



UNIVERSITÉ PARIS-SUD  
ÉCOLE DOCTORALE 142 :  
MATHÉMATIQUES DE LA RÉGION PARIS-SUD

Laboratoire de Mathématiques d'Orsay

**THÈSE DE DOCTORAT**

MATHÉMATIQUES

par

**Huy Cuong VU DO**

**Méthodes numériques pour les écoulements  
et le transport en milieu poreux**

**Date de soutenance : 25/11/2014**

**Composition du jury :**

Directrice de thèse :	Danielle	<b>Hilhorst</b>	DR	Université Paris-Sud et CNRS
Rapporteurs :	Jürgen	<b>Fuhrmann</b>	Senior Researcher	WIAS, Berlin
	Pascal	<b>Omnès</b>	Professeur	Université Paris 13 et CEA
Examineurs :	Frédéric	<b>Lagoutière</b>	Professeur	Université Paris-Sud
	Roland	<b>Masson</b>	Professeur	Université de Nice
	Pierre	<b>Sochala</b>	Dr.	BRGM, Orléans



# Chapitre 1

## Introduction

Dans cette thèse, nous étudions divers problèmes autour de la modélisation de l'écoulement des eaux souterraines et du transport en milieu poreux ; nous effectuons des simulations numériques au moyen de méthodes de volumes finis et prouvons des résultats de convergence pour certains des algorithmes numériques sur lesquels nous nous appuyons.

### 1.1 Les modèles mathématiques

Le point de départ est l'étude de l'eau s'écoulant dans une nappe phréatique du sol. Il s'agit d'un problème d'intérêt général, car dans le monde entier, l'eau potable est extraite des nappes phréatiques. Si une nappe est polluée par un contaminant ou si elle est envahie par de l'eau salée, son eau peut ne plus être buvable, ce qui représente un énorme problème pour les villes et les villages environnants. Deux quantités essentielles que l'on doit calculer sont la pression et la vitesse de l'écoulement. Dans ce but, nous appliquons la loi de Darcy, qui exprime le fait que la vitesse est proportionnelle à l'opposé du gradient de la pression. Plus précisément, la loi de Darcy est de la forme

$$\mathbf{V} = -\frac{k}{\mu}\nabla p,$$

où  $\mathbf{V}$  est la vitesse,  $p$  la pression,  $k$  la perméabilité et  $\mu$  la viscosité dynamique. Dans de nombreux cas, l'effet de la gravité doit également être inclus ; La loi de Darcy devient alors

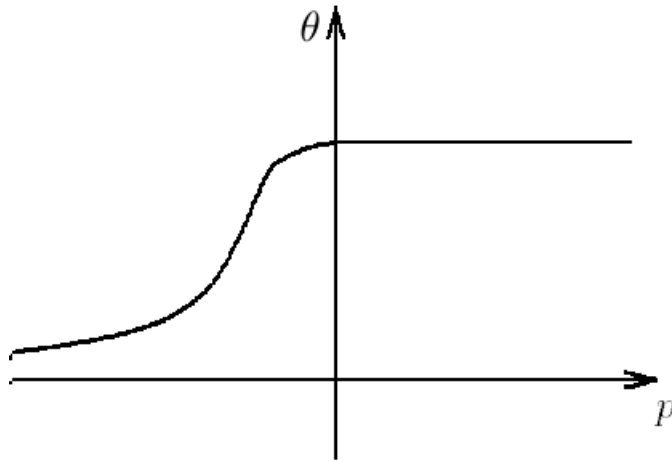
$$\mathbf{V} = -\frac{k}{\mu}(\nabla p - \rho\mathbf{g}),$$

où  $\rho$  est la densité du fluide et  $\mathbf{g}$  la gravité. Nous définissons ensuite  $\theta$  comme la saturation dans le milieu poreux (un profil typique de saturation est donné dans la Figure 1) :  $\theta$  est une fonction strictement croissante pour les valeurs négatives de la pression et  $\theta$  prend une valeur constante pour les valeurs positives de la pression. L'équation pour le bilan de masse est donnée par

$$\frac{\partial}{\partial t}\theta(p) + \operatorname{div}\mathbf{V} = 0.$$

En substituant la loi de Darcy dans l'équation du bilan de masse, on obtient l'équation de Richards

$$\frac{\partial}{\partial t}\theta(p) = \operatorname{div}\left(\frac{k(\theta(p))}{\mu}(\nabla p - \rho\mathbf{g})\right),$$



**FIGURE 1.1** – A typical profile of saturation.

où l'on suppose que la perméabilité  $k$  dépend de la saturation de l'eau  $\theta$ , ce qui s'exprime par la relation  $k = k(\theta(p))$ . On dit que l'équation de Richards est elliptique-parabolique, elliptique dans les sous-domaines où  $p \geq 0$  si bien que  $\frac{\partial}{\partial t}\theta(p) = 0$  et parabolique dans les sous-domaines où  $p < 0$ . Afin de calculer pression et vitesse, on résout l'équation de Richards avec des conditions aux limites et une condition initiale appropriées. Dans le cas où le domaine est complètement saturé, c'est-à-dire si  $p \geq 0$  partout, il vient à résoudre l'équation stationnaire

$$\operatorname{div}\left(\frac{k}{\mu}(\nabla p - \rho \mathbf{g})\right) = 0.$$

Résoudre l'équation de Richards ou l'équation stationnaire correspondante permet de calculer la pression et la vitesse de déplacement du fluide dans l'aquifère. Dans le cas où des contaminants sont présents dans les eaux souterraines, par exemple parce qu'ils ont été jetés dans le sol par une entreprise chimique il y a un certain nombre d'années, il est essentiel de pouvoir les localiser. Dans ce but, la méthode la plus classique consiste à résoudre une équation de convection-diffusion-réaction parabolique, qui peut être dégénérée, pour le transport de contaminants, comme par exemple

$$\frac{\partial}{\partial t}\beta(c) - \operatorname{div}(\mathbf{\Lambda}\nabla c) + \operatorname{div}(\mathbf{V}c) + f(c) = q,$$

où la fonction inconnue  $c$  représente la concentration des espèces dissoutes, qui diffusent et sont transportées par l'eau souterraine. Un phénomène essentiel est le processus d'adsorption par le squelette poreux, que l'on peut supposer très rapide. On peut supposer que la dissolution et l'adsorption des espèces sont en équilibre, ce qui est modélisé par la fonction  $\beta$ , où  $\beta'$  peut être infinie en plusieurs points. La matrice  $\lambda$  est donnée par un tenseur de diffusion-dispersion qui peut être anisotrope et hétérogène, la fonction  $f$  représente les réactions chimiques, et  $q$  est un terme source. Le couplage entre les équations pour la pression et la vitesse et l'équation pour la concentration est limité dans le sens suivant : on peut d'abord calculer, de façon indépendante, la pression et la vitesse de l'écoulement en s'appuyant sur l'équation de Richards stationnaire ou instationnaire ; puis on substitue la vitesse obtenue dans l'équation d'évolution pour la concentration du contaminant.

Ces équations peuvent aussi intervenir sous une forme modifiée. Par exemple, on applique souvent la transformation de Kirchhoff pour simplifier l'étude mathématique de l'équation de Richards. Dans ce but, on définit

$$F(s) := \int_0^s k(\theta(\tau))d\tau,$$

et l'on suppose que  $F$  est inversible. Si l'on pose  $u = F(p)$  et

$$\mathcal{C}(u) = \mathcal{C}(F(p)) = \theta(p),$$

on obtient l'équation transformée

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{C}(u) = \Delta u - \operatorname{div}\left(\frac{k(\mathcal{C}(u))}{\mu}\rho\mathbf{g}\right).$$

Ces équations peuvent également être couplées plus fortement ; un exemple typique est le cas d'écoulements à densité variable, où la densité  $\rho$  et la viscosité  $\mu$  dépendent de la concentration  $c$ , si bien que  $\rho = \rho(c)$  et  $\mu = \mu(c)$ . Un exemple de modèle est donné ci-dessous :

$$\begin{cases} \mathbf{q} = -\frac{k}{\mu}(\nabla p - \rho(c)\mathbf{g}), \\ \Phi \frac{\partial \rho(c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q}\rho(c)) = Q_\rho, \\ \Phi \frac{\partial (\rho(c)c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q}\rho(c)c - \rho(c)\mathbf{D}\nabla c) = Q, \end{cases}$$

où la constante positive  $\Phi$  est la porosité. Un système voisin, également couplé avec une équation pour la température, permet de modéliser la récupération de la chaleur contenue dans les aquifères, avec, par exemple, le but de chauffer des maisons ou de produire de l'eau chaude. La densité  $\rho$  et la viscosité  $\mu$  dépendent alors également de la température  $\Theta$  si bien que  $\rho = \rho(c, \Theta)$  et  $\mu = \mu(c, \Theta)$  ; dans ce cas, il est également nécessaire de résoudre une équation de la forme

$$K_d \frac{\partial \Theta}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q}\Theta - \overline{\mathbf{D}}\nabla\Theta) = Q_\Theta.$$

## 1.2 Les méthodes numériques

Pour la résolution numérique, nous nous appuyons sur des méthodes de volumes finis, soit la méthode des volumes finis standard soit la méthode de volumes finis généralisés SUSHI. Ces méthodes appartiennent elles-mêmes à la classe plus large de méthodes appelées schémas gradient.

Les schémas de volumes finis ont d'abord été développés par les ingénieurs afin d'étudier des phénomènes physiques couplés complexes où la conservation de quantités extensives (telles que les masses, l'énergie, l'impulsion ...) doit être soigneusement respectée par la solution approchée. Un avantage de cette famille de méthodes est qu'une grande variété de maillages peut être utilisée. L'idée de base est la suivante : on intègre les équations aux dérivées partielles dans chaque élément de volume et on définit des flux approchés à travers les frontières des éléments de volumes.

Cependant, l'application de la méthode des volumes finis standard présente certains inconvénients. On suppose que le domaine spatial est un sous-ensemble ouvert borné de  $\mathbb{R}^d$  de frontière polyédrale, qui est discrétisé à l'aide d'éléments de volume polyédriques. Une première contrainte est liée au fait qu'une condition, appelée condition d'orthogonalité doit être satisfaite : pour pouvoir appliquer la méthode des volumes finis standard, il est nécessaire d'associer un point à chaque élément de volume et le segment joignant deux points correspondant à deux éléments de volume voisins doit être orthogonal à l'interface entre les deux éléments de volume. Ensuite, les éléments de volume doivent être compatibles, c'est-à-dire qu'un côté d'élément de volume doit précisément coïncider soit avec un côté d'un élément de volume voisin soit avec un segment de la frontière du domaine. Un autre problème est que l'on ne peut pas appliquer la méthode des volumes finis standard à des équations aux dérivés partielles où la matrice de diffusion est une matrice pleine, ce qui est souvent le cas pour les équations paraboliques modélisant le transport de contaminants.

Ceci nous amène à appliquer le schéma de volumes finis SUSHI qui présente notamment les avantages suivants : il n'est pas nécessaire d'imposer la condition d'orthogonalité, les éléments de volume peuvent ne pas être compatibles et de plus, le tenseur de diffusion peut avoir la forme d'une matrice pleine. Alors qu'un degré de liberté est associé à chaque élément de volume dans le cas de la méthode des volumes finis standard, le schéma SUSHI nécessite non seulement un degré de liberté par élément de volume mais également un degré de liberté correspondant à chaque côté. Ce schéma est basé sur la définition d'un gradient discret qui permet de définir une famille de flux numériques associés à une forme bilinéaire continue, coercive, et symétrique. A son tour, le schéma SUSHI peut être considéré comme un cas particulier de la famille plus générale des schémas gradient.

## 1.3 Contenu de la thèse

Cette thèse comporte quatre chapitres. Le Chapitre 1 est composé de deux parties ; il porte sur l'étude numérique des écoulements à densité variable en milieux poreux. Le Chapitre 2 porte sur la discrétisation de l'équation de Richards à l'aide du schéma de volumes finis généralisés SUSHI. Au Chapitre 3, nous étudions un schéma gradient pour le problème de Signorini. Nous présentons au Chapitre 4 la résolution numérique d'un écoulement à densité variable où les équations sont couplées avec une équation d'évolution pour la température.

### 1.3.1 Chapitre 1 : Ecoulements à densité variable en milieu poreux

Dans ce chapitre, nous considérons un milieu poreux contenant à la fois de l'eau douce et de l'eau salée ; plus précisément nous étudions un système couplé décrivant l'interaction entre l'écoulement et le transport dans un milieu poreux, dont la densité  $\rho$  est une fonction strictement croissante de la concentration  $c$  de l'eau salée ; plus précisément, nous supposons que  $\rho(c) = \rho_0(1 + \alpha c)$  où  $\alpha$  est une constante positive. Nous résolvons une équation parabolique non linéaire de convection-diffusion pour la concentration de sel couplée à une équation qui peut être perçue comme une équation elliptique en pression et que l'on déduit en substituant

la loi de Darcy (la première équation du système ci-dessous) dans la troisième équation

$$\begin{cases} \mathbf{q} = -\frac{k}{\mu}(\nabla p - \rho(c)\mathbf{g}) & \text{dans } \Omega \times (0, T], \\ \Phi \frac{\partial \rho(c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q}\rho(c)) = 0 & \text{dans } \Omega \times (0, T], \\ \Phi \frac{\partial (\rho(c)c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q}\rho(c)c - \rho(c)\mathbf{D}\nabla c) = 0 & \text{dans } \Omega \times (0, T]. \end{cases} \quad (1.3.1)$$

Nous résolvons ces équations avec les conditions aux limites

$$\begin{cases} c = c_D(\mathbf{x}, t) & \text{sur } \partial\Omega_D^c \times (0, T], \\ \frac{\partial c}{\partial n} = \bar{c}_N(\mathbf{x}, t) & \text{sur } \partial\Omega_N^c \times (0, T], \\ p = p_D(\mathbf{x}, t) & \text{sur } \partial\Omega_D^p \times (0, T], \\ \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = \bar{q}_N(\mathbf{x}, t) & \text{sur } \partial\Omega_N^p \times (0, T], \end{cases}$$

avec  $\partial\Omega = \overline{\partial\Omega_D^c} \cup \overline{\partial\Omega_N^c} = \overline{\partial\Omega_D^p} \cup \overline{\partial\Omega_N^p}$  où  $\partial\Omega_D^c$  et  $\partial\Omega_D^p$  correspondent à des conditions aux limites de Dirichlet et  $\partial\Omega_N^c$  et  $\partial\Omega_N^p$  correspondent à des conditions aux limites de Neumann pour la concentration et la pression respectivement. La fonction initiale est donnée par

$$c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}) \quad \text{dans } \Omega.$$

La porosité  $\Phi$  est le rapport des vides (espaces vides) sur le volume total. Dans la première équation (0.3.1), à savoir, la loi de Darcy,  $\mathbf{q}$  est le flux (débit par unité de surface),  $p$  la pression,  $k$  la perméabilité,  $\mu$  la viscosité dynamique, et  $\mathbf{g}$  la gravité.

La première partie du Chapitre 1 est consacrée à l'application de la méthode des volumes finis standard. Nous définissons  $u(\mathbf{x}, t) = (\rho(c)c)(\mathbf{x}, t)$ , où la fonction  $\rho$  est strictement croissante. Puisque la fonction  $u \rightarrow c$  est inversible, nous pouvons réécrire la concentration en fonction de  $u$ , soit  $c = r(u)$  et  $\rho(c) = \rho(r(u)) = R(u)$ , où nous avons posé  $\theta(c) = \int_0^c \rho(s)ds$  de sorte que  $\nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla\theta(c)) = \nabla \cdot (\mathbf{D}\rho(c)\nabla c)$  et défini  $\varphi(u) = \theta(c) = \theta(r(u))$ . Les équations en  $u$  correspondantes sont données par

$$\begin{cases} \mathbf{q} = -\frac{k}{\mu}(\nabla p - R(u)\mathbf{g}) & \text{dans } \Omega \times (0, T], \\ \Phi \frac{\partial R(u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q}R(u)) = Q_\rho & \text{dans } \Omega \times (0, T], \\ \Phi \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q}u) - \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla\varphi(u)) = Q & \text{dans } \Omega \times (0, T], \end{cases} \quad (1.3.2)$$

Dans la première partie du Chapitre 1, nous proposons un schéma semi-implicite de volumes finis correspondant au problème (0.3.1). Il est donné par les équations

$$c_K^0 = \frac{1}{|K|} \int_K c_0(\mathbf{x})d\mathbf{x}, \quad u_K^0 = \rho(c_K^0)c_K^0,$$

$$\begin{cases} \frac{\Phi|K|}{\delta t} \left( R(u_K^{n-1}) - R(u_K^{n-2}) \right) + \sum_{L \in \mathcal{N}_K} F_{KL}(p^n, u^{n-1}) R(\hat{u}_{KL}^{n-1}) = 0, \\ \frac{\Phi|K|}{\delta t} (u_K^n - u_K^{n-1}) + \sum_{L \in \mathcal{N}_K} F_{KL}(p^n, u^{n-1}) \tilde{u}_{KL}^n + \sum_{L \in \mathcal{N}_K} Q_{KL}(u^n) = 0, \end{cases}$$

où  $F_{KL}(p^m, u^n)$  est le flux discret et  $Q_{KL}(u^n)$  est un terme de diffusion discret. Le terme  $\hat{u}_{KL}^{n-1}$  correspond à une discrétisation centrée et  $\tilde{u}_{KL}^n$  à une discrétisation amont des termes de convection.

Nous présentons des résultats numériques pour deux cas de test : le problème de Henry qui correspond à l'avancée d'un front d'eau salée dans une nappe captive qui est initialement chargée d'eau douce, et la rotation d'une interface entre eau douce et eau salée. L'eau salée, qui est plus lourde que l'eau douce, a tendance à s'écouler vers le bas, tandis que l'eau douce remonte vers le haut. Au temps initial, le rectangle de gauche est rempli d'eau de mer tandis que celui de droite est rempli d'eau douce. L'interface entre les deux fluides pivote dans le sens anti-horaire jusqu'à ce qu'il soit horizontal. Dans cette partie, nous utilisons une méthode de volumes finis standard avec des mailles carrées uniformes pour simuler l'évolution des solutions des deux problèmes décrits ci-dessus. Les résultats numériques sont comparés à ceux obtenus avec le logiciel FFlow.

Cet article écrit en collaboration avec Danielle Hilhorst et Yushan Wang est publié dans le ESAIM Proceedings 2012.

Dans la deuxième partie, nous combinons un schéma semi-implicite en temps avec la méthode de volumes finis généralisés SUSHI pour la résolution numérique du système (0.3.2). Afin d'appliquer la méthode SUSHI, nous réécrivons tout d'abord le système (0.3.2) sous la forme,

$$\begin{cases} \mathbf{q} = -\frac{k}{\mu}(\nabla p - \varrho(w)\mathbf{g}) & \text{dans } \Omega \times (0, T], \\ \Phi \frac{\partial \varrho(w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q}\varrho(w)) = Q_\rho & \text{dans } \Omega \times (0, T], \\ \Phi \frac{\partial m(w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q}m(w)) - \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla w) = Q & \text{dans } \Omega \times (0, T], \end{cases}$$

où  $w = \varphi(u)$ ,  $m = \varphi^{-1}$  et  $\varrho = R(m)$ . On remarque que  $m(w)$  et  $\varrho(w)$  correspondent respectivement à la fonction de masse  $\rho(c)c$  et à la fonction de densité  $\rho(c)$ .

Une caractéristique essentielle du schéma SUSHI est qu'il permet d'utiliser des éléments de volume qui ne se correspondent pas. En particulier, nous pouvons appliquer un maillage adaptatif de carrés ou de cubes de différentes tailles dans les tests numériques. Les fonctions inconnues varient fortement dans certaines parties du domaine alors qu'elles sont presque constantes ailleurs. Nous raffinons le maillage dans les régions de fortes variations des fonctions inconnues alors que nous fusionnons des éléments dans les zones où elles ne subissent que de faibles variations. Ceci permet de réduire le nombre des inconnues (qui dépendent du nombre d'éléments et de côtés d'éléments de volumes) et de diminuer le temps de calcul. Après chaque raffinement ou déraffinement, nous devons nous appuyer sur de nouvelles données pour le maillage et pour les fonctions inconnues.

Nous effectuons des simulations numériques non seulement pour le problème de Henry et le problème de l'interface en rotation, mais aussi pour un autre cas test appelé problème de saltpool en dimension trois d'espace.

La deuxième partie de ce chapitre est un travail en collaboration avec Danielle Hilhorst et Yueyuan Gao.



### 1.3.2 Chapitre 2 : Le schéma volume fini généralisé SUSHI pour la discrétisation de l'équation de Richards

Dans ce chapitre, nous étudions l'équation de Richards en nous appuyant sur la transformation de Kirchhoff. Soit  $\Omega$  un sous-ensemble ouvert borné polygonal de  $\mathbb{R}^d$  ( $d = 1, 2$  ou  $3$ ) et soit  $T$  un nombre réel positif ; Nous considérons la forme suivante de l'équation de Richards dans le domaine espace-temps  $Q_T = \Omega \times (0, T)$

$$\partial_t \theta(p) - \operatorname{div} \left( k_r(\theta(p)) \mathbf{K}(\mathbf{x}) \nabla(p + z) \right) = 0, \quad (1.3.3)$$

où  $p(\mathbf{x}, t)$  est la pression. La fonction  $\theta(p)$  est la saturation en eau,  $\phi(\mathbf{x})$  la porosité,  $\mathbf{K}(\mathbf{x})$  le tenseur de perméabilité absolue et la fonction scalaire  $k_r(\theta)$  correspond à la perméabilité relative qui dépend de la teneur en eau. Les coordonnées de l'espace sont définies par  $\mathbf{x} = (x, z)$  en dimension 2 et  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  en dimension 3.

Afin de pouvoir effectuer la transformation de Kirchhoff, nous définissons

$$F(s) := \int_0^s k_r(\theta(\tau)) d\tau,$$

et supposons que la fonction  $F$  est inversible. Nous posons ensuite  $u = F(p)$  et  $c(u) = c(F(p)) = \theta(p)$ . La transformation de Kirchhoff conduit à l'égalité  $\nabla u = k_r(\theta(p)) \nabla p$ , et l'équation (0.3.3) devient

$$\partial_t c(u) - \operatorname{div} \left( \mathbf{K}(\mathbf{x}) \nabla u \right) - \operatorname{div} \left( k_r(c(u)) \mathbf{K}(\mathbf{x}) \nabla z \right) = 0. \quad (1.3.4)$$

Nous résolvons l'équation (0.3.4) avec une condition de Dirichlet non homogène et une condition initiale prescrite. Nous appliquons la méthode SUSHI [7] pour la discrétisation en espace combinée avec une discrétisation en temps totalement implicite.

Nous faisons tout d'abord une présentation détaillée du schéma SUSHI, qui a été proposé par Eymard et al. [7], avant de définir le problème approché  $(P_{\mathcal{D}, \delta t})$ . Nous établissons une estimation a priori pour la solution approchée dans une norme discrète correspondant à une norme dans  $L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ . C'est à l'aide de ces estimations et d'arguments basés sur le degré topologique, que nous prouvons l'existence d'une solution du problème  $(P_{\mathcal{D}, \delta t})$ . Nous établissons ensuite des estimations sur les différences de translatées en temps et en espace. Ces estimations impliquent la compacité relative de suites de solutions approchées par le théorème de Fréchet-Kolmogorov. Nous en déduisons la convergence forte dans  $L^2$  des solutions approchées vers l'unique solution du problème continu  $(P)$ . Pour les démonstrations, nous appliquons des méthodes inspirées de celles de [7] et [9]. Enfin, nous présentons des résultats numériques pour des cas tests standard. Dans le premier cas test, le problème de Hornung - Messing, les résultats sont comparés à la solution analytique. Nous calculons aussi l'ordre numérique de la convergence de la solution. Nous montrons que le schéma est d'ordre un en temps et d'ordre deux en espace. Dans le second cas test, le problème de Haverkamp, nous comparons la solution numérique avec celle obtenue par Pierre Sochala à l'aide d'une méthode d'éléments finis. Nous utilisons des maillages adaptatifs non conformes pour tous les cas tests effectués dans ce chapitre.

### 1.3.3 Chapitre 3 : Un schéma gradient pour le problème de Signorini

Un sujet d'intérêt essentiel est le calcul de solutions de problèmes faisant intervenir des conditions aux limites de type Signorini, appelées également conditions de débordement. Ces conditions sont de la forme

$$\mathbf{V} \cdot \mathbf{n} \geq 0, \quad u \leq 0, \quad \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} u = 0 \quad \text{sur } \Gamma_S,$$

où  $\Gamma_S$  est la partie de  $\partial\Omega$  où les conditions aux limites de Signorini sont imposées, et où la vitesse  $\mathbf{V}$  est donnée par la loi de Darcy

$$\mathbf{V} = -\mathbf{K}(\mathbf{x})\nabla u.$$

Nous négligeons ici la gravité. Les conditions de Signorini expriment le fait que (i) l'eau ne peut pas rentrer dans le domaine ; (ii) la pression ne peut pas être positive sur  $\Gamma_S$  ; (iii) l'eau ne peut sortir du domaine que dans les parties de  $\Gamma_S$  où la pression  $u$  est nulle.

Le problème elliptique associé est de la forme

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla u) = f & \text{dans } \Omega, \\ u = 0 & \text{sur } \Gamma_D, \\ u \leq 0, \quad -(\mathbf{K}\nabla u) \cdot \mathbf{n} \geq 0 & \text{sur } \Gamma_S, \\ (\mathbf{K}\nabla u) \cdot \mathbf{n} u = 0 & \text{sur } \Gamma_S, \end{array} \right. \quad (1.3.5)$$

où  $\Omega$  est un sous-ensemble ouvert borné polyédrale connexe de  $\mathbb{R}^d$ , où  $d \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ , et où  $\partial\Omega = \bar{\Gamma}_D \cup \bar{\Gamma}_S$  avec  $|\bar{\Gamma}_D| \geq 0$ . Une solution faible de (0.3.5) est définie comme une fonction  $u \in V$  telle que

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \mathbf{K}(\nabla v - \nabla u) d\mathbf{x} \geq \int_{\Omega} f(v - u) d\mathbf{x} \quad \text{pour tous } v \in V,$$

où  $V$  est défini par

$$V = \{v \in H^1(\Omega), v|_{\Gamma_D} = 0 \text{ et } v|_{\Gamma_S} \leq 0\}.$$

Nous nous appuyons sur une discrétisation de type gradient pour la résolution numérique de ce problème. Les schémas gradient sont des méthodes non conformes écrites sous une forme variationnelle discrète et basées sur des approximations indépendantes des fonctions et de leurs gradients. Des travaux antérieurs ont montré que plusieurs méthodes connues entrent dans le cadre des schémas gradient, comme en particulier le schéma SUSHI. Il a été démontré dans [4] que quatre propriétés, à savoir la coercivité, la consistance, la limite-conformité et la compacité, sont suffisantes pour permettre de démontrer la convergence des schémas gradient pour des problèmes elliptiques et paraboliques linéaires et non linéaires, ainsi que pour certains problèmes non locaux. Ils ont également démontré que la famille de schémas mixtes hybrides mimétiques, qui inclut notamment la méthode de volumes finis généralisée SUSHI, peut être visualisée comme un schéma gradient avec ces quatre propriétés.

Les conditions aux limites de Signorini nous conduisent à modifier la notion de conformité limite, l'une des propriétés standard des discrétisations gradient. Les discrétisations gradient se caractérisent de la façon suivante : en s'inspirant de [4], on définit une discrétisation gradient  $\mathcal{D}$  du problème (0.3.5) par un espace vectoriel  $X_{\mathcal{D}}$  et un cône  $X_{\mathcal{D}}^S$  associé à la condition aux limites de Dirichlet homogène et à celle de Signorini et par les deux opérateurs linéaires introduits ci-dessous :

*Definition 1* (Discrétisation Gradient). Une discrétisation gradient  $\mathcal{D}$  pour les conditions aux limites de Dirichlet homogène et de Signorini est définie par un triplet  $\mathcal{D} = (X_{\mathcal{D}}^S, \Pi_{\mathcal{D}}, \nabla_{\mathcal{D}})$ , où

- L'ensemble des inconnues discrètes  $X_{\mathcal{D}}^S$  est un cône négatif de l'espace vectoriel  $X_{\mathcal{D}}$  ;
- L'application linéaire  $\Pi_{\mathcal{D}} : X_{\mathcal{D}}^S \rightarrow L^2(\Omega)$  permet d'obtenir une fonction reconstruite ;
- L'application linéaire  $\nabla_{\mathcal{D}} : X_{\mathcal{D}}^S \rightarrow L^2(\Omega)^d$  permet d'obtenir un gradient discret reconstruit.

Nous supposons que  $\|\cdot\|_{\mathcal{D}} = \|\nabla_{\mathcal{D}} \cdot\|_{L^2(\Omega)^d}$  est une norme sur  $X_{\mathcal{D}}^S$ .

Nous rappelons ci-dessous les notions qui caractérisent les schémas gradient [4], où nous modifions la notion de conformité limite.

*Definition 2.* [Coercivité, consistance, conformité limite, compacité]

**Coercivité** : Soit  $\mathcal{D}$  une discrétisation gradient du problème (0.3.5) au sens de la Définition 1, et soit  $C_{\mathcal{D}}$  la norme de l'application linéaire  $\Pi_{\mathcal{D}}$ , définie par

$$C_{\mathcal{D}} = \max_{v \in X_{\mathcal{D}}^S} \frac{\|\Pi_{\mathcal{D}} v\|_{L^2(\Omega)}}{\|v\|_{\mathcal{D}}}.$$

Une suite  $(\mathcal{D}_m)_{m \in \mathbb{N}}$  de discrétisations gradient est coercive s'il existe une constante  $C_{\mathcal{P}} \geq 0$  telle que  $C_{\mathcal{D}_m} \leq C_{\mathcal{P}}$  pour tout  $m \in \mathbb{N}$ .

**Consistance** : Soit  $\mathcal{D}$  une discrétisation gradient du problème (0.3.5) au sens de la Définition 1 et soit  $\bar{v} \in V$  ; on définit

$$S_{\mathcal{D}}(\bar{v}) = \inf_{v \in X_{\mathcal{D}}^S} \left( \|\nabla_{\mathcal{D}} v - \nabla \bar{v}\|_{L^2(\Omega)^d} + \|\Pi_{\mathcal{D}} v - \bar{v}\|_{L^2(\Omega)} \right).$$

Une suite  $(\mathcal{D}_m)_{m \in \mathbb{N}}$  de discrétisations gradient est consistente si pour tout  $\bar{v} \in V$ ,  $\lim_{m \rightarrow +\infty} S_{\mathcal{D}_m}(\bar{v}) = 0$ .

**Conformité limite** : Soit  $(\mathcal{D}_m)_{m \in \mathbb{N}}$  une suite de discrétisations gradient du problème (0.3.5) au sens de la Définition 1, et soit  $(v_m \in X_{\mathcal{D}_m}^S)_{m \in \mathbb{N}}$  telle qu'il existe une constante  $C$  positive telle que  $\|\Pi_{\mathcal{D}_m} v_m\|_{L^2(\Omega)} + \|\nabla_{\mathcal{D}_m} v_m\|_{L^2(\Omega)^d} \leq C$ . La suite est dite limite conforme si

$$\limsup_{m \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \{\nabla_{\mathcal{D}_m} v_m \cdot \mathbf{q} + \Pi_{\mathcal{D}_m} v_m \operatorname{div} \mathbf{q}\} \, d\mathbf{x} \leq 0 \quad \text{for all } \mathbf{q} \in \mathcal{W},$$

où l'espace  $\mathcal{W}$  est défini par

$$\mathcal{W} = \{\mathbf{q} \in (H^1(\Omega))^d, \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}|_{\Gamma_S} \geq 0\}.$$

**Compacité** : Une suite de discrétisations gradient  $(\mathcal{D}_m)_{m \in \mathbb{N}}$  est compacte si pour toute suite  $v_m \in X_{\mathcal{D}_m}^S$ ,  $m \in \mathbb{N}$  telle qu'il existe  $C > 0$  avec  $\|\nabla_{\mathcal{D}_m} v_m\|_{L^2(\Omega)^d} \leq C$  pour tout  $m \in \mathbb{N}$ , alors il existe  $\bar{v} \in L^2(\Omega)$  telle que

$$\lim_{m \rightarrow +\infty} \|\Pi_{\mathcal{D}_m} v_m - \bar{v}\|_{L^2(\Omega)} = 0.$$

Nous démontrons la relation suivante entre les espaces  $V$  et  $\mathcal{W}$  : soient  $\mathbf{G} \in L^2(\Omega)^d$  et  $v \in L^2(\Omega)$  telles que

$$\int_{\Omega} \{\mathbf{G} \cdot \mathbf{q} + v \operatorname{div} \mathbf{q}\} dx \leq 0 \text{ pour tout } \mathbf{q} \in \mathcal{W}, \text{ alors } v \in V \text{ et } \mathbf{G} = \nabla v.$$

Nous définissons ensuite la solution approchée du problème (0.3.5) comme la solution de l'inégalité variationnelle discrète

$$\int_{\Omega} \nabla_{\mathcal{D}} u \cdot \mathbf{K}(\nabla_{\mathcal{D}} v - \nabla_{\mathcal{D}} u) dx \geq \int_{\Omega} f(\Pi_{\mathcal{D}} v - \Pi_{\mathcal{D}} u) dx$$

pour tout  $v \in X_{\mathcal{D}}^S$ . Nous vérifions que ce problème possède une solution unique et montrons qu'elle converge vers la solution unique du problème (0.3.5).

Il s'agit d'un travail en collaboration avec Konstantin Brenner et Danielle Hilhorst.

### 1.3.4 Chapitre 4 : Simulation numérique d'un écoulement à densité variable couplé avec le transfert de chaleur en milieu poreux

Nous poursuivons l'étude du Chapitre 1 sur l'interaction entre l'écoulement et le transport dans un milieu poreux en prenant également en compte le transfert de chaleur. La chaleur peut être récupérée à partir de l'eau souterraine. Selon l'application, la chaleur récupérée peut être utilisée pour la production de chaleur ou pour la production d'électricité. Le chauffage géothermique permet à la fois de remplacer le chauffage conventionnel et la production d'eau chaude. Nous étudions un système couplé décrivant l'interaction entre l'écoulement et le transport dans un milieu poreux, où la densité et la viscosité dépendent de la concentration des espèces à transporter, aussi bien que de la température. Plus précisément, nous résolvons un système de trois équations paraboliques non linéaires pour la concentration de sel  $C$ , la température  $\Theta$  et la charge hydraulique  $h$ .

Nous présentons ci-dessous un système pour un écoulement à densité variable dans une nappe aquifère, la concentration du soluté et le transport de la chaleur ainsi que les formules de la densité du fluide et de la viscosité tels qu'ils sont donnés dans [18]. Il s'agit d'un système linéarisé, posé sur un domaine  $\Omega \times (0, T)$ . L'équation pour l'écoulement à densité variable est donnée par

$$S_s \rho \frac{\partial h}{\partial t} + \theta \frac{\partial \rho}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q} \rho) = q_s \rho_s \quad \text{dans } \Omega \times (0, T],$$

où  $\rho$  est la densité du fluide,  $\theta$  la porosité,  $q_s$  une source ou un puits de fluide de densité  $\rho_s$ ,  $S_s$  est le stockage spécifique. La vitesse  $\mathbf{q}$  est donnée par la loi de Darcy :

$$\mathbf{q}(h, \mu, \rho) = -\frac{\mu_0}{\mu} \mathbf{K}_0 \left( \nabla h + \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \nabla z \right),$$

où  $\mu$  est la viscosité dynamique et  $\mu_0$  la viscosité de référence,  $\rho_0$  la densité du fluide à la concentration de référence  $C_0$  et température de référence  $\Theta_0$ .  $\mathbf{K}_0$  est le tenseur de conductivité hydraulique du matériau saturé. L'équation de transport de soluté dans les eaux souterraines est une équation d'advection-dispersion. Sa forme générale est donnée par

$$\left(1 + \frac{\rho_b K_d^C}{\theta}\right) \frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q} C) - \nabla \cdot \left( (\theta D_m^C + \mathbf{a} \cdot \mathbf{q}) \nabla C \right) = q_s C_s \quad \text{dans } \Omega \times (0, T],$$

où  $\rho_b$  est la densité apparente,  $K_D^C$  le coefficient de distribution de la salinité,  $D_m^C$  le coefficient de diffusion et  $\mathbf{a}$  est le tenseur de dispersivité. Ensuite, nous présentons une forme possible de l'équation de transport de la chaleur, qui a été proposé par Thorne et al [21] pour mettre en évidence la similitude avec l'équation de transport de soluté

$$\left(1 + \frac{\rho_b K_d^\Theta}{\theta}\right) \frac{\partial(\theta\Theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q}\Theta) - \nabla \cdot \left( (\theta D_m^\Theta + \mathbf{a} \cdot \mathbf{q}) \nabla \Theta \right) = q_s \Theta_s \quad \text{dans } \Omega \times (0, T],$$

où  $K_d^\Theta$  est le coefficient de distribution de la température et  $D_m^\Theta$  la diffusivité thermique.

Notre but est de calculer la charge hydraulique  $h$ , la concentration  $C$  et la température  $\Theta$ . Pour la discrétisation, nous présentons une méthode semi-implicite en temps basée sur la méthode de volumes finis SUSHI. Nous nous référons à [2] pour l'étude d'un problème voisin.

Le code SEAWAT est un logiciel pour la simulation du transport d'un soluté multi-espèces et du transport de chaleur [18]. Il combine les logiciels MODFLOW pour le calcul de l'écoulement et MT3DMS pour la résolution numérique des équations de transport de soluté. Le couplage entre l'écoulement et le transport est effectué à l'aide de résolution successives de l'équation pour l'écoulement par MODFLOW et de l'équation de transport par MT3DMS. Les deux logiciels MODFLOW et MT3DMS s'appuient sur une méthode de différences finies et la solution est donnée par les valeurs moyennes assignées au centre de chaque maille. Le logiciel SEAWAT utilise également cette structure.

Nous proposons un code unique qui utilise la méthode de volumes finis généralisée fini SUSHI. Les éléments de volume, en dimension d'espace deux ou trois, peuvent être très généraux et la structure du programme est beaucoup plus simple puisqu'elle s'appuie sur un code unique au lieu de deux codes couplés. Nous montrons les résultats de premiers tests numériques en fin de chapitre. Nos calculs portent sur un modèle proposé dans la documentation de SEAWAT. Le domaine spatial est donné par une section transversale bi-dimensionnelle d'un aquifère captif côtier initialement saturé d'eau de mer relativement froide à la température de  $5^\circ C$ . De l'eau douce plus chaude à la température de  $25^\circ C$  est injectée dans l'aquifère côtier le long de la frontière de gauche pour représenter le flux d'eau provenant de l'intérieur des terres. L'eau douce chaude s'écoule vers la droite jusqu'à atteindre la frontière avec l'océan. La frontière de l'océan est soumise à des conditions hydrostatiques basées sur la densité de fluide calculée à partir de la salinité de l'eau de mer à  $5^\circ C$ . Des conditions de flux nul sont assignées aux limites supérieure et inférieure du domaine. Ce problème est une représentation simplifiée de ce qui pourrait se produire dans une plate-forme côtière de carbonate. Nos résultats sont très proches de ceux de SEAWAT.

# Bibliographie

- [1] Ophélie Angelini, Konstantin Brenner, Danielle Hilhorst. *A finite volume method on general meshes for a degenerate parabolic convection-reaction-diffusion equation*, Numerische Mathematik 123.2, 219-257, 2013.
- [2] Ulf Bayer, Volker Clausnitzer, Jürgen Fuhrmann. *Unsteady thermal convection in the North-East German basin*, preprint.
- [3] Jacques W. Delleur. *The Handbook of Groundwater Engineering*, CRC Press, 2006.
- [4] J. Droniou, R. Eymard, T. Gallouët, R. Herbin, *Gradient schemes : a generic framework for the discretisation of linear nonlinear and nonlocal elliptic and parabolic equations*, Math. Models Methods Appl. Sci. M3AS, 23.13, 2395-2432, 2013.
- [5] Hans-Jörg G. Diersch, Olaf Kolditz. *Variable-density flow and transport in porous media : approaches and challenges*, Advances in Water Resources 25, 899-944, 2002.
- [6] M. Dentz, D.M. Tartakovsky, E. Abarca, A. Guadagnini, X. Sanchez-Vila, J. Carrera. *Variable-density flow in porous media*, J. Fluid Mech. 561, 209-235, 2006.
- [7] Robert Eymard, Thierry Gallouët, Raphaële Herbin. *Discretization of heterogeneous and anisotropic diffusion problems on general nonconforming meshes SUSHI : a scheme using stabilization and hybrid interfaces*, IMA J. Numer. Anal. 30.4, 1009-1043, 2010.
- [8] Robert Eymard, Thierry Gallouët, Raphaële Herbin. *Finite Volume Methods, Handbook of Numerical Analysis*, volume 7, P. G. Ciarlet and J.L.Lions eds, Elsevier Science B.V., 2000.
- [9] R. Eymard, M. Gutnic, and D. Hilhorst. *The finite volume method for Richards equation*, Comput. Geosci. 3.3-4, 259-294, 2000.
- [10] Robert Eymard, Thierry Gallouët, Raphaële Herbin, Michaël Gutnic, Danielle Hilhorst. *Approximation by the finite volume method of an elliptic-parabolic equation arising in environmental studies*, Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, Vol. 11, No. 9, 1505-1528, 2001.
- [11] Robert Eymard, Thierry Gallouët, Raphaële Herbin, Anthony Michel. *Convergence of a finite volume scheme for nonlinear degenerate parabolic equation*, Numer. Math. 92, 41-82, 2002.
- [12] Robert Eymard, Thierry Gallouët, Danielle Hilhorst, Sabrina Naït Slimane. *Finite volumes and non linear diffusion equations*, RAIRO Modél. Math. Anal. Numér. 32, 747-761, 1998.
- [13] Ekkehard O. Holzbecher. *Modeling Density-Driven Flow in Porous Media*, Springer, 1998.
- [14] J.D. Hughes, W.E.Sanford, *SUTRA-MS a version of SUTRA modified to simulate heat and multiple solute transport* US Geological Survey Open-File Report 2004-1207, 141p, 2004.

- [15] Danielle Hilhorst, Huy Cuong Vu Do, Yushan Wang. *A finite volume method for density driven flows in porous media*, ESAIM : Proc. Volume 38, 376-386, 2012.
- [16] Klaus Johannesen, Wolfgang Kinzelbach, Sascha Oswald, Gabriel Wittum. *The saltpool benchmark problem-Numerical simulation of saltwater upconing in a porous medium*, Advances in Water Resources, 25.3, 335-348, 2002.
- [17] Olaf Kolditz, Rainer Ratke, Hans-Jörg G. Diersch, Werner Zielke. *Coupled groundwater flow and transport : 1. Verification of variable density flow and transport models*, Advances in Water Resources 21, 27-46, 1998.
- [18] Chiristian D. Langevin, Daniel T.Thorne, Jr, Alyssa M. Dausman, Michael C. Sukop, Weiwing Guo. *SEAWAT Version 4 : A Computer Program for Simulation of Multi-Species Solute and Heat Transport* Techiques and Methods Book 6, Chapter A22.
- [19] T.J. Povich, C.N. Dawson, M.W.Farthing, C.E. Kees. *Finite element methods for variable density flow and solute transport*, Comput Geosci, 17, 529-549, 2013.
- [20] Peter Knabner, Christoph Tapp, Kathrin Thiele. *Adaptive Finite Volume Discretization of Density Driven Flows in Porous Media*, Acta Math. Univ. Comenian. (N.S.) 67, 115-136, 1998.
- [21] D.T. Thorne, Jr., C.D. Langevin, M.C. Sukop, *A addition of simultaneous heat and solute transport and variable fluid viscosity to SEAWAT*, Computer and Geosciences, v.32, 1758-1768.
- [22] C.I. Voss, *A finite-element simulation model for saturated-unsaturated, fluid-density-dependdnt ground-water flow with energy transport or chemically-reactive single-species solute transport* U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 84-4369, 409p.