $K \in \mathcal{M}$. We get $T_1 + T_2 = 0$ with

$$T_1 = \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{K \in \mathcal{M}} |K| (u_K^{n+1} - u_K^n) u_K^{n+1}$$

and

$$T_2 = \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{K \in \mathcal{M}} \left(\sum_{L \in \mathcal{M}} \widehat{F}_{L,K}^{(+)} (u_K^{n+1} - u_L^{n+1}) u_K^{n+1} + s_K^{(+)} (u_K^{n+1} - c_K^{n+1}) u_K^{n+1} \right).$$

Using the relation

$$(u_K^{n+1} - u_K^n)u_K^{n+1} = \frac{1}{2}(u_K^{n+1})^2 + \frac{1}{2}(u_K^{n+1} - u_K^n)^2 - \frac{1}{2}(u_K^n)^2, \quad (5.34)$$

we can rewrite T_1 as $T_1 = T_3 + T_4$ with

$$T_3 = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{K \in \mathcal{M}} |K| (u_K^{n+1} - u_K^n)^2$$

and

$$T_4 = \frac{1}{2} \sum_{K \in \mathcal{M}} |K| ((u_K^N)^2 - (u_K^0)^2)$$

Similarly, we can rewrite T_2 as $T_2 = T_5 + T_6$ with

$$T_5 = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{K \in \mathcal{M}} \left(\sum_{L \in \mathcal{M}} \widehat{F}_{L,K}^{(+)} (u_K^{n+1} - u_L^{n+1})^2 + s_K^{(+)} (u_K^{n+1} - c_K^{n+1})^2 \right)$$

and

$$T_6 = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{K \in \mathcal{M}} \left(\sum_{L \in \mathcal{M}} \widehat{F}_{L,K}^{(+)} ((u_K^{n+1})^2 - (u_L^{n+1})^2) + s_K^{(+)} ((u_K^{n+1})^2 - (c_K^{n+1})^2) \right).$$

Gathering by faces and using (5.16), we get

$$\begin{aligned} \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{L \in \mathcal{M}} \widehat{F}_{L,K}^{(+)} (u_K^{n+1} - u_L^{n+1})^2 &= \frac{1}{2} \sum_{(K,L) \in \widehat{\mathcal{S}}} (\widehat{F}_{K,L}^{(+)} + \widehat{F}_{L,K}^{(+)})(u_K^{n+1} - u_L^{n+1})^2 \\ &\geq \frac{\nu}{2} \sum_{(K,L) \in \widehat{\mathcal{S}}} \widetilde{F}_{K,L} (u_K^{n+1} - u_L^{n+1})^2. \end{aligned}$$

Taking this relation into account in the expression of T_5 , we obtain

$$T_5 \geq \frac{\nu}{4} \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \left(\sum_{\{K,L\} \subset \mathcal{M}} \widetilde{F}_{K,L} (u_K^{n+1} - u_L^{n+1})^2 + \sum_{K \in \mathcal{M}} s_K^{(+)} (u_K^{n+1} - c_K^{n+1})^2 \right).$$

Again gathering by faces, we now write

$$\begin{aligned} &\sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{L \in \mathcal{M}} \widehat{F}_{L,K}^{(+)} ((u_K^{n+1})^2 - (u_L^{n+1})^2) \\ &= \sum_{\{K,L\} \subset \mathcal{M}} (\widehat{F}_{L,K}^{(+)} ((u_K^{n+1})^2 - (u_L^{n+1})^2) + \widehat{F}_{K,L}^{(+)} ((u_L^{n+1})^2 - (u_K^{n+1})^2)) \\ &= - \sum_{\{K,L\} \subset \mathcal{M}} \widehat{F}_{K,L} ((u_K^{n+1})^2 - (u_L^{n+1})^2) \\ &= - \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{L \in \mathcal{M}} \widehat{F}_{K,L} (u_K^{n+1})^2 = - \sum_{K \in \mathcal{M}} s_K (u_K^{n+1})^2, \end{aligned}$$

which leads to

$$T_6 = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{K \in \mathcal{M}} \left(s_K^{(-)} (u_K^{n+1})^2 - s_K^{(+)} (c_K^{n+1})^2 \right).$$

Gathering the above relations, we get $T_3 + T_4 + T_5 + T_6 = 0$ with

$$T_3 \geq 0,$$

$$T_4 \geq -\frac{1}{2} \sum_{K \in \mathcal{M}} |K| (u_K^0)^2 \geq -\frac{1}{2} |\Omega|,$$

$$T_5 \geq \frac{\nu}{4} \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{\{K,L\} \subset \mathcal{M}} \tilde{F}_{K,L} (u_K^{n+1} - u_L^{n+1})^2,$$

and

$$T_6 \geq -\frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{K \in \mathcal{M}} s_K^{(+)} (c_K^{n+1})^2 \geq -\frac{1}{2} T \sum_{K \in \mathcal{M}} s_K^{(+)}.$$

We then obtain

$$\sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{\{K,L\} \subset \mathcal{M}} \tilde{F}_{K,L} (u_K^{n+1} - u_L^{n+1})^2 \leq \frac{2}{\nu} \left(|\Omega| + T \int_{\Omega} \max(s(\mathbf{x}), 0) d\mathbf{x} \right),$$

which concludes the proof. \square

5.3.3 Convergence study

It is now possible to give a convergence proof for the scheme in the linear case. This proof could be extended to the nonlinear scalar hyperbolic case by following the methods proposed in [7], based on the convergence to the unique entropy process solution. Let us also note that, referring to Remark 4, the present mathematical analysis applies (with $\nu > 0$) to an upstream weighting scheme written with the initial fluxes.

Theorem 5.3.5 *Under Hypotheses (H), let $\mathcal{D} = (\mathcal{M}, \mathcal{F}, S, N, (t^n)_{n=0, \dots, N})$ be an admissible time-space discretization of $\Omega \times (0, T)$ in the sense of Definition 5.3.2. Let $(F_{K,L})_{(K,L) \in S}$ be such that (5.5), (5.23) and (5.24) hold. Let $(\hat{\mathcal{P}}_{K,L})_{(K,L) \in S}$, \hat{S} and $(F_{K,L}^P)_{(K,L) \in S, P \in \hat{\mathcal{P}}_{K,L}}$ such that (5.6)-(5.10) hold. Let $(\tilde{F}_{K,L}, \tilde{F}_{K,L}^{(+)})_{(K,L) \in \hat{S}}$ be defined by (5.11), let $\nu \in (0, 1]$ be given and let $(\hat{F}_{I,J}, \hat{F}_{I,J}^{(+)})_{(I,J) \in \hat{S}}$ be defined by (5.12). Let $(u_K^n)_{K \in \mathcal{M}, n=0, \dots, N}$ be such that (5.25)-(5.28) hold and let $u_{\mathcal{D}}$ be the function defined by*

$$u_{\mathcal{D}}(x, t) = u_K^{n+1}, \text{ for a.e. } (x, t) \in K \times (t^n, t^{n+1}), \forall n = 0, \dots, N-1, \forall K \in \mathcal{M}. \quad (5.35)$$

We assume that

$$\lim_{h_{\mathcal{D}} \rightarrow 0} \sum_{(K,L) \in S} \frac{\max(h_K, h_L)}{m(K|L)} \left(F_{K,L} - \int_{\sigma_{K,L}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{K,L} ds \right)^2 = 0. \quad (5.36)$$

Then, as $h_{\mathcal{D}} \rightarrow 0$ and $\max \tau^n \rightarrow 0$ while ν remains fixed, $\theta_{\mathcal{D}}$ and $\theta_{\widehat{\mathcal{P}}}$ remain bounded, $u_{\mathcal{D}}$ converges for the weak- \star topology of $L^\infty(\Omega \times (0, T))$ to the unique function $u \in L^\infty(\Omega \times (0, T))$ satisfying (5.22).

Remark 5 Condition (5.36) is naturally satisfied if $F_{K,L} = \int_{\sigma_{K,L}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{K,L}$ ds. More interestingly, it also holds if $F_{K,L}$ is obtained using a finite volume scheme for the approximation of Problem $\operatorname{div} \mathbf{v} = s$ with $\mathbf{v} = -\Lambda \nabla p$ and Neumann boundary conditions (see [7], pp. 996–1012).

PROOF. In order to prove Theorem 5.3.5, we consider a sequence $(\mathcal{D}_m)_{m \in \mathbb{N}}$ of admissible time-space discretizations, such that $h_{\mathcal{D}_m}$ (denoted by h_m in the following) and $\max_n(\tau_m^n)$ tend to zero as $m \rightarrow \infty$. We assume that, for each m , the families implicitly indexed by m : $(F_{K,L})_{(K,L) \in \mathcal{S}}$, $\widehat{\mathcal{S}}$, $(\widehat{\mathcal{P}}_{K,L})_{(K,L) \in \mathcal{S}}$ and $(F_{K,L}^P)_{(K,L) \in \mathcal{S}, P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}}$ satisfy the hypotheses of the theorem with the same value $\nu \in (0, 1)$, while $\theta_{\mathcal{D}_m}$ and $\theta_{\widehat{\mathcal{P}}}$ remain bounded as m tends to ∞ . We denote $u_m = u_{\mathcal{D}_m}$ for all $m \in \mathbb{N}$.

Let us prove the convergence of the sequence $(u_m)_{m \in \mathbb{N}}$ to the weak solution u of Problem (5.22) for the weak- \star topology of $L^\infty(\Omega \times (0, T))$, for all $T > 0$. The classical argument of the uniqueness of this limit suffices for concluding the proof of the theorem.

We first notice that, thanks to Lemma 5.3.3, we get the existence of a subsequence, again noted $(u_m)_{m \in \mathbb{N}}$, which converges to some function $u \in L^\infty(\Omega \times (0, T))$ for the weak- \star topology of $L^\infty(\Omega \times (0, T))$ as $m \rightarrow +\infty$. The aim of this proof is to show that u satisfies (5.22).

Let $\varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R})$ be such that $\varphi = 0$ in $\mathbb{R}^d \times [T, +\infty)$. In this proof, we denote by C_φ an L^∞ bound of first and second derivatives of φ . Let $m \in \mathbb{N}$. In the following, we drop some indices m , using the notations $\mathcal{D} = \mathcal{D}_m$. We define φ_K^n by

$$\varphi_K^{n+1} = \frac{1}{|K|} \int_K \varphi(\mathbf{x}, t^n) d\mathbf{x} dt, \quad \forall K \in \mathcal{M}, \quad \forall n = 0, \dots, N.$$

Let us multiply (5.32) by φ_K^{n+1} , sum over $K \in \mathcal{M}$ and $n = 0, \dots, N - 1$. We obtain $T_7^{(m)} + T_8^{(m)} = 0$, with

$$T_7^{(m)} = \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{K \in \mathcal{M}} |K| (u_K^{n+1} - u_K^n) \varphi_K^{n+1}$$

and

$$T_8^{(m)} = \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{K \in \mathcal{M}} \left(\sum_{L \in \mathcal{M}} \widehat{F}_{L,K}^{(+)} (u_K^{n+1} - u_L^{n+1}) \varphi_K^{n+1} + s_K^{(+)} (u_K^{n+1} - c_K^{n+1}) \varphi_K^{n+1} \right).$$

Let us study $T_7^{(m)}$. Thanks to $\varphi(\mathbf{x}, t^N) = \varphi(\mathbf{x}, T) = 0$, we have

$$\begin{aligned} T_7^{(m)} &= - \sum_{n=1}^N \sum_{K \in \mathcal{M}} |K| u_K^n (\varphi_K^{n+1} - \varphi_K^n) - \sum_{K \in \mathcal{M}} |K| u_K^0 \varphi_K^1 \\ &= - \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{K \in \mathcal{M}} u_K^{n+1} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_K \varphi_t(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} dt - \sum_{K \in \mathcal{M}} u_K^0 \int_K \varphi(\mathbf{x}, 0) d\mathbf{x} \\ &= - \int_0^T \int_{\Omega} u_m(x, t) \varphi_t(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} dt - \sum_{K \in \mathcal{M}} u_K^0 \int_K \varphi(\mathbf{x}, 0) d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Using the weak- \star convergence of $(u_m)_{m \in \mathbb{N}}$ to u , we deduce that

$$\lim_{m \rightarrow +\infty} T_7^{(m)} = - \int_0^{+\infty} \int_{\Omega} u(\mathbf{x}, t) \varphi_t(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} dt - \int_{\Omega} u_{\text{ini}}(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}, 0) \, d\mathbf{x} = 0.$$

Let us now prove the convergence of the sequence $(T_8^{(m)})_{m \in \mathbb{N}}$ to T_9 defined by

$$T_9 = - \int_0^{+\infty} \int_{\Omega} (u\mathbf{v} \cdot \nabla \varphi + (\max(s, 0)c + \min(s, 0)u)\varphi) \, d\mathbf{x} dt.$$

To this purpose, let us define $T_{10}^{(m)}$ by

$$T_{10}^{(m)} = - \int_0^{+\infty} \int_{\Omega} (u_m \mathbf{v} \cdot \nabla \varphi + (\max(s, 0)c_m + \min(s, 0)u_m)\varphi) \, d\mathbf{x} dt,$$

with

$$c_m(x, t) = c_K^{n+1} \text{ for a.e. } (x, t) \in K \times (t^n, t^{n+1}), \quad \forall n = 0, \dots, N-1, \quad \forall K \in \mathcal{M},$$

where c_K^{n+1} is defined by (5.26). Using the weak- \star convergence of $(u_m)_{m \in \mathbb{N}}$ to u , we deduce that

$$\lim_{m \rightarrow +\infty} T_{10}^{(m)} = T_9.$$

We then define $T_{11}^{(m)}$ by

$$T_{11}^{(m)} = - \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \int_{\Omega} (u_m^{n+1} \mathbf{v} \cdot \nabla \varphi(\mathbf{x}, t^n) + (\max(s, 0)c_m^{n+1} + \min(s, 0)u_m^{n+1})\varphi(\mathbf{x}, t^n)) \, d\mathbf{x}.$$

Since $|\nabla \varphi(\mathbf{x}, t^n) - \nabla \varphi(\mathbf{x}, t)| \leq C_{\varphi} \max(\tau^n)$ and $|\varphi(\mathbf{x}, t^n) - \varphi(\mathbf{x}, t)| \leq C_{\varphi} \max(\tau^n)$, we get that

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \left| T_{10}^{(m)} - T_{11}^{(m)} \right| = 0. \quad (5.37)$$

Let us prove that $\lim_{m \rightarrow \infty} |T_{11}^{(m)} - T_8^{(m)}| = 0$. Using $\mathbf{v} \cdot \nabla \varphi = \operatorname{div}(\varphi \mathbf{v}) - (\max(s, 0) + \min(s, 0))\varphi$, we may write $T_{11}^{(m)}$ under the form

$$\begin{aligned} T_{11}^{(m)} &= - \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{K \in \mathcal{M}} \left(u_K^{n+1} \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} \int_{\sigma} \varphi(\mathbf{x}, t^n) \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{K, \sigma} ds(\mathbf{x}) \right. \\ &\quad \left. + (c_K^{n+1} - u_K^{n+1}) \int_K \max(s(\mathbf{x}), 0) \varphi(\mathbf{x}, t^n) d\mathbf{x} \right). \end{aligned}$$

Let us now define $T_{12}^{(m)}$ by

$$T_{12}^{(m)} = - \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{K \in \mathcal{M}} \left(u_K^{n+1} \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} \varphi_\sigma^{n+1} \int_\sigma \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} ds(\mathbf{x}) dt + s_K^{(+)} (c_K^{n+1} - u_K^{n+1}) \varphi_K^{n+1} \right),$$

with

$$\varphi_\sigma^{n+1} = \frac{1}{|\sigma|} \int_\sigma \varphi(\mathbf{x}, t^n) ds(\mathbf{x}).$$

We have, for all $n \in [0, N]$ and all $K \in \mathcal{M}$,

$$\begin{aligned} & \int_\sigma \varphi(\mathbf{x}, t^n) \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} ds(\mathbf{x}) - \varphi_\sigma^{n+1} \int_\sigma \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} ds(\mathbf{x}) \\ &= \int_\sigma (\varphi(\mathbf{x}, t^n) - \varphi_\sigma^{n+1}) (\mathbf{v}(\mathbf{x}) - \mathbf{v}_\sigma) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} ds(\mathbf{x}), \end{aligned}$$

where we set

$$\mathbf{v}_\sigma = \frac{1}{|\sigma|} \int_\sigma \mathbf{v}(\mathbf{x}) ds(\mathbf{x}).$$

Using the regularity properties of \mathbf{v} and φ (we denote by C_v a bound for the derivatives of \mathbf{v}), we get that

$$\left| \int_\sigma \varphi(\mathbf{x}, t^n) \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} ds(\mathbf{x}) - \varphi_\sigma^{n+1} \int_\sigma \varphi(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} ds(\mathbf{x}) \right| \leq C_\varphi C_v h_K^2 |\sigma|.$$

Since we may write

$$\left| \int_K \max(s(\mathbf{x}), 0) \varphi(\mathbf{x}, t^n) d\mathbf{x} - s_K^{(+)} \varphi_K^{n+1} \right| \leq C_\varphi h_K s_K^{(+)},$$

we get from (5.4)

$$\left| T_{11}^{(m)} - T_{12}^{(m)} \right| \leq h_m T C_\varphi \left(C_v \theta_{\mathcal{D}} |\Omega| + 2 \int_\Omega \max(s(\mathbf{x}), 0) d\mathbf{x} \right).$$

We then define $T_{13}^{(m)}$ (recalling that $F_{K,\sigma} = F_{K,L}$ for $\sigma = K|L$ else $F_{K,\sigma} = 0$ for $\sigma \in \mathcal{F}_{\text{ext}}$) by

$$T_{13}^{(m)} = - \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{K \in \mathcal{M}} \left(u_K^{n+1} \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} \varphi_\sigma^{n+1} F_{K,\sigma} + s_K^{(+)} (c_K^{n+1} - u_K^{n+1}) \varphi_K^{n+1} \right).$$

We have

$$T_{13}^{(m)} - T_{12}^{(m)} = - \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_K u_K^{n+1} \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} \varphi_\sigma^{n+1} (F_{K,\sigma} - |\sigma| \mathbf{v}_\sigma \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}).$$

Using (5.23) (which implies $\sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} (F_{K,\sigma} - |\sigma| \mathbf{v}_\sigma \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}) = 0$), we get

$$T_{13}^{(m)} - T_{12}^{(m)} = - \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_K u_K^{n+1} \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} (\varphi_\sigma^{n+1} - \varphi_K^{n+1}) (F_{K,\sigma} - |\sigma| \mathbf{v}_\sigma \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}),$$

which leads to

$$(T_{13}^{(m)} - T_{12}^{(m)})^2 \leq C_\varphi^2 \left(\sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_K \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} |\sigma| h_K \right) \left(\sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_K \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} \frac{h_K}{|\sigma|} (F_{K,\sigma} - |\sigma| \mathbf{v}_\sigma \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma})^2 \right),$$

hence providing

$$(T_{13}^{(m)} - T_{12}^{(m)})^2 \leq C_\varphi^2 T^2 \theta_D |\Omega| \sum_K \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} \frac{h_K}{|\sigma|} (F_{K,\sigma} - |\sigma| \mathbf{v}_\sigma \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma})^2,$$

which tends to zero thanks to (5.36). Gathering by pairs of control volumes (each one appears once in the summation), we have

$$T_8^{(m)} - T_{13}^{(m)} = \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{\{K,L\} \subset \mathcal{M}} (u_K^{n+1} - u_L^{n+1}) (\widehat{F}_{L,K}^{(+)} \varphi_K^{n+1} - \widehat{F}_{K,L}^{(+)} \varphi_L^{n+1} + F_{K,L} \varphi_{K,L}^{n+1}),$$

setting $\varphi_{K,L}^{n+1} = \varphi_{\sigma_{K,L}}^{n+1}$ if $(K,L) \in S$ else $\varphi_{K,L}^{n+1} = \frac{1}{2}(\varphi_K^{n+1} + \varphi_L^{n+1})$ (recall that $F_{K,L} = 0$ if $(K,L) \notin S$). Let us prove that $\lim_{m \rightarrow \infty} |T_8^{(m)} - T_{13}^{(m)}| = 0$, result which completes our proof. Since $\widehat{F}_{K,L}^{(+)} - \widehat{F}_{L,K}^{(+)} = \widehat{F}_{K,L}$, we get $T_8^{(m)} - T_{13}^{(m)} = T_{14}^{(m)} + T_{15}^{(m)}$ with

$$T_{14}^{(m)} = \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{\{K,L\} \subset \mathcal{M}} (u_K^{n+1} - u_L^{n+1}) (\widehat{F}_{L,K}^{(+)} (\varphi_K^{n+1} - \varphi_{K,L}^{n+1}) - \widehat{F}_{K,L}^{(+)} (\varphi_L^{n+1} - \varphi_{K,L}^{n+1})),$$

and

$$T_{15}^{(m)} = \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{\{K,L\} \subset \mathcal{M}} (u_K^{n+1} - u_L^{n+1}) (F_{K,L} - \widehat{F}_{K,L}) \varphi_{K,L}^{n+1}.$$

We may write

$$\begin{aligned} |T_{14}^{(m)}| &\leq C_\varphi \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{\{K,L\} \subset \mathcal{M}} |u_K^{n+1} - u_L^{n+1}| \max(h_K, h_L) (\widehat{F}_{K,L}^{(+)} + \widehat{F}_{L,K}^{(+)}) \\ &\leq C_\varphi \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{\{K,L\} \subset \mathcal{M}} |u_K^{n+1} - u_L^{n+1}| \max(h_K, h_L) \widetilde{F}_{K,L}. \end{aligned}$$

Turning to the study of $T_{15}^{(m)}$, we get $T_{15}^{(m)} = T_{16}^{(m)} - T_{17}^{(m)}$ with

$$T_{16}^{(m)} = \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{\{K,L\} \subset \mathcal{M}} (u_K^{n+1} - u_L^{n+1}) F_{K,L} \varphi_{K,L}^{n+1},$$

and

$$T_{17}^{(m)} = \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{\{K,L\} \subset \mathcal{M}} (u_K^{n+1} - u_L^{n+1}) \widehat{F}_{K,L} \varphi_{K,L}^{n+1}.$$

Remarking that, for $P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}$, we have

$$\sum_{(I,J) \in P} (u_I^{n+1} - u_J^{n+1}) = (u_K^{n+1} - u_L^{n+1}),$$

and that

$$\sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} F_{K,L}^P = F_{K,L},$$

we get that

$$T_{16}^{(m)} = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{(K,L) \in S} \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} \sum_{(I,J) \in P} (u_I^{n+1} - u_J^{n+1}) \varphi_{K,L}^{n+1} F_{K,L}^P.$$

Besides, we have

$$\begin{aligned} T_{17}^{(m)} &= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{(I,J) \in \widehat{S}} (u_I^{n+1} - u_J^{n+1}) \widehat{F}_{I,J} \varphi_{I,J}^{n+1} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{(I,J) \in \widehat{S}} (u_I^{n+1} - u_J^{n+1}) \sum_{(K,L) \in S} \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} \xi_{I,J}^P F_{K,L}^P \varphi_{I,J}^{n+1}, \end{aligned}$$

which leads, thanks to $\xi_{I,J}^P = 1$ if $(I,J) \in P$ else $\xi_{I,J}^P = 0$, to

$$T_{17}^{(m)} = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{(K,L) \in S} \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} \sum_{(I,J) \in P} (u_I^{n+1} - u_J^{n+1}) \varphi_{I,J}^{n+1} F_{K,L}^P.$$

Hence

$$T_{15}^{(m)} = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{(K,L) \in S} \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} \sum_{(I,J) \in P} (u_I^{n+1} - u_J^{n+1}) (\varphi_{I,J}^{n+1} - \varphi_{K,L}^{n+1}) F_{K,L}^P.$$

We have $|\varphi_{I,J}^{n+1} - \varphi_{K,L}^{n+1}| \leq C_\varphi \theta_{\widehat{\mathcal{P}}} \max(h_I, h_J)$. Therefore we get

$$|T_{15}^{(m)}| \leq \frac{C_\varphi}{2} \theta_{\widehat{\mathcal{P}}} \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{(K,L) \in S} \sum_{P \in \widehat{\mathcal{P}}_{K,L}} \sum_{(I,J) \in P} |u_I^{n+1} - u_J^{n+1}| \max(h_I, h_J) |F_{K,L}^P|,$$

which may also be rewritten as

$$|T_{15}^{(m)}| \leq \frac{C_\varphi}{2} \theta_{\widehat{\mathcal{P}}} \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{(K,L) \in \widehat{S}} |u_K^{n+1} - u_L^{n+1}| \max(h_K, h_L) \widetilde{F}_{K,L}.$$

Hence we get, setting $C_1 = C_\varphi + C_\varphi \theta_{\widehat{\mathcal{P}}}$

$$|T_8^{(m)} - T_{13}^{(m)}| \leq C_1 \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{\{K,L\} \subset \mathcal{M}} |u_K^{n+1} - u_L^{n+1}| \max(h_K, h_L) \widetilde{F}_{K,L}.$$

Thanks to the Cauchy-Schwarz inequality and defining T_{18} by

$$T_{18}^{(m)} = \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{\{K,L\} \subset \mathcal{M}} \max(h_K, h_L) \tilde{F}_{K,L},$$

we have, thanks to Lemma 5.3.4,

$$(T_8^{(m)} - T_{13}^{(m)})^2 \leq C_1^2 T_{18}^{(m)} \left(h_m \sum_{n=0}^{N-1} \tau^n \sum_{\{K,L\} \subset \mathcal{M}} (u_K^{n+1} - u_L^{n+1})^2 \tilde{F}_{K,L} \right) \leq C_1^2 T_{18}^{(m)} h_m \frac{C_{\text{BV}}}{\nu}.$$

It now suffices to show that $T_{18}^{(m)}$ remains bounded. Using (5.18), we have

$$T_{18}^{(m)} \leq \theta_{\mathcal{P}}^2 \sum_{\{K,L\} \subset \mathcal{M}} \max(h_K, h_L) |F_{K,L}|.$$

We then remark that

$$\left(\sum_{(K,L) \in \mathcal{S}} \max(h_K, h_L) |F_{K,L}| \right)^2 \leq \left(\sum_{(K,L) \in \mathcal{S}} \max(h_K, h_L) |\sigma_{K,L}| \right) \left(\sum_{(K,L) \in \mathcal{S}} \frac{\max(h_K, h_L)}{|\sigma_{K,L}|} (F_{K,L})^2 \right).$$

The term $\sum_{(K,L) \in \mathcal{S}} \max(h_K, h_L) |\sigma_{K,L}|$ is bounded by $2\theta_{\mathcal{D}} |\Omega|$, and the term $\sum_{(K,L) \in \mathcal{S}} \frac{\max(h_K, h_L)}{|\sigma_{K,L}|} (F_{K,L})^2$ remains bounded thanks to (5.36) and to the bound $2\theta_{\mathcal{D}} |\Omega| \|\mathbf{v}\|_{\infty}^2$ on $\sum_{(K,L) \in \mathcal{S}} \max(h_K, h_L) |\sigma_{K,L}| (\mathbf{v}_{\sigma_{K,L}} \cdot \mathbf{n}_{K,L})^2$. This achieves the proof that

$$\lim_{m \rightarrow \infty} (T_8^{(m)} - T_{13}^{(m)}) = 0.$$

Gathering all the above results completes the proof that

$$\lim_{m \rightarrow +\infty} T_8^{(m)} = T_9,$$

and therefore the proof that u satisfies (5.22). \square

5.4 Numerical results

5.4.1 A 2D case with radial symmetry

Let us consider Problem (5.1) on $\Omega = (0, 1)^2$ with the following data:

$$k_1(u) = u^2, \quad k_2(u) = \frac{1}{\mu}(1-u)^2, \quad f(u) = \frac{k_1(u)}{k_1(u) + k_2(u)},$$

A source term is imposed at each linear segment $[A, B]$ of the boundary, equal to $-\widehat{ACB}/(2\pi)$, where \widehat{ACB} is the angle between the segments $[C, A]$ and $[C, B]$ and C has coordinates $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ (see Figure 5.2). A punctual source term, equal to 1, is imposed at the point C . Then there

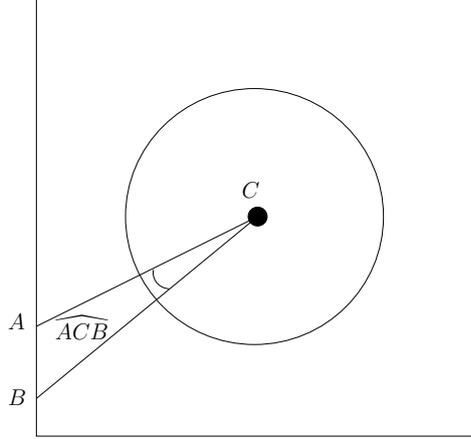


Figure 5.2: Geometry of the radial circular test.

exists a unique entropy weak analytical solution (p, u) only depending at each time on the distance r between \boldsymbol{x} and C , called the Buckley-Leverett solution in the framework of oil engineering (recall that, for a nonlinear problem without an entropy criterion, there exists an infinity of weak solutions in the general 1D case; in this 2D case, there may exist weak solutions without radial symmetry):

$$\begin{aligned} \bar{u} &= 1/\sqrt{\mu+1}, \quad \bar{v} = (1 + \sqrt{\mu+1})/2, \\ u(r, t) &= 0 \text{ for } \pi r^2 > \bar{v}t, \\ u(r, t) &= (f')^{(-1)}(\pi r^2/t) \text{ for } \pi r^2 < \bar{v}t, \\ p(r, t) &= \int_{r_0}^r \frac{1}{2\pi s(k_1(u(s, t)) + k_2(u(s, t)))} ds + p_0, \end{aligned}$$

where the value of the pressure is fixed at p_0 at the distance r_0 to point C .

We first consider the case $\mu = 10$. For the above solution, a circular discontinuity with height \bar{u} is located at the circle with centre C and radius $R(t) = \sqrt{\bar{v}t/\pi}$ (for $t = 0.2$ and $\mu = 10$, we have $R(t) \simeq 0.37$). We use an IMPES scheme in a prototype running under SCILAB environment. At each time step, we use a standard 5-point scheme for solving the pressure equation, providing the values $F_{K,L}^{n+1}$. We then compute the new fluxes $\widehat{F}_{K,L}^{n+1}$, following the method described in Section 5.2.2. The strategy for determining the time step is based on a desired maximum variation of saturation between two time steps. This desired variation has been set to 0.2 for all run, except the modified scheme with $\nu = 1$, where we had to set this variation to 0.1 for stability reasons. The mesh is composed of 41^2 squares with side $h = 1/41$ for all runs. The results are shown in Figures 5.3 to 5.6.

We observe in Figure 5.3 a very small dependence of the pressure isovalue lines on the GOE in this case. The profiles using the initial or the modified scheme show both a high radial symmetry for the approximated pressures (see Figure 5.4). Although the analytical pressure tends to infinity as $r \rightarrow 0$, the approximate pressures are greater, for the distances to C considered here, than the analytical ones, due to the fact that the approximate saturations are lower than the analytical ones in the neighbourhood of the point C . On the contrary, we see in Figure 5.5 a significant dependence of the isovalue lines on the GOE. We first remark

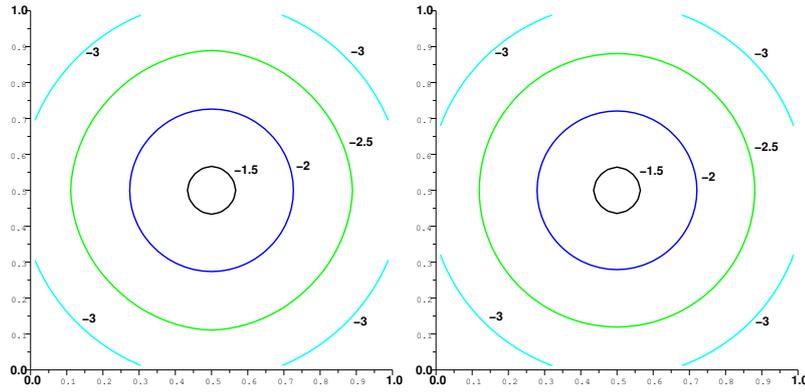


Figure 5.3: Contours of pressures at $t = 0.2$ ($\mu = 10$) with the initial (left) and modified scheme (right) with $\nu = 0.1$, $\omega = 0.1$.

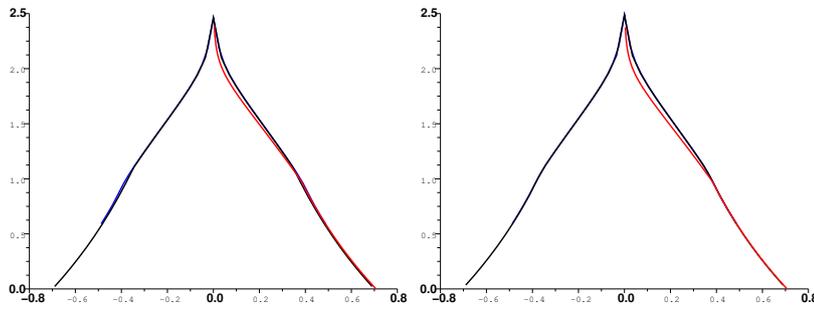


Figure 5.4: Profiles of pressures (p_0 set to 0 at distance $r_0 = \sqrt{2}/2$) at $t = 0.2$ ($\mu = 10$) with the initial scheme (left) and the modified scheme (right) with $\nu = 0.1$, $\omega = 0.1$: analytical solution (red), profile along median axis (blue), diagonal profile (black).

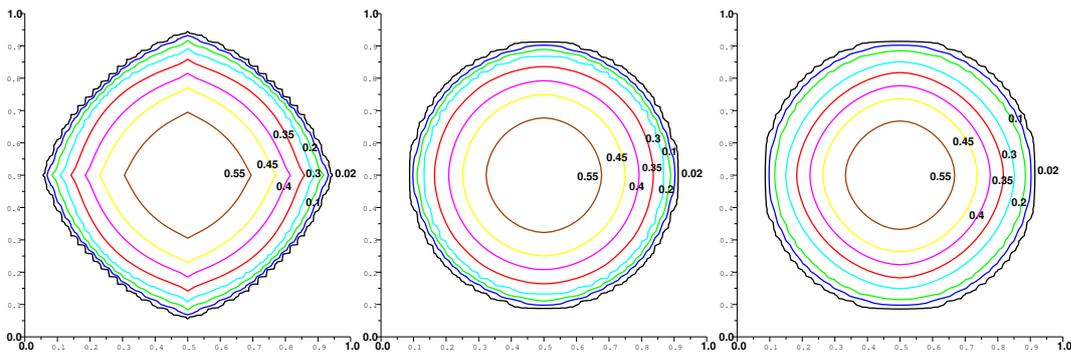


Figure 5.5: Contours of saturations at $t = 0.2$ ($\mu = 10$) with the initial (left), modified scheme (middle) with $\nu = 0.1$, $\omega = 0.1$, modified scheme (right) with $\nu = 1$ $\omega = 0.1$.

that the value $\omega = 0.1$ leads to much better results than $\omega = 0$ (initial scheme). We also remark that the value $\nu = 1$ leads to a solution where the numerical diffusion is slightly more important than with $\nu = 0.1$ or $\nu = 0$ (let us remark that the solutions obtained with $\nu = 0.1$ and $\nu = 0$ cannot be graphically distinguished, which enhances the possibility to use $\nu = 0$ in practical cases).

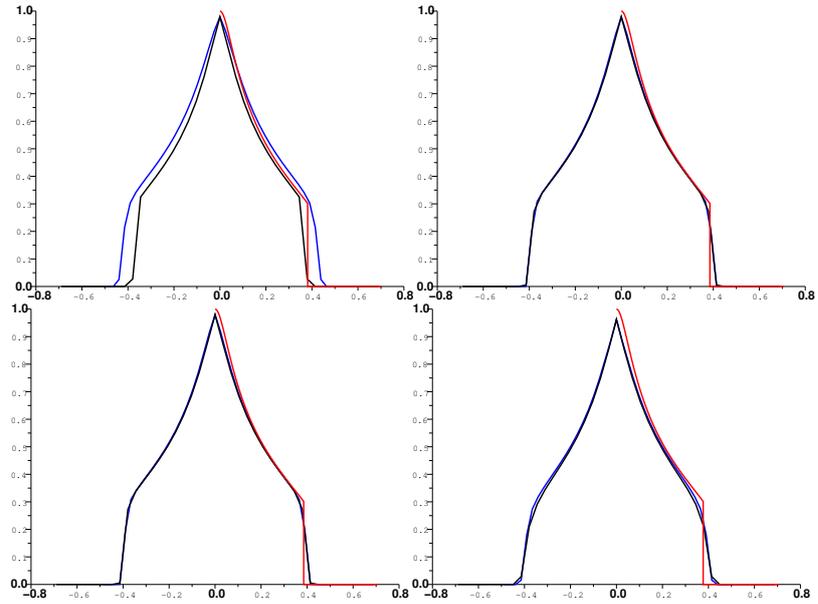


Figure 5.6: Profiles of saturations at $t = 0.2$ ($\mu = 10$) : analytical solution (red), profile along median axis (blue), diagonal profile (black); initial scheme (top left), $\nu = 0$ $\omega = 0.1$ (top right), $\nu = 0.1$ $\omega = 0.1$ (bottom left), $\nu = 1$ $\omega = 0.1$ (bottom right).

We have then considered the case $\mu = 200$. The same observations as above hold, with a higher discrepancy between the initial and the modified scheme (see Figures 5.7 and 5.8). In order to get stable results, we had to set the desired variation of saturation to 0.05.

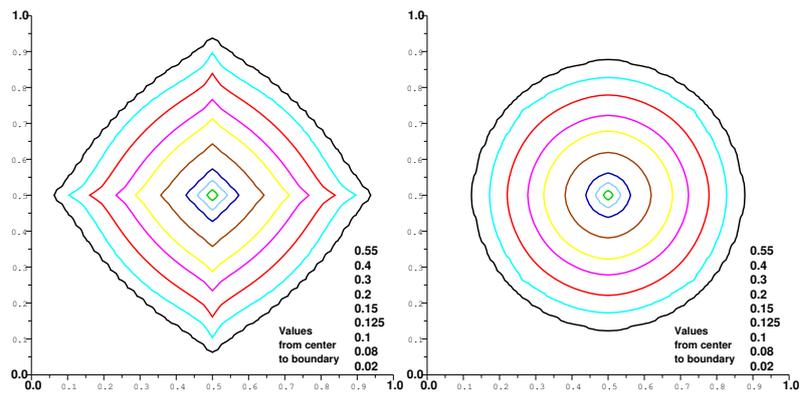


Figure 5.7: Contours of saturations at $t = 0.05$ ($\mu = 200$) with the initial (left) and the modified scheme (right) with $\nu = 0.1$, $\omega = 0.1$.

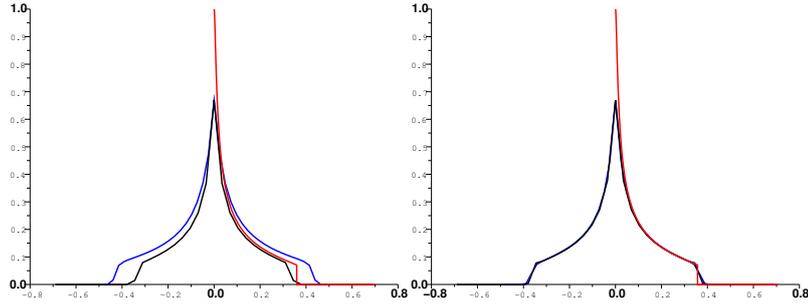


Figure 5.8: Profiles of saturations at $t = 0.05$ ($\mu = 200$) : analytical solution (red), profile along median axis (blue), diagonal profile (black); initial scheme (left), $\nu = 0.1$ $\omega = 0.1$ (right).

5.4.2 A 3D test case with three layers

The numerical tests presented here are inspired by [9]. The domain is defined by

$$\Omega = [-0.5, 0.5] \times [-0.5, 0.5] \times [-0.15, 0.15].$$

The permeability $\Lambda(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \Omega$ is equal to 1 if the distance from \mathbf{x} to the vertical axis Oz is lower than 0.48, and to 10^{-3} otherwise (see Figure 5.9), which ensures the confinement of the flow in the cylinder with axis Oz and radius 0.48. The density ratio is equal to 0.8. We use Corey-type relative permeability, $k_1(u) = u^4$ and $k_2 = (1 - u)^2/100$. At the initial state, the reservoir is assumed to be saturated by the oil phase. Water is injected at the origin by an injection well. Two production wells, denoted by P_1 and P_2 , are respectively located at the points $(-0.3\cos\frac{\pi}{3}, -0.3\sin\frac{\pi}{3}, 0)$ and $(0.3\cos\frac{\pi}{3}, -0.3\sin\frac{\pi}{3}, 0)$

A prototype of an industrial code written in FORTRAN, based on an implicit scheme, is used for obtaining numerical results with two Cartesian grids, the second one deduced from the first one by a rotation of angle $\theta = \frac{\pi}{6}$ with axis Oz . The number of cells in each direction (x, y, z) are $N_x = N_y = 51$ and $N_z = 3$ (which means that the three wells are numerically taken into account as source terms in the middle layer of the mesh).

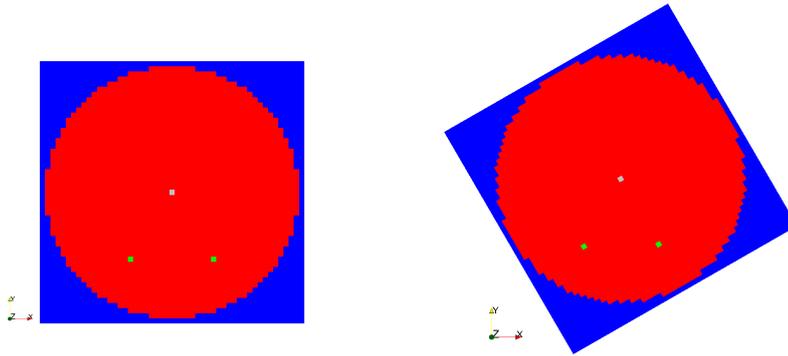


Figure 5.9: The two meshes used. In red, the highest permeability zone, in blue the lower permeability zone. Squares indicate wells.

At each time step, we use a the MPFA L-scheme [2] for solving the pressure equation, providing the values $F_{K,L}$. Then the method described in section 5.2.2 is used for the definition of new

stencils, selecting $\omega = 0.1$ for all faces which are inscribed in the cylinder. The parameter ν is taken equal to 0, allowing to implement the scheme in standard industrial codes by only modifying the stencil of the MPFA scheme (see Remark 3).

The same value for the time step is used for all the computations, which are stopped once a given quantity of water has been injected. Note that, in the mesh depicted on the right part of Figure 5.9, the line (P_2, O) becomes the $0y$ axis of the mesh.

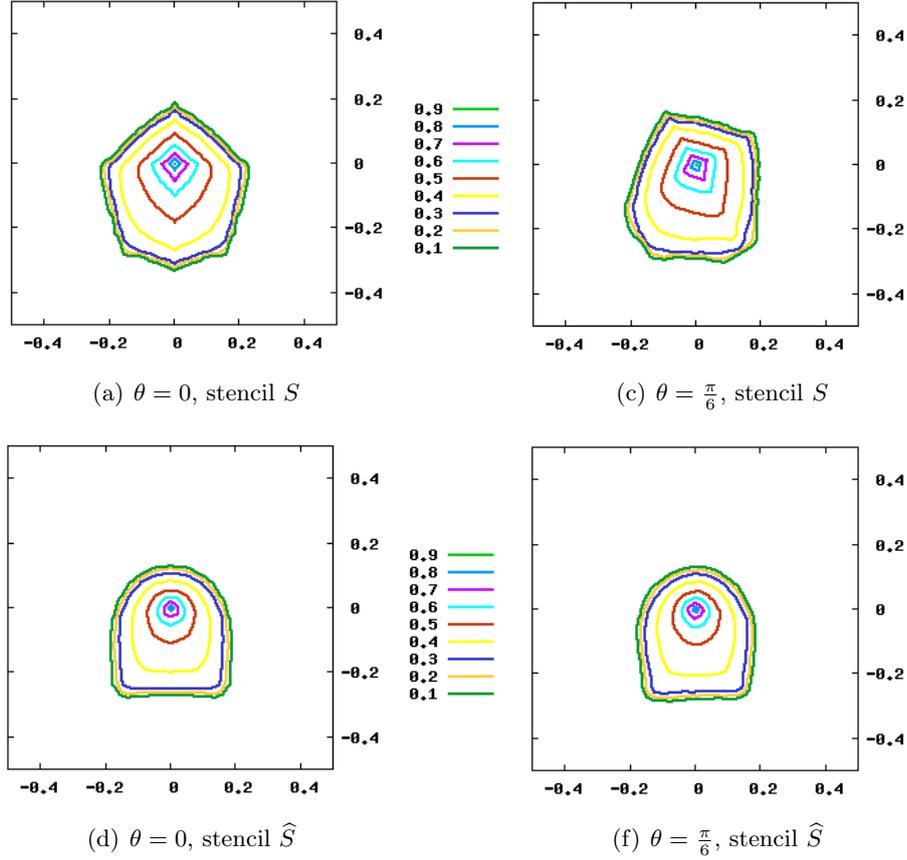


Figure 5.10: Water saturation contours u at the same time.

We see on Figure 5.10 the resulting contours of the saturation. We observe that the results obtained using the method described in this paper look very similar in the two grids, whereas the ones obtained using the initial five-point stencil are strongly distorted by the Grid Orientation Effect.

5.5 Conclusion

In this paper we have considered the nonlinear system of PDEs resulting from the conservation equations of two incompressible immiscible phases flowing within a porous medium. This

system, which may also be seen as the coupling of a diffusion equation with respect to the pressure and a convection equation with respect to the saturation, is shown in practical cases of mobility contrast, to lead to the apparition of the so-called Grid Orientation Effect (GOE). We propose a new procedure to overcome this phenomenon, based on the modification of the stencil of the discrete version of the convection equation, without modifying the pressure equation.

Some theoretical results (such as the L^∞ estimate and the convergence of the new scheme by using the weak BV-inequality) are obtained in a simplified case and some numerical results, including the comparison with an analytical solution, show the efficiency and the accuracy of the method in the non-simplified one.

For some values of the parameters of the method, we obtain a natural version of the nine-point schemes defined some decades ago on regular grids, whose advantage is to apply on the structured but not regular grids used in reservoir simulation, in association with Multi-Point Flux Approximation finite volume schemes. In this case, it may be immediately implemented in standard industrial codes by a simple modification of the stencils.

Bibliography

- [1] Aavatsmark, I., Eigestad, G.T.: Numerical Convergence of the MPFA O-method and U-method for General Quadrilateral Grids. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **51**, 939–961 (2006)
- [2] Aavatsmark, I., Eigestad, G.T., Heimsund, B.-O., Mallison, B.T., Nordbotten, J.M., Oian, E.: A New Finite-Volume Approach to Efficient Discretization on Challenging Grids. *SPE J.* **15(3)**, 658–669 (2010)
- [3] Agelas, L., Guichard, C., Masson, R.: Convergence of Finite Volume MPFA O-type Schemes for Heterogeneous Anisotropic Diffusion Problems. *IJVF* **7(2)**, (2010)
- [4] Aziz, K., Ramesh, A.B., Woo, P.T.: Fourth SPE Comparative Solution Project: Comparison of Steam Injection Simulators. *J. Pet. Tech.* **39**, 1576–1584 (1987)
- [5] Corre, B., Eymard, R., Quettier, L.: Applications of a Thermal Simulator to Field Cases, *SPE ATCE*, (1984)
- [6] Dawson, C., Sun, S., Wheeler, M.F.: Compatible Algorithms for Coupled Flow and Transport. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **193**, 2565–2580 (2004)
- [7] Eymard, R., Gallouët, T., Herbin, R.: The Finite Volume Method. *Handbook of Numerical Analysis, Ph. Ciarlet J.L. Lions eds*, **7**, 715–1022 (2000).
- [8] Eymard, R., Sonier, F.: Mathematical and Numerical Properties of Control-Volume Finite-Element Scheme for Reservoir Simulation. *SPE Reservoir Eng.* **9**, 283–289 (1994)
- [9] Keilegavlen, E., Kozdon, J., Mallison, B.T.: Monotone Multi-dimensional Upstream Weighting on General Grids. *Proc. ECMOR XII*, Oxford, (2010)
- [10] Lipnikov, K., Moulton, J.D., Svyatskiy, D.: A Multilevel Multiscale Mimetic (M3) Method for Two-phase Flows in Porous Media. *J. Comput. Phys.* **14**, 6727–6753 (2008)
- [11] D.K. Ponting. Corner Point Geometry in Reservoir Simulation. *In Clarendon Press, editor, Proc. ECMOR I*, 45–65, Cambridge, (1989)
- [12] Vinsome, P., Au, A.: One Approach to the Grid Orientation Problem in Reservoir Simulation. *Old SPE J.* **21**, 160–161 (1981)

- [13] Yanosik, J.L., McCracken, T.A.: A Nine-point, Finite-Difference Reservoir Simulator for Realistic Prediction of Adverse Mobility Ratio Displacements. *Old SPE J.* **19**, 253–262 (1979)

Quatrième partie

Conclusion du manuscrit et perspectives futures

Chapitre 6

Conclusion et perspectives

Sommaire

6.1	Bilan	176
6.2	Perspectives	177

6.1 Bilan

L'objectif global de nos travaux était d'étudier certaines méthodes numériques pour les écoulements polyphasiques dans le contexte de l'ingénierie de réservoir, méthodes devant répondre à un cahier des charges dressé par les fortes contraintes des milieux naturels considérés que sont les sous-sol géologiques. Un rapide état de l'art des schémas de discrétisation a permis de souligner la difficulté d'établir une méthode idéale dont l'écriture reste à ce jour un problème ouvert.

Notre étude a permis d'introduire les nouveaux schémas HAG, VAG et VAGR, développés et implémentés en 3D. Le schéma HAG est un schéma centré aux mailles, compact et symétrique. Cependant face à des problèmes à fort ratio d'anisotropie et/ou d'aspect, ce schéma introduit des inconnues additionnelles hybrides pouvant accroître son coût mémoire. Enfin le schéma VAG, et sa version révisée VAGR, sont des schémas avec inconnues aux mailles et aux nœuds, inconditionnellement symétriques et compacts puisque les inconnues aux mailles sont éliminées algébriquement. Côté mise en œuvre, celle du schéma HAG est très complexe et peut être ainsi un frein à tout développement industriel contrairement aux schémas VAG et VAGR dont les implémentations sont beaucoup plus aisées. Ces trois schémas, HAG, VAG et VAGR, cadrent avec le tout récent formalisme des schémas gradients décrit dans ce manuscrit et qui permet de définir un cadre d'étude théorique.

Pour jauger ces nouvelles méthodes nous avons dans un premier temps réalisé des séries de tests numériques, avec solution analytique, pour comparaison avec la famille des schémas linéaires multi-points (MPFA) centrés aux mailles. Cette famille MPFA a un fort écho dans la communauté pétrolière et regroupe notamment les schémas en O, L et G. L'inconvénient majeur de des méthodes MPFA, sur des problèmes généraux, est l'absence de symétrie, elles sont donc conditionnellement coercives et convergentes. Nos différents tests numériques ont ainsi mis en évidence le manque de robustesse du O-schéma face à des problèmes présentant de forts ratios d'anisotropie de perméabilité et/ou d'aspect. Le L-schéma est quant à lui en échec sur des maillages tétraédriques par singularité de matrices locales nécessaires à la reconstruction des gradients discrets. Le G-schéma, qui reprend les idées du L, arrive à contourner ce problème mais pas ceux mentionnés pour le O-schéma. Concernant les résultats obtenus avec nos nouvelles méthodes, VAGR ressort comme un schéma prometteur applicable avec succès à une vaste gamme de cas tests pour un bon compromis précision/coût. Notons que nous avons également pu comparer le comportement numérique des schémas VAG et VAGR à une gamme de méthodes nettement plus riche grâce au benchmark 3D proposé à l'occasion du congrès FVCA6.

L'étape suivante de notre travail a été d'étendre ces comparaisons numériques à la simulation des écoulements compositionnels polyphasiques en milieux poreux. Pour y parvenir nous proposons dans ce manuscrit une formulation générique de ces écoulements pour un nombre de phases et de constituants quelconques. Nous avons alors choisi d'articuler la discrétisation qui en découle, particulièrement pour l'approximation des flux de diffusion darcéens, autour des schémas volumes finis linéaires multi-points (MPFA) centrés aux mailles. Notre implémentation est ainsi basée, d'une part, sur un préprocesseur, dépendant du schéma de discrétisation des flux darcéens, qui génère un graphe dit des coefficients de transmissivité ; et d'autre part, d'un code prototype fortran pour le développement du cœur du module d'écoulement. Nous

avons par la suite constaté qu’il est également possible d’adapter le schéma VAG(R) à cette mise œuvre même si celui-ci est, rappelons-le, un schéma gradient centré aux nœuds. Pour ce faire, les volumes de contrôle sont définis à la fois comme les mailles et les nœuds du maillage. Il est alors possible de définir des flux numériques entre ces volumes. Un point clef de la méthode est alors d’associer un volume poreux à chaque volume de contrôle. Une méthode de redistribution du volume poreux conservative et robuste vis à vis des hétérogénéités a été proposée.

Les résultats obtenus par le nouveau schéma VAG(R) sur les différents cas tests sont satisfaisants aussi bien en termes de précision et performance notamment sur des maillages tétraédriques où les nœuds sont en nombre largement inférieur en comparaison des mailles. Nous montrons tout d’abord sur un cas simple découplé, constitué d’un front de type traceur, que la vitesse de propagation du front obtenue avec VAG(R) est semblable à celle du O-schéma. Puis, nous avons mis un place un cas test hétérogène, sur maillage grossier, qui illustre l’efficacité du choix de notre méthode de redistribution du volume poreux aux nœuds. Enfin, des derniers cas tests, sur maillages proches puits, donnent un aperçu des résultats prometteurs du schéma VAG(R) pour des applications métiers. Le dernier cas d’étude notamment présente une physique plus complexe et est inspiré d’observations de terrains. Nous considérons en effet un écoulement triphasique (liquide, gaz et minéral) à trois constituants (H_2O , CO_2 , *sel*) qui simule l’assèchement et la précipitation de sel dans un aquifère salin par injection de CO_2 miscible via un puits dévié comme cela a été observé, par exemple, dans une exploitation de gaz en mer de Barents. Soulignons enfin que ces tests numériques nous ont permis d’observer l’efficacité du schéma VAG(R) contre l’effet d’axe.

L’effet d’axe, également noté GOE (pour Grid Orientation Effect), est un phénomène de digitation numérique qui se produit lors de la simulation de deux fluides de viscosités différentes sur des maillages à dominante structurée tels que les maillages CPG (Corner Point Geometry) utilisés en ingénierie de réservoir. Nous proposons dans le chapitre 5 une méthode pour réduire ce phénomène basée sur la redistribution des flux dans les directions diagonales à l’aide de la notion de chemin. Nous avons explicité, pour cette méthodologie, une estimation L^∞ ainsi qu’une preuve de convergence basée sur une inégalité BV-faible. Des tests numériques témoignent de l’efficacité de la méthode. Le premier cas test est basé sur une solution analytique et illustre que les hypothèses théoriques requises pour la convergence semblent pouvoir être, dans la pratique, relâchées sans influence sur la qualité de la solution numérique. Le second cas test correspond à une configuration somme toute classique dans la communauté pétrolière pour tester un algorithme anti-GOE.

6.2 Perspectives

Au sujet des méthodes de discrétisation d’un flux de diffusion type loi de Darcy, le schéma HAG peut faire l’objet de réflexions supplémentaires, d’une part, sur son extension à des mailles quelconques et, d’autre part, sur l’expression de flux numériques pour son application à la simulation des écoulements polyphasiques.

De son côté, le schéma VAG a déjà fait l’objet de plusieurs améliorations et tests numériques aux résultats prometteurs, y compris en polyphasique. Cependant des tests supplémentaires

doivent être envisagés pour conforter (ou non) nos premières conclusions. On pourrait par exemple mettre en place des cas d'études en simulation de réservoir plus complexe. Dans un premier temps, une possibilité peu coûteuse serait de reprendre certains des cas présentés dans ce manuscrit en y incorporant les phénomènes de capillarité. L'étape suivante serait alors de prendre en compte d'autres phénomènes physiques comme, par exemple, introduire la thermique. Une piste pour des travaux futurs peut également être de tester le schéma VAG sur des maillages non structurés. Il est important, au travers de tests supplémentaires, de bien comprendre l'impact des paramètres de VAG (tels que la redistribution du volume poreux) sur les résultats aussi bien en termes de précision que de temps CPU ; pour ce faire un passage au 2D permettrait une meilleure maîtrise de la visualisation et de la convergence des solutions. Enfin, en termes de développement informatique, l'élimination des inconnues aux mailles dans le système linéaire issu de la méthode de Newton est un point qui reste encore à accomplir pour réaliser des comparaisons plus rigoureuse.

Pour finir, la méthode anti-GOE introduite en fin de manuscrit a été présentée et implémentée pour des maillages généraux, y compris en 3D. Ainsi une bonne perspective pourrait être de mettre en place des nouveaux cas tests comme, par exemple, sur des grilles de type Kershaw.

Résumé. Cette thèse est consacrée à l'étude de méthodes numériques pour la simulation des écoulements polyphasiques en milieu poreux, en vue de leur application à des problèmes d'ingénierie pétrolière ou environnementale. Nous présentons une formulation générique du modèle d'écoulements à nombre quelconque de composants présents dans un nombre quelconque de phases. Dans notre approche l'approximation des flux diffusifs (issus, par exemple, de la loi de Darcy) s'appuie sur de nouveaux schémas, appelés schémas gradient, qui ont plusieurs avantages sur les schémas industriels standard : ces derniers, qui sont des schémas volumes finis multi-points centrés aux mailles, ne sont généralement pas symétriques et convergent difficilement sur des cas à forts rapports d'anisotropie. Nous montrons en revanche que les schémas gradient conduisent naturellement à des approximations symétriques et convergentes. Parmi cette classe de schémas, nous étudions plus particulièrement le schéma VAG qui fait intervenir des inconnues au centre des mailles et aux sommets du maillage. Ce schéma conduit à la définition de flux entre le centre d'une maille et ses sommets, qui sont utilisés pour généraliser la méthode VAG au contexte polyphasique. Des tests numériques montrent alors que ce schéma est robuste, et conduit à un très bon compromis précision/coût, ce qui en fait un candidat idoine pour les applications industrielles. Nous présentons notamment un cas test, basé sur des observations de terrains, d'injection et de dissolution de CO₂ dans la région proche d'un puits foré dans un aquifère salin. Nous montrons alors que le schéma numérique permet de simuler l'assèchement et la précipitation de minéral observée en pratique. Un chapitre de la thèse est enfin consacré à l'étude pratique et théorique d'une méthode numérique générique pour contrôler l'effet d'axe lors de l'utilisation de schémas industriels.

Mots clefs : schémas volumes finis, schémas gradient, schéma VAG, écoulements polyphasiques en milieu poreux, effet d'axe.

Abstract. This thesis is focused on numerical methods dedicated to the simulation of multiphase flow in porous media, involved in petroleum or environmental engineering. We present a generic formulation of the flow model which is able to take into account any number of components within any number of phases. In our approach the approximation of the diffusive fluxes (mainly resulting from Darcy's law) is based on new schemes, called gradient schemes, which show several advantages over the standard industrial numerical schemes : these schemes, which belong to the class of the cell-centred Multi-Point Flux Approximation finite volume schemes, are not symmetric and may lead to difficulties of convergence in the case of high anisotropy ratios. We indeed show that gradient schemes are naturally providing symmetric and convergent approximations. We particularly study the Vertex Approximate Gradient scheme (called the VAG scheme), whose discrete unknowns are the values at the cell centres and at the vertices of the mesh. This scheme implies the definition of fluxes between the centre of a given cell and its vertices, used for the extension of the scheme to multiphase flow. Numerical tests show the robustness and the accuracy of the method for a low computational cost, which enables the use of the VAG scheme in an industrial framework. A test case, based on experimental data of injection and dissolution of CO₂ in the near-well region within a saline aquifer, shows the aptitude of the scheme for reproducing drying and salt precipitation, which are practically observed. Finally, a chapter of the thesis is devoted to the theoretical and practical study of a general numerical method for controlling Grid Orientation Effect in industrial simulators.

Keywords : finite volume schemes, gradient schemes, Vertex Approximate Gradient scheme, multiphase flow in porous media, Grid Orientation Effect

Laboratoire d'accueil : UMR CNRS 8050 LAMA Université Paris-Est Marne-la-Vallée