



HAL
open science

Développement d'un modèle numérique pour l'écoulement triphasique de fluides incompressibles

Lauriane Schneider

► **To cite this version:**

Lauriane Schneider. Développement d'un modèle numérique pour l'écoulement triphasique de fluides incompressibles. Sciences de la Terre. Université de Strasbourg, 2015. Français. NNT : 2015STRAH002 . tel-01222156

HAL Id: tel-01222156

<https://theses.hal.science/tel-01222156>

Submitted on 29 Oct 2015

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.

Développement d'un modèle numérique pour l'écoulement triphase de fluides incompressibles

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 18 février 2015

pour l'obtention du

Doctorat de l'université de Strasbourg

Discipline : Sciences de la Terre et de l'Environnement

par

Lauriane Schneider

Rapporteurs : M. Brahim AMAZIANE *Maître de Conférences,*
Université de Pau et des Pays de l'Adour
M. Michel QUINTARD, *Directeur de Recherche CNRS,*
Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT)

Examineurs : M. Philippe ACKERER, *Directeur de Recherche CNRS,*
Laboratoire d'Hydrologie
et de Géochimie de Strasbourg (LHyGeS)
Mme Danielle HILHORST, *Directrice de Recherche CNRS*
Département de Mathématiques
Université Paris-Sud

Directeurs de Thèse : M. Gerhard SCHÄFER, *Professeur des Universités,*
Université de Strasbourg
M. Philippe HELLUY, *Professeur des Universités,*
Université de Strasbourg

Laboratoire Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg — UMR 7517



Mis en page avec la classe thloria.

Résumé

La modélisation des hydrosystèmes souterrains est devenue un outil crucial dans la gestion des ressources d'eaux souterraines ainsi que pour la surveillance des sites contaminés. L'objectif de ce travail de thèse est de modéliser l'écoulement d'une phase non-aqueuse liquide dense (DNAPL) dans les sols, et de développer un code pour la simulation des écoulements triphasiques de fluides incompressibles en milieux poreux.

Le modèle mathématique pour les écoulements multiphasiques de fluides en milieux poreux est généralement constitué d'une équation de pression et de deux équations de saturation. Notre approche est fondée sur une formulation en pression globale : elle permet un découplage partiel des équations de pression et de saturations, et elle est plus efficace en termes de résolution numérique. Le nouveau modèle est discrétisé selon un schéma Implicite en Pression-Explicite en Saturation.

Dans ce travail de thèse, la méthode des Eléments Finis Discontinus de Galerkin est combinée à un schéma de Godunov généralisé pour la résolution de la partie convective de l'équation de saturation. Un écoulement diphasique non miscible avec effets gravitaires importants et sans capillarité a été simulé. Une analyse fonctionnelle démontre que le profil de saturation de la phase non-aqueuse entrante dépend essentiellement du rapport de la vitesse totale sur la différence de densité entre la phase non aqueuse et l'eau. Un écoulement 2D dans un milieu hétérogène a également été simulé avec ce code. Lorsque les effets capillaires sont pris en compte, l'équation de saturation est également composée d'une partie diffusive, résolue dans cette étude par une Méthode des Eléments Finis Mixtes Hybrides. Le code développé a permis de simuler un drainage gravitaire à grande échelle.

Enfin, un modèle numérique non-linéaire d'écoulement triphasique de fluides utilisant la Méthode des Lignes est introduit. Les causes d'oscillations instables du système en zone elliptique sont examinées. Des méthodes de relaxation et la construction d'un modèle de perméabilités relatives vérifiant la condition de Différentielle Totale sont envisagées.

Mots-clés: écoulement multiphasique, pression globale, condition de différentielle totale

Abstract

Numerical simulation has become a crucial tool in addressing water-resource management and other environmental problems such as polluted sites monitoring. The aim of this work is to model the flow of a dense non aqueous phase liquid (DNAPL) in the subsurface by developing a numerical code to simulate three-phase (DNAPL, water, and gas), incompressible flow in porous media.

The mathematical model for multiphase flow in porous media is generally composed of a system of one pressure and two saturation equations. Our approach is based on a global pressure model : it leads to a partial decoupling of the pressure and the saturation equation and is more efficient from the computational point of view. The new model is discretized by a Mixed Hybrid Finite Elements Method (MHFEM), Discontinuous Galerkin Finite Elements (DGFEM), Implicit Pressure-Explicit Saturation (IMPES) resolution method.

In this work, the DGFEM scheme is combined with a generalised Godunov scheme to solve the convective part of the saturation equation. An immiscible two-phase flow with predominant gravity effects and without capillary effects has been modelled. It has been shown that the saturation profile of a displacing non-aqueous phase liquid (NAPL) in an initially water-saturated porous medium depends strongly on the ratio between the total specific discharge and the density difference between the NAPL and water. We also apply the developed scheme to a 2D heterogeneous porous medium.

In presence of capillary effects, the saturation equation also contains a diffusive part, solved in this work by a Mixed-Hybrid Finite Element Method (MHFEM). The 2D-code enabled a simulation of a large-scale gravity drainage.

Finally, a non-linear three-phase 1D flow formulation using Method of Lines (MOL) has been introduced. Unstable oscillatory behavior of the system when the initial state are in the elliptic region of the ternary diagram is examined. Non-equilibrium formulation and construction of relative permeability model satisfying the Total-Differential are foreseen.

Keywords: multiphase flow, global pressure, total differential condition.

Avant Propos

Ces travaux de thèse ont été effectués au Laboratoire d'Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg (LHyGeS), en collaboration avec l'Institut de Recherche en Mathématiques Avancées de Strasbourg (IRMA).

Mes premiers remerciements vont spontanément à mes directeurs et encadrants de thèse pour m'avoir guidée et encouragée tout au long de cette belle aventure. A Philippe Helluy, Professeur à l'IRMA, merci pour tes conseils avisés et pour m'avoir encouragée dans cette voie. A Gerhard Schäfer, Professeur au LHyGeS, un grand merci pour ta gentillesse et tes précieux conseils. A Raphaël, Maître de conférence au LHyGeS, un immense merci pour avoir partagé avec moi tes bonnes idées et ton enthousiasme, qui ont contribué à faire "mûrir" cette thèse.

J'adresse ensuite mes remerciements aux membres du jury pour avoir accepté de juger mon travail, et d'y avoir apporté leurs pertinentes suggestions. Merci à monsieur Benoit Noetinger de l'Institut Français du pétrole et des Energies Nouvelles d'avoir accepté mon invitation à participer à mon jury de thèse.

∫

*Comme un vol de gerfauts hors du charnier natal
Fatigués de porter leurs misères hautaines
De Palos de Moguer, routiers et capitaines
Partaient, ivres d'un rêve héroïque et brutal.*

*Ils allaient conquérir le fabuleux métal
Que Cipango mûrit dans ses mines lointaines
Et les vents alizés inclinaient leurs antennes
Aux bords mystérieux du monde occidental*

*Chaque soir, espérant des lendemains épiques,
L'azur phosphorescent de la mer des Tropiques
Enchantait leur sommeil d'un mirage doré*

*Ou penchés à l'avant des blanches caravelles,
Ils regardaient monter en un ciel ignoré
Du fond de l'océan des étoiles nouvelles*

Les conquérants, José-Maria de Heredia

Ma reconnaissance va ensuite au personnel du Laboratoire d'Hydrologie et de G ochimie de Strasbourg pour m'avoir accueillie et contribu  au bon d roulement de cette th se. J'adresse mes remerciements aux directeurs du laboratoire qui se sont succ d s au cours de mon poste au laboratoire, Monsieur Philippe Ackerer et Monsieur Fran ois Chabaux pour leur accueil. Merci   Marwan Fahs, J r me Carrayrou et Fran ois Lehmann pour leurs conseils, merci   Fr d ric Delay, Anis Younes et Bertrand Fritz pour leur regard critique au cours de ce travail.

f

Je pense tout particuli rement   mes coll gues et amis que j'ai rencontr s au LHyGeS, un grand merci   Tiphaine, Solenn, Sana et Jo lle. Merci   vous, Fanilo et Simon, de m'avoir chaleureusement accueillie, dans notre bureau. Merci aussi   tous les doctorants et post-doctorants C line, Nicolas, Noura, Elodie, Marie, Izabella, Salsabil, Amor, Nejib, Bastien, Arnaud, Harold, Yvan, Julien, V ronique, Adrien, Omnia, Morgane. Je n'oublierai jamais les bon moments pass s avec vous autour d'un repas, ou des nombreuses pauses caf s.

f

A tous mes amis qui m'ont soutenue pendant ces ann es de th se, merci pour votre pr sence, Anne-sophie, Bruno, Nathalie, Floriane, Fran ois, Florian et Audrey, Elodie K., Aline, Ricardo, Chlo , Annick et Luc-Henry, Jean-Pierre et C cile, Soumette, Claire, Florian, St phane M., Amaury, Vincent, Leila, Olivier, Virginie, Sandra, Alex Thai Thai, Anna et Daniel, Titi, Nicho, Eric, Stephane, Olga, Laurence, Nioucha, Rapha lle, M l, ma ch re Margot, Ania, M lanie, Pierre-Jo et Aurore ainsi que la famille Krebs. Une pens e pour mes amis d'Orsay Micha l, Tony et Nina et pour Odile F.

f

"Tout le monde veut vivre au sommet de la montagne, sans soup onner que le vrai
bonheur est dans la mani re de gravir la pente"

Gabriel Garc a M rquez

J'adresse toute ma reconnaissance à mes parents et à ma famille pour m'avoir encouragée dans mes choix toutes ces années. Merci à mon père qui a partagé et partage encore avec moi ses découvertes. A ma mère qui m'a transmis sa patience et sa rigueur. A Aurélie merci tout simplement pour ta présence. Un grand merci aussi à mon parrain Vincent et ma marraine Solange, à Fernande et Estelle, Christian, Arnaud, Pauline, Germaine, Gilles et Amandine, Vincent et Laure.

∫

Je pense également à la famille de Manuel, qui a été d'un grand soutien. Une pensée émue pour Sonia, Romain, Anna, Geneviève, Raphaël, Philippe, et Claire.

Et je n'oublierai jamais le soutien quotidien de mon cher Manuel.

∫

*Que serais-je sans toi qui vins à ma rencontre
Que serais-je sans toi qu'un coeur au bois dormant
Que cette heure arrêtée au cadran de la montre
Que serais-je sans toi que ce balbutiement.*

*J'ai tout appris de toi sur les choses humaines
Et j'ai vu désormais le monde à ta façon
J'ai tout appris de toi comme on boit aux fontaines
Comme on lit dans le ciel les étoiles lointaines
Comme au passant qui chante on reprend sa chanson
J'ai tout appris de toi jusqu'au sens du frisson.*

*J'ai tout appris de toi pour ce qui me concerne
Qu'il fait jour à midi, qu'un ciel peut être bleu
Que le bonheur n'est pas un quinquet de taverne
Tu m'as pris par la main dans cet enfer moderne
Où l'homme ne sait plus ce que c'est qu'être deux
Tu m'as pris par la main comme un amant heureux.*

*Qui parle de bonheur a souvent les yeux tristes
N'est-ce pas un sanglot que la déconvenue
Une corde brisée aux doigts du guitariste
Et pourtant je vous dis que le bonheur existe
Ailleurs que dans le rêve, ailleurs que dans les nues.
Terre, terre, voici ses rades inconnues.*

*Que serais-je sans toi qui vins à ma rencontre
Que serais-je sans toi qu'un coeur au bois dormant
Que cette heure arrêtée au cadran de la montre
Que serais-je sans toi que ce balbutiement.*

Que serais-je sans toi, Louis Aragon

*Je dédie cette thèse à mes chers parents,
à Manuel
et à Solange.*

Table des matières

Introduction générale	1
------------------------------	----------

Chapitre 1

Modélisation des écoulements multiphasiques dans les hydrosystèmes souterrains

1.1	Caractérisation des hydrosystèmes souterrains	6
1.1.1	Phases	6
1.1.2	Les sols et leur architecture	6
1.1.3	Les fluides dans le sol	8
1.1.4	Dynamique des fluides	9
1.2	Formalismes mathématiques pour la caractérisation des écoulements en milieux poreux	13
1.2.1	Porosité	13
1.2.2	Saturation	14
1.2.3	Pression capillaire	15
1.2.4	Perméabilités	16
1.2.5	Flux fractionnaires	18
1.3	Modélisation des écoulements multiphasiques dans les hydrosystèmes souterrains	19
1.3.1	Equation de conservation de la masse	19
1.3.2	Loi de Darcy	20
1.3.3	Variables primaires et secondaires	21
1.4	Quelques formulations classiques pour les écoulements multiphasiques	23
1.4.1	Formulation pression-pression	23
1.4.2	Formulation pression mouillante - saturation non mouillante	23
1.4.3	Formulation en pression globale pour les écoulements multiphasiques	24
1.4.4	Formulation variationnelle des équation de saturation	27
1.4.5	Equations d'écoulement diphasique en formulation pression globale	27

Chapitre 2 Analyse numérique relative aux écoulements multiphasiques de fluides incompressibles
--

2.1	Conditions aux limites	31
2.2	Existence de solution pour l'écoulement diphasique incompressible dégénéré . . .	32
2.2.1	Formulation en flux fractionnaire pour un système diphasique	33
2.2.2	Formulation variationnelle	35
2.3	Schéma numérique de résolution des équations d'écoulement triphasiques incompressibles	37
2.3.1	Linéarisation du système	37
2.3.2	Schéma numérique	38
2.4	Discrétisation de l'équation de pression globale par la méthode des EFMH	40
2.4.1	Espace de Raviart-Thomas	40
2.4.2	Formulation variationnelle de l'équation de pression	41
2.4.3	Discrétisation du flux associé à la pression globale	42
2.4.4	Discrétisation du terme de gravité dans l'équation de pression globale . .	43
2.4.5	Discrétisation de la pression globale	44
2.4.6	Evaluation de la pression aux frontières et hybridisation	45
2.5	Discrétisation de l'équation de saturation	48
2.5.1	Traitement du terme gravitaire dans l'équation de saturation	48
2.5.2	Discrétisation de la partie diffusive des équations de saturation	48
2.5.3	Evaluation des flux fractionnaires et de la pression capillaire en fonction des traces de saturation	49
2.5.4	Discrétisation du flux diffusif	50
2.5.5	Discrétisation de l'équation de continuité	51
2.5.6	Evaluation de la saturation aux frontières et hybridisation	52
2.6	Discrétisation du terme convectif de l'équation de saturation	52
2.6.1	Evaluation des intégrales de volume	54
2.6.2	Evaluation de l'intégrale de contour liée au flux total	55
2.6.3	Evaluation de l'intégrale de contour liée au terme de gravité	55
2.6.4	Alternative dynamique au calcul de S^*	56

Chapitre 3 Écoulements dominés par le terme de convection
--

3.1	Introduction aux systèmes hyperboliques	59
3.1.1	Définitions, solutions faibles	59

3.1.2	Conditions de Rankine-Hugoniot	60
3.1.3	La méthode des caractéristiques	61
3.1.4	Exemple de l'équation de Burgers :	62
3.1.5	Introduction à la notion d'entropie.	63
3.1.6	Solutions entropiques	64
3.2	Problème de Buckley-Leverett avec effets gravitaires	65
3.2.1	Définition	65
3.3	Etude de cas d'un écoulement unidirectionnel diphasique en milieux poreux saturé	67
3.4	Governing equations	71
3.4.1	Global Pressure formulation	71
3.4.2	Gravity-driven flow	74
3.4.3	Solution of the Buckley-Leverett equation	75
3.4.4	One-dimensional flow	76
3.4.5	Entry saturations	80
3.5	Numerical modelling approach	80
3.5.1	Description of the numerical scheme	80
3.5.2	Evaluation of the saturation	82
3.5.3	CFL condition	84
3.6	One-dimensional flow in a homogeneous porous medium	85
3.6.1	Properties of the fluid and porous medium	85
3.6.2	Results and discussion	87
3.6.3	Mass conservation and error analysis	90
3.7	2D flow in a heterogeneous porous medium	92
3.7.1	Spatial moment analysis	92
3.7.2	Results and discussion	93

Chapitre 4

Déplacement de fluides non miscibles induit par la diffusion

4.1	Le problème de Mc Worther Sunada	104
4.1.1	Evaluation du terme diffusif en fonction des traces de saturation	104
4.1.2	Écoulement diphasique à contre-courant : effet du contraste de viscosité	107
4.2	Etude d'un drainage gravitaire à grande échelle : test des opérateurs de diffusion et de convection	109
4.2.1	Cas d'étude	109
4.2.2	Simulation numérique du cas de drainage 2D	114
4.2.3	Comparaisons des profils de saturations obtenus avec ceux du logiciel SIMUS- COPP	119

4.2.4 Formulation en pression du gaz 122

Chapitre 5 Analyse des instabilités relatives aux écoulements triphasiques hyperboliques

5.1	Analyse des zones elliptiques	125
5.1.1	Problème de Riemann	125
5.1.2	Construction des modèles de perméabilités relatives triphasiques	127
5.1.3	Quelques exemples de zones elliptiques pour le modèle de Stone I	128
5.2	Cas numérique d'écoulement triphasique (P_3, S_1, S_3)	129
5.3	Modèle d'écoulement avec non-équilibre local.	131
5.3.1	Modèle de relaxation	131
5.3.2	Quelques simulations numériques	132
5.4	Pistes de réflexion	135

Conclusion générale **137**

Table des figures **139**

Bibliographie **143**

Annexe A Propriétés de la Formulation en Pression Globale
--

A.1	<u>Formulation flux fractionnaire</u>	149
A.2	<u>Formulation Pression Globale en écoulement diphasique</u>	151

Annexe B Discrétisation pour les éléments finis discontinus
--

Annexe C Le problème de Mc Whorther Sunada

Introduction générale

La préservation des réserves d'eau potable est un enjeu contemporain majeur. Les contaminations d'origine anthropique des réservoirs d'eaux souterrains sont essentiellement dues aux nitrates, pesticides ou micropolluants organiques comme les hydrocarbures ([Blum, 2004]). Les hydrocarbures et dérivés d'hydrocarbures tels que le trichloréthylène (TCE) et le perchloréthylène (PCE) sont hautement toxiques et faiblement solubles dans l'eau. En outre, des traces de contamination peuvent subsister plusieurs dizaines d'années. En France, le Ministère de l'Ecologie, du Développement durable et de l'Energie a engagé un inventaire (Base de données sur les sites et sols pollués BASOL) ainsi qu'une gestion des sites et sols pollués en partenariat avec l'Agence De l'Environnement et de la Maîtrise de l'Energie (ADEME). Dans ce contexte, la modélisation des hydrosystèmes souterrains est devenue un outil crucial pour la surveillance et le traitement des sols et aquifères pollués, particulièrement dans les zones où les études in situ sont difficiles, puisqu'elle permet d'obtenir de bonnes estimations de l'extension des zones de contamination (Rapport MACAOH de l'ADEME [Côme et al., 2008]).

Ce travail de thèse en Hydrologie et Mathématiques appliquées s'inscrit dans la suite des travaux de R. di Chiara R. [di Chiara R., 2009] pour l'élaboration d'un code de calcul multiphasique multiconstituants performant, prenant en compte les transferts de masse entre phases (volatilisation, dissolution, sorption), des mécanismes de dégradation (biodégradation de la phase dissoute), dans le cadre du programme *R&D* "code complet" cofinancé par l'ADEME et dont les partenaires sont le bureau d'études BURGEAP, le Laboratoire d'Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg ainsi que l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse.

Le sujet de mes recherches concerne plus particulièrement le phénomène d'écoulement des phases eau, air et polluant non miscible dans les sols. Ce mémoire est constitué de cinq chapitres et s'articule autour de trois problématiques rencontrées au cours du projet "code complet" :

- La question des effets gravitaires dominants relatifs aux écoulements diphasiques incompressibles.
- La simulation d'un drainage (écoulements diphasiques) sur un bassin d'expérimentation, et une comparaison avec un modèle pétrolier déjà existant. Jusqu'alors, les simulations de drainage avec le code "MPTRACES" ne concordaient pas avec les observations.
- La question de l'influence du choix du modèle de perméabilités triphasiques sur la stabilité numérique du système d'équations.

Ce mémoire détaille les analyses mathématiques ainsi que les algorithmes réalisés pour le modèle numérique d'écoulements triphasiques incompressibles en milieux poreux utilisant la for-

mulation en pression globale. Après une présentation des différents modèles existants et des équations constitutives, les outils analytiques (systèmes hyperboliques, interpolation triphasique) et numériques (schéma IMPES, éléments finis mixtes hybrides, éléments finis discontinus) sont introduits.

Le premier chapitre présente le contexte de l'étude, les variables primaires et secondaires, ainsi que les modèles de perméabilités relatives dont sont issues les variables secondaires ([Helmig, 1997]). On expose ensuite les différentes formulations d'équations possibles pour les écoulements multiphasiques. En effet, le choix des variables primaires dans le modèle mathématique d'écoulement triphasique de fluides est déterminant pour l'efficacité de la méthode. A partir de formulations classiques pression / saturation, pression / pression ([Durlinsky, 1993]), une reformulation de l'écoulement en pression globale / saturation est proposée ([Chavent and Jaffré, 1986] et [Amaziane et al., 2010]). Ce choix permet un découplage partiel des équations de pression globale et de saturation, avec un gain en temps de calcul. Mais cette approche requiert une étape préalable de traitement des données initiales par interpolation des variables secondaires diphasiques pour l'obtention des variables secondaires triphasiques compatibles ([di Chiara R. et al., 2010]), sur lesquelles il n'existe généralement pas d'information.

Le second chapitre de ce mémoire est consacré au modèle numérique utilisé pour la simulation des écoulements de fluides. Une brève revue des questions d'existence et d'unicité des solutions aux équations d'écoulement en milieux poreux ([Chavent and Jaffré, 1986]) est donnée. Le schéma Implicite en Pression Explicite en Saturation est d'abord présenté. La discrétisation de l'équation de pression globale par la méthode des Eléments Finis Mixtes Hybrides ([Huber and Helmig, 1999]) est ensuite détaillée. Les équations de saturation (terme de transport) sont constituées d'une partie diffusives ainsi que d'une partie convective. La discrétisation de la partie diffusives est également obtenue par la méthode des Eléments Finis Mixtes Hybrides. La partie convective est traitée à l'aide d'un schéma d'Eléments Finis Discontinus de Galerkin. Le terme de transport est traité après discrétisation par décomposition d'opérateur. La discrétisation du terme convectif à l'aide des éléments finis discontinus est tout particulièrement détaillée. Et enfin plusieurs formulations pour le terme diffusif sont proposées.

Le troisième chapitre de ce mémoire répond à la première problématique, qui est celle des effets gravitaires dominants en écoulement diphasique de fluides incompressibles sans effets capillaires. Les équations de saturation sont une généralisation du problème de Buckley-Leverett. On commence par démontrer à l'aide d'outils d'analyse fonctionnelle que la forme de l'écoulement unidirectionnel diphasique incompressible eau-huile dépend essentiellement d'un nombre gravitaire matérialisé par le rapport entre les différences de masse volumique huile-eau sur le rapport des viscosités. On démontre que ce nombre adimensionnel conditionne les formes du profil de saturation, ainsi que les valeurs de saturation en entrée. Dans une seconde partie, l'étude est étendue à un écoulement en dimension deux, dans un milieu poreux hétérogène. Les profils de saturation présentent des similitudes avec le cas 1D.

Le quatrième chapitre de la thèse est consacré à la simulation d'un drainage sur un modèle du bassin d'expérimentation SCERES (projet ADEME de R&D MACAOH et le projet ANR

FLUXOBAT). Lors d'un essai de drainage (eau-air) du milieu poreux initialement saturé en eau effectué par un rabattement abrupt du toit de la nappe, l'écoulement de l'eau et de l'air est suffisamment lent pour que l'on puisse supposer les deux phases fluides incompressibles. Tout d'abord, on teste l'implémentation du terme diffusif (effets capillaires) dans l'écoulement diphasique avec gravité proposée dans le chapitre deux. Ce modèle est ensuite confronté avec les solutions semi-analytiques du problème de Mc Worther Sunada. Le code est validé dans différents cas de figure. Dans un dernier temps, nous avons réalisé une simulation d'un drainage avec effets gravitaires et prise en compte de la capillarité dans le bassin d'expérimentation SCERES, et nous comparons les résultats obtenus avec les courbes issues des simulations réalisées avec le logiciel SIMUSCOPP.

Le cinquième chapitre de ce mémoire est une ouverture vers la dernière problématique, qui est celle des instabilités du modèle numérique. On se basera sur un modèle d'interpolation de données triphasiques (Stone 1, Stone 2), et nous travaillerons avec un code numérique d'écoulement basé sur des Volumes Finis et une méthode des lignes (MOL) issu du projet CubicM. Dans un premier temps, les causes d'instabilités dans le modèle triphasique sont analysées. Puis, on étudie les effets du critère de convergence sur la propagation d'instabilités dans le cas d'un écoulement triphasique sans capillarité ni gravité. Une piste de recherche prévoit d'élaborer un modèle de perméabilités triphasique synthétique issu des flux fractionnaires respectant la condition de différentielle totale, et conforme aux mesures expérimentales. Des travaux ultérieurs pourraient être menés sur les effets gravitaires en système triphasique. Il existe à ce jour peu de publications sur le sujet.

Modélisation des écoulements multiphasiques dans les hydrosystèmes souterrains

Les hydrosystèmes souterrains, composés du sol, ainsi que de l'air, de l'eau et des polluants inclus dans ce sol sont le résultat de processus multiples et complexes entre ses éléments. Ainsi, les écoulements, le transport, les réactions chimiques sont des réactions de premier plan régissant l'évolution des hydrosystèmes (la figure 1.2 illustre quelques unes des interactions existantes). Bien que celle-ci soit cruciale, nous ne prendrons pas en compte dans cette thèse l'influence des micro-organismes sur la nature et l'évolution des sols. L'étude du phénomène d'écoulement des phases eau, air et polluant (NAPL) permet d'estimer l'étendue d'une contamination dans les différentes couches d'un sol (zone saturée ou non saturée), et notamment de déterminer si elle est susceptible d'entrer en contact avec un aquifère ou des habitations (figure 1.1). La densité des fluides en présence joue notamment un rôle important dans l'écoulement.

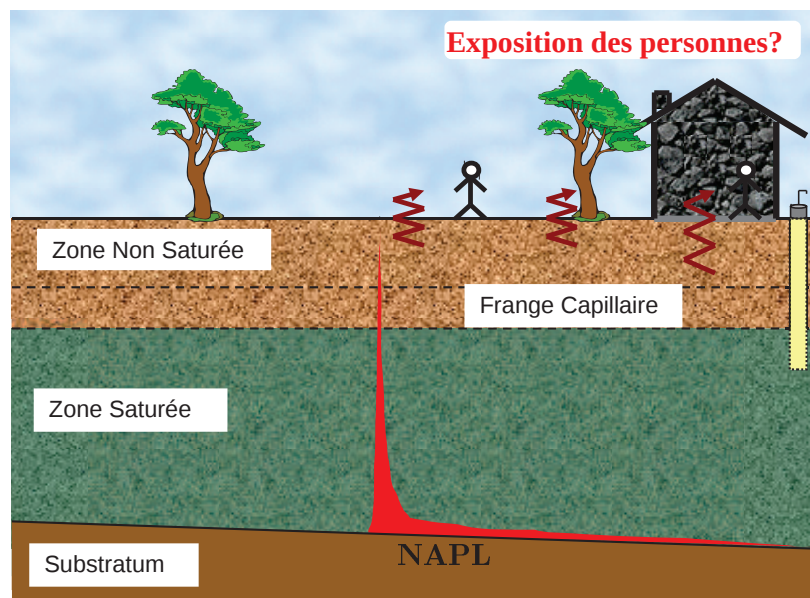


FIGURE 1.1 – Schéma de la migration d'un polluant dans les différents niveaux du sol.

On définit dans ce premier chapitre les notions de phase, de sol, d'espace poral, ainsi que les principales propriétés permettant la caractérisation d'un sol pour l'étude. On introduit ensuite les formalismes mathématiques utilisés pour rendre compte de l'évolution des constituants de ces hydrosystèmes à l'échelle de l'aquifère, puis dans une troisième partie, on pose les équations aux dérivées partielles (EDP) pour une modélisation des écoulements en milieux poreux saturé.

1.1 Caractérisation des hydrosystèmes souterrains

1.1.1 Phases

Une phase est définie par Bear et Bachmat [Bear, 1972] comme une partie chimiquement homogène du système considéré, séparé des autres parties par une frontière physique bien définie. Une phase peut comprendre plusieurs constituants et espèces chimiques. Trois phases cohabitent principalement dans les systèmes étudiés : une phase aqueuse, souvent l'eau d'un aquifère, une phase gazeuse, généralement de l'air, et une phase liquide non aqueuse, le polluant, appelée Non-Aquous Phase Liquid (NAPL), peu soluble dans l'eau. La nature et le comportement de cette dernière est cruciale pour le suivi de la contamination des hydrosystèmes souterrains, puisque cette appellation regroupe de nombreux contaminants (hydrocarbures, mercure, etc...). On distingue ainsi deux types de NAPL : le type "Light Non-Aquous Phase Liquid" (LNAPL), composés moins denses que l'eau, et le type "Dense Non-Aquous Phase Liquid" (DNAPL), composés dont la densité est supérieure à celle de l'eau. Le second chapitre fait d'ailleurs l'objet d'une analyse approfondie des effets de la densité de la phase NAPL sur l'écoulement. On retrouve la problématique des écoulements triphasiques en ingénierie des réservoirs, lorsque les basses pressions dans les réservoirs pétrolières engendrent une transformation d'une partie de la phase hydrocarbure liquide sous forme gazeuse. On supposera enfin que les phases ne sont pas miscibles entre elles. On se trouve alors en présence d'eau, d'huile sous forme liquide et d'huile sous forme gazeuse ("black-oil reservoir").

1.1.2 Les sols et leur architecture

Les sols, au sein desquels évoluent les phases fluides, forment un environnement dynamique à part entière, en interaction avec ces phases. Quelques-uns de ces phénomènes sont illustrés dans la figure 1.2. La complexité de la structure des sols contraint les scientifiques à proposer des représentations plus ou moins fidèles à la réalité : ainsi les sols sont-ils considérés comme des milieux poreux. Par définition, les *milieux poreux* sont constitués d'une matrice solide et d'interstices nommés pores, communiquant éventuellement entre eux, et formant un espace poral dans lesquels peuvent s'écouler les phases fluides (figure 1.3). Les roches, les argiles, les sables sont des milieux poreux, mais également certains matériaux industriels comme le béton, la fibre de verre, etc...

L'interaction fluide-sol à l'échelle microscopique fait l'objet de nombreux travaux actuels (on trouvera un exemple de modélisation d'un réseau de pores dans [Nsir et al., 2011] ou dans [Raouf et al., 2012]), car les sols sont des milieux poreux très complexes. Les modèles dynamiques constituent également une autre approche ([Joekar-Niasar et al., 2010]). Les milieux fracturés ou karstiques font souvent l'objet de modélisations spécifiques. Mais dans le contexte du suivi des pollutions dans les sous-sols à large échelle, de l'ordre de plusieurs mètres cubes de volume, en

Migration dans le milieu souterrain des composés organo-chlorés aliphatiques

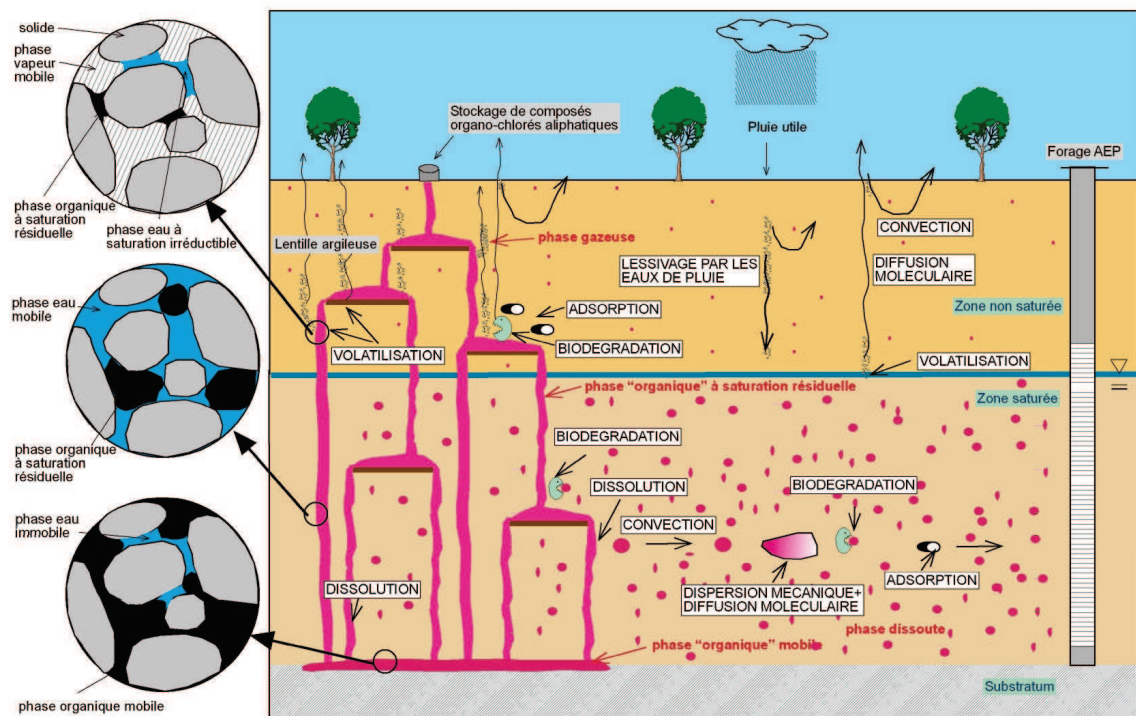


FIGURE 1.2 – Mécanismes en jeu dans le devenir d'une pollution de type organo-chlorés aliphatiques dans le milieu souterrain [Côme et al., 2008]

négligeant les effets thermiques (fluides chauds), l'échelle d'évolution temporelle de la matière solide étant plus grande que les phénomènes observés, la matrice solide du milieu poreux est supposée invariable.

Proposition 1. Notre modèle d'espace poral doit remplir trois conditions [Helmig, 1997] :

1. L'espace poral doit être connexe, c'est-à-dire que chaque point de l'espace poral peut être relié à un autre par une ligne continue (milieu continu).
2. Les dimensions du volume des vides doivent être grandes comparées aux dimensions des molécules de fluide.
3. Les dimensions du volume des vides doivent être suffisamment petites pour que le fluide soit soumis uniquement aux forces adhésives à l'interface fluide-solide et aux forces cohésives à l'interface fluide-fluide.

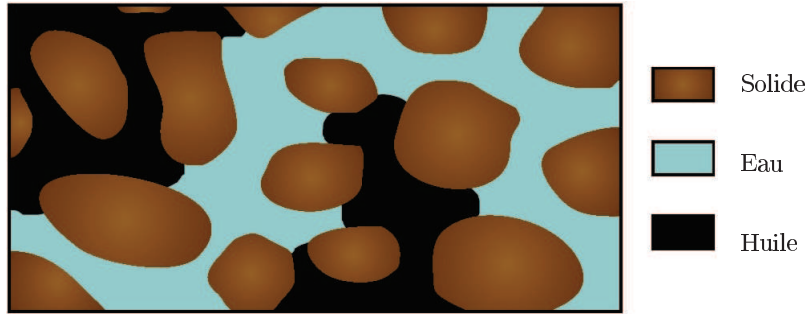


FIGURE 1.3 – Milieu poreux rempli par de l'eau et de l'huile (système diphasique)

1.1.3 Les fluides dans le sol

Voyons à présent comment caractériser les interactions entre fluides à très petite échelle : il est naturel de nous focaliser en première approche sur un petit volume de l'aquifère (figure 1.4), puis en passant entre les grains du sol, jusqu'à l'échelle de pore. Précisons cependant que nous ne descendrons pas jusqu'à l'échelle moléculaire, où se produisent les réactions de dissolution et d'adsorption.

Définition 1. Capillarité

Les interactions entre deux phases à l'échelle moléculaire ont cependant un effet à l'échelle du pore : elles se traduisent par une tension de surface $\sigma [N \cdot m^{-1}]$ entre les deux fluides. Il en résulte la présence visible à l'oeil nu d'un ménisque plus ou moins bombé selon la valeur de l'angle α défini dans la figure 1.5.

Si on définit par σ_{S-1} la tension entre la matrice solide et le fluide 1, nommé fluide *mouillant*, σ_{S-2} celle entre la matrice solide et le fluide 2, fluide *non mouillant* et σ_{1-2} la tension de surface entre le fluide 1 et le fluide 2, la loi de *Young-Dupré* donne la relation entre ces forces à l'équilibre, ainsi que l'angle de mouillabilité α :

$$\sigma_{S-1} = \sigma_{S-2} + \sigma_{1-2} \cos \alpha \quad (1.1)$$

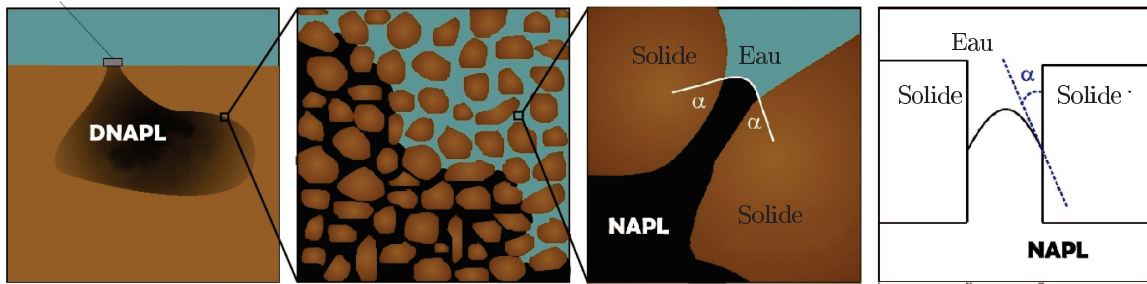


FIGURE 1.4 – *Ecoulement de phases dans un milieu poreux - Détails de l'interface entre deux phases.*

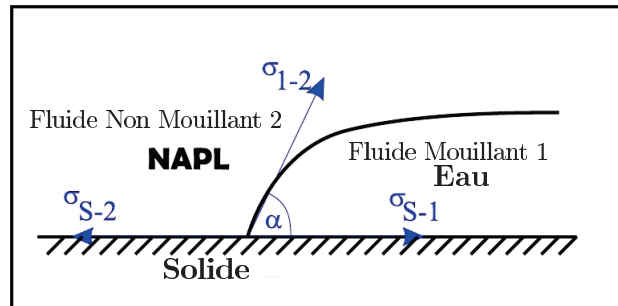


FIGURE 1.5 – *Tension de surface et angle de contact à l'équilibre*

On note que le fluide mouillant, noté w est toujours situé du côté concave du ménisque, par définition du côté de l'angle de contact aigu. Le fluide non mouillant est, d'autre part, noté nw . En système diphasique eau-huile, l'eau est le fluide mouillant, tandis que l'huile est le fluide mouillant pour un système huile-gaz.

1.1.4 Dynamique des fluides

Introduisons à présent quelques notions formelles de mécanique des fluides pour décrire les écoulements dans l'espace poral :

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un domaine compact du fluide. On définit en tout point de la frontière $\partial\Omega$ le vecteur normal \mathbf{n} . On repère le point \mathbf{x} par ses coordonnées (x, y, z) (figure 1.6) et on définit la profondeur $Z(x, y, z)$ du point (x, y, z) par $Z = -z$.

La trajectoire d'un point $\mathbf{x} \in \mathcal{O}$, avec \mathcal{O} un ouvert de Ω de $t=0$ à t est donnée par

$$\begin{cases} \mathcal{O} \mapsto \chi(\mathcal{O}, t) = \mathcal{O}_t \\ \mathbf{x}_0 \mapsto \chi(\mathbf{x}_{t=0}, t) = \mathbf{x}_t \end{cases}$$

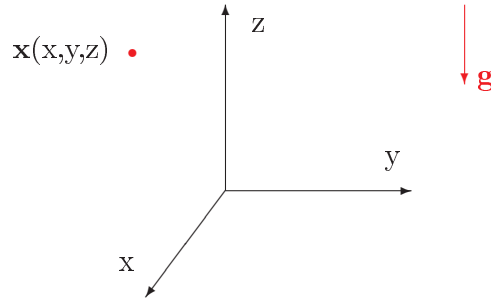


FIGURE 1.6 – Repère

Définition 2. Vitesse

On note $v(\mathbf{x}, t)$ la vitesse du fluide à l'instant t en $\mathbf{x} \in \Omega$. \mathbf{v} est le champ du vecteur vitesse.

Définition 3. Pression

La pression $p(\mathbf{x}, t)$ [Pa] est une variable intensive, définie en tout point $\mathbf{x} \in \Omega$. On notera P le champ de pression.

Pour un fluide idéal, le tenseur de cisaillement τ vérifie :

$$\tau \cdot \mathbf{n} = -P \cdot \mathbf{n} \quad (1.2)$$

Définition 4. Masse volumique

La masse volumique d'un fluide ρ [$kg \cdot m^{-3}$] est donnée par le rapport de la masse de fluide contenu dans un certain volume sur ce volume.

On admet qu'il existe une mesure positive $d\mu_\Omega$ telle que :

$$\int_{\mathcal{O}} d\mu_\Omega = \int_{\mathcal{O}} \rho(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad (1.3)$$

On définit le *facteur de volume* $B(\rho)$ comme le rapport entre la densité du fluide et sa masse volumique dans des conditions de pression et de température de référence (notations et définitions d'après [Chavent and Jaffré, 1986]) :

$$B(\rho) = \frac{\rho(p)}{\rho_{ref}} \quad (1.4)$$

Définition 5. Viscosité

Le coefficient de viscosité dynamique d'un fluide $\mu > 0$ [$Pa \cdot s$] est un indicateur de sa capacité à résister aux déformations. Elle est généralement fonction de la température du fluide. Nous nous

intéresserons à un écoulement isotherme, et nous prendrons une viscosité constante dans toute la suite.

Conservation de la masse

Considérons une portion de fluide sur $\mathcal{O}_t = \chi(\mathcal{O}, t) \subseteq \Omega$. D'après le théorème de transport de Liouville [Betounes, 2010] que l'on prouve aisément par changement de variable :

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}m(\mathcal{O}_t) &= \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{O}_t} \rho(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{O}} \rho(\chi(\mathbf{u}, t), t) \det(\chi') d\mathbf{u} \\
 &= \int_{\mathcal{O}} \left[\frac{\partial}{\partial t} \rho(\chi(\mathbf{u}, t), t) + \nabla(\rho(\chi(\mathbf{u}, t), t)) \cdot \mathbf{v} + \rho(\chi(\mathbf{u}, t), t) \nabla \cdot \mathbf{v} \right] \det(\chi') d\mathbf{u} \\
 &= \int_{\mathcal{O}_t} \left[\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) + \nabla(\rho(\mathbf{x}, t)) \cdot \mathbf{v} + \rho(\mathbf{x}, t) \nabla \cdot \mathbf{v} \right] d\mathbf{x} \\
 &= \int_{\mathcal{O}_t} \left[\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot (\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}) \right] d\mathbf{x}
 \end{aligned} \tag{1.5}$$

La conservation de la masse s'exprime :

$$\frac{d}{dt}m(\mathcal{O}_t) = 0 \tag{1.6}$$

Proposition 2. *D'après la relation établie en 1.5, on obtient par équivalence l'équation de conservation de la masse :*

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot (\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}) = 0} \tag{1.7}$$

Equation de Navier-Stokes

Afin d'établir la conservation de la quantité de mouvement à l'échelle du pore, on pose une série d'hypothèses :

- Le fluide est incompressible, il vérifie la relation :

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \tag{1.8}$$

- Le tenseur de déformation s'écrit :

$$\mathbf{D}(\mathbf{v}) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^t) \tag{1.9}$$

- Le fluide est Newtonien, il vérifie :

$$\boldsymbol{\tau} = -p\mathbf{Id} + \eta(\nabla \cdot \mathbf{v})\mathbf{Id} + 2\mu\mathbf{D}(\mathbf{v}) \quad (1.10)$$

où η [$Pa \cdot s$] désigne la viscosité de volume du fluide.

L'hypothèse d'incompressibilité 1.8 permet de simplifier 1.10 :

$$\boldsymbol{\tau} = -p\mathbf{Id} + 2\mu\mathbf{D}(\mathbf{v}) \quad (1.11)$$

Proposition 3. Equation de Navier-Stokes

Soit $U \subset \mathcal{O}_t$ un compact. Alors la conservation de la quantité de mouvement (Loi de Newton) pour un fluide soumis aux seules forces extérieures de gravité se traduit par la relation :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_U \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} &= \int_U \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{g} d\mathbf{x} + \int_{\partial U} \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n} d\Gamma \\ &= \int_U (\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}) d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (1.12)$$

Un remaniement vectoriel sous l'hypothèse d'incompressibilité conduit également aux égalités :

$$\frac{d}{dt} \int_U \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = \rho \frac{d}{dt} \int_U \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = \rho \int_U \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) (\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad (1.13)$$

Finalement, on obtient l'équation de Navier-Stokes pour un fluide parfait incompressible :

$$\boxed{\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = \rho \mathbf{g} - \nabla P + \mu \Delta \mathbf{v}} \quad (1.14)$$

Bien que la puissance grandissante des calculateurs ouvre de belles perspectives pour la simulation des écoulements fluides, il n'est pas envisageable à l'heure actuelle de modéliser un aquifère en prenant en compte les spécificités de chaque pore. Nous avons besoin d'une vision plus globale, autrement dit, de passer de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique.

De l'échelle microscopique au Volume Élémentaire Représentatif (VER)

Les présentes recherches ont été menées à l'échelle macroscopique : partant du principe que les effets macroscopiques résultent d'une conjonction d'effets élémentaires de l'échelle microscopique, les variables et équations régissant l'écoulement des fluides sont le résultat d'une moyenne des

variables microscopiques. Ainsi, les équations d'écoulement à l'échelle macroscopique sont le prolongement de l'équation de Navier-Stokes 1.14.

Il est donc naturel de mener notre étude sur un ensemble de parties suffisamment grandes du sol pour compenser des variations importantes, beaucoup plus grandes que l'échelle moléculaire, mais aussi suffisamment petites pour que la prise de moyenne de ces propriétés soit précise.

Ainsi, à partir d'analyses microscopiques, de méthodes statistiques ou encore d'homogénéisation, on peut établir une échelle d'espace appropriée et y définir des fonctions continues et différentiables. Le volume associé est appelé *Volume Élémentaire Représentatif (VER)*.

D'après [Bear, 1972], le VER est "un volume suffisamment grand pour qu'il permette d'estimer statistiquement tous les paramètres associés à la configuration de l'espace poral et suffisamment petit pour être considéré comme une fraction négligeable d'un volume plus grand décrivant l'échelle macroscopique". Dans la section suivante, nous montrons comment établir rigoureusement un VER, et les fonctions caractéristiques sur l'espace poral. L'ordre de grandeur du diamètre du VER est de quelques dizaines de fois celui du diamètre des grains moyens ([Sposito, 1998]). Il est d'environ 17 mm pour une argile limoneuse [Belfort, 2006].

1.2 Formalismes mathématiques pour la caractérisation des écoulements en milieux poreux

1.2.1 Porosité

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un domaine du milieu poreux. Soit $\mathcal{S}(\mathbf{x}_0, r)$ la sphère de centre \mathbf{x}_0 et de rayon r . Soit la fonction $\gamma : \Omega \rightarrow \{0, 1\}$ définie par :

$$\gamma(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} \in \text{espace poral} \\ 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \text{matrice solide} \end{cases} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (1.15)$$

Définition 6. La porosité est la fonction :

$$\begin{aligned} \phi : \Omega &\rightarrow [0 : 1] \\ \mathbf{x}_0 &\mapsto \frac{1}{\int_{\mathcal{S}(\mathbf{x}_0, r)} d\mathbf{x}} \int_{\mathcal{S}(\mathbf{x}_0, r)} \gamma(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (1.16)$$

Ainsi, la fonction porosité est obtenue par intégration sur des volumes microscopiques de la fonction γ (espace des vides). On déduit de l'évolution de la porosité selon le diamètre du REV dans ce type de milieu qu'une taille acceptable de r est supérieure à r_{micro} , en deçà de laquelle les hétérogénéités microscopiques engendrent des disparités au sein des VER, mais aussi inférieure à r_{macro} , au delà de laquelle apparaissent des hétérogénéités macroscopiques (failles) [Bear, 1972], [Helmig, 1997]. L'évolution de la porosité est illustrée dans la figure 1.7.

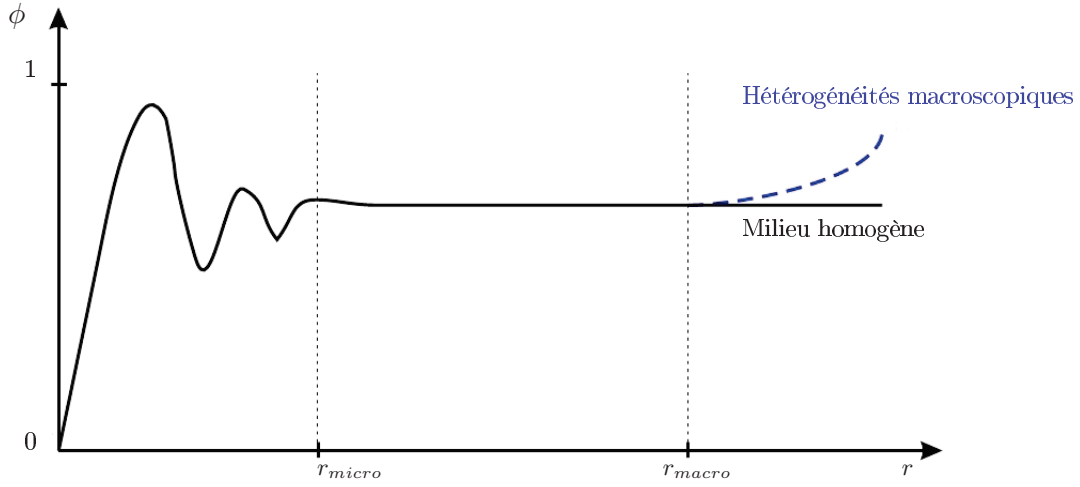


FIGURE 1.7 – Evolution de la porosité ϕ en fonction du diamètre moyen r [Helmig, 1997]

1.2.2 Saturation

Afin d'évaluer la quantité de fluide présent dans les pores, on introduit en tout point \mathbf{x} la fonction indicatrice :

$$\gamma_j(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} \text{ est à l'intérieur de la phase } j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (1.17)$$

et en sommant sur les Volumes Elementaires Représentatifs (recouvrement du domaine), on définit la saturation d'une phase j :

Définition 7.

$$S_j(\mathbf{x}_0, t) = \frac{\int_{VER} \gamma_j(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}}{\int_{VER} \gamma(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}} \quad (1.18)$$

Autrement dit, la saturation d'un fluide indique à quels endroits et en quelles proportions il remplit le milieu poreux. On notera généralement S_1 la saturation en eau, S_2 la saturation en huile, et S_3 la saturation en gaz.

Proposition 4. Il résulte de la définition de la saturation la propriété suivante :

$$0 \leq S_j \leq 1 \quad (1.19)$$

Définition 8. On dit qu'un milieu poreux est saturé lorsque :

$$\boxed{\sum_j S_j = 1} \quad (1.20)$$

Les hydrosystèmes de subsurface sont constitués de plusieurs couches, dont une zone saturée, et éventuellement une zone non saturée lorsque l'aquifère n'affleure pas.

Lorsqu'un fluide s'écoule à travers un milieu poreux, il y subsiste presque toujours une petite quantité minimale matérialisant la phase immobile : c'est la *saturation résiduelle* $S_{j,r}$.

Propriété :

On obtient par conséquent la propriété suivante :

$$S_{j,r} \leq S_j \leq 1 - \sum_{\beta \neq j} S_{\beta,r}$$

On travaillera toujours avec la *saturation effective* :

$$\bar{S}_j = \frac{S_j - S_{j,r}}{1 - \sum_{\beta} S_{\beta,r}} \quad (1.21)$$

Et on désignera désormais par S_j la saturation effective.

1.2.3 Pression capillaire

Définition 9. A l'interface entre deux fluides, une différence de pression les maintient séparés. On définit donc la pression capillaire à l'échelle macroscopique, qui est définie positive par la relation suivante :

$$\boxed{p_c = p_{n\omega} - p_\omega \geq 0} \quad (1.22)$$

La pression capillaire dépend de la géométrie des pores, donc de la saturation, de la température et de la composition du fluide [Belfort, 2006],[Helmig, 1997]. C'est pourquoi il est relativement complexe d'établir de manière empirique des courbes de pression capillaire rendant compte des spécificités du milieu. On peut penser aux travaux de Muskat ([Muskat, 1937]). Pour les écoulements en milieux poreux homogènes, il existe de nombreux modèles satisfaisants, et fonction de la seule saturation effective, bien définie à l'équilibre : $p_c(S_w)$.

Ajoutons que la pression capillaire est une variable secondaire de l'écoulement. Nous utiliserons deux modèles classiques pour notre étude : le modèle de Brooks-Corey et le modèle de Van-Genuchten. Ils présentent l'avantage d'une expression analytique. Le modèle de Brooks-Corey a été utilisé en particulier pour les essais numériques car il rend compte de la pression d'entrée, représentant un palier à franchir pour que la phase mouillante puisse pénétrer le milieu.

Le modèle de Brooks-Corey

Le modèle de Brooks-Corey [Brooks and Corey, 1964] est donné par :

$$S_\omega(p_c) = \left(\frac{P_d}{p_c} \right)^\lambda \quad p_c \geq P_d \quad (1.23)$$

avec P_d la pression d'entrée et $0, 2 \leq \lambda \leq 0, 3$ des paramètres adimensionnels (voir figure 1.8).

Le paramètre λ est un indicateur de l'uniformité des grains du sol : l'uniformité s'accroît lorsque λ diminue. Helmig définit la *pression d'entrée* P_d comme : "la valeur de pression capillaire requise pour déplacer le fluide mouillant à travers le plus grand pore" [Helmig, 1997].

Et finalement :

$$p_c = P_d (S_\omega)^{-\frac{1}{\lambda}} \quad p_c \geq P_d \quad S_\omega \in]0, 1] \quad (1.24)$$

Le modèle de Van-Genuchten

Le modèle de Van Genuchten [Van Genuchten, 1980] pour la phase mouillante est donné par :

$$S_\omega(p_c) = (1 + (\alpha p_c)^n)^m, \quad p_c \geq 0 \quad (1.25)$$

avec $m = 1 - \frac{1}{n}$, n les paramètres de Van-Genuchten qui caractérisent le milieu. Il est possible d'exprimer les paramètres de Van-Genuchten en fonction de ceux de Brooks-Corey.

On a donc le modèle suivant :

$$p_c(S_\omega) = \frac{1}{\alpha} \left(S_\omega^{-\frac{1}{m}} - 1 \right)^{\frac{1}{n}}, \quad p_c \geq 0 \quad (1.26)$$

La figure suivante 1.8 donne les deux modèles de pression capillaire dans le cas d'une imbibition (lorsqu'on sature le milieu en eau) et d'un drainage (lorsqu'on évacue l'eau présente dans le domaine, qui est alors remplacée par de l'air jusqu'à saturation résiduelle).

Il est important de préciser que les courbes de perméabilités relatives diffèrent selon que l'on se place en situation de drainage ou d'imbibition. Le drainage après une imbibition est influencé par un phénomène d'hystérésis. Pour plus de détails consulter [Helmig, 1997].

On note que seul le modèle de Brooks-Corey permet de modéliser l'effet de seuil, à savoir la pression minimale nécessaire au remplissages des pores. Remarquons enfin la présence d'une branche asymptotique sur les courbes de pression capillaire au voisinage de zéro.

1.2.4 Perméabilités

Définition 10. La conductivité hydraulique \mathbf{K}_h est un paramètre macroscopique qui rend compte de la viscosité et de l'adhésion du fluide à la matrice solide [Helmig, 1997] :

$$\mathbf{K}_h = \mathbf{K} k_{rj} \frac{\rho_j g}{\mu_j} \quad [Pa \cdot m \cdot s] \quad (1.27)$$

Elle est fonction de la perméabilité intrinsèque \mathbf{K} [m^2] (paramètre propre au milieu poreux et indépendant de la nature des fluides), ainsi que de la viscosité et de la masse volumique du fluide, mais aussi de la *perméabilité relative*, fonction de la saturation de la phase.

Il existe plusieurs modèles de perméabilité relative (Burdine, Mualem, Van Genuchten, Brooks Corey), établis sur la base d'une relation entre saturation de la phase et pression capillaire.

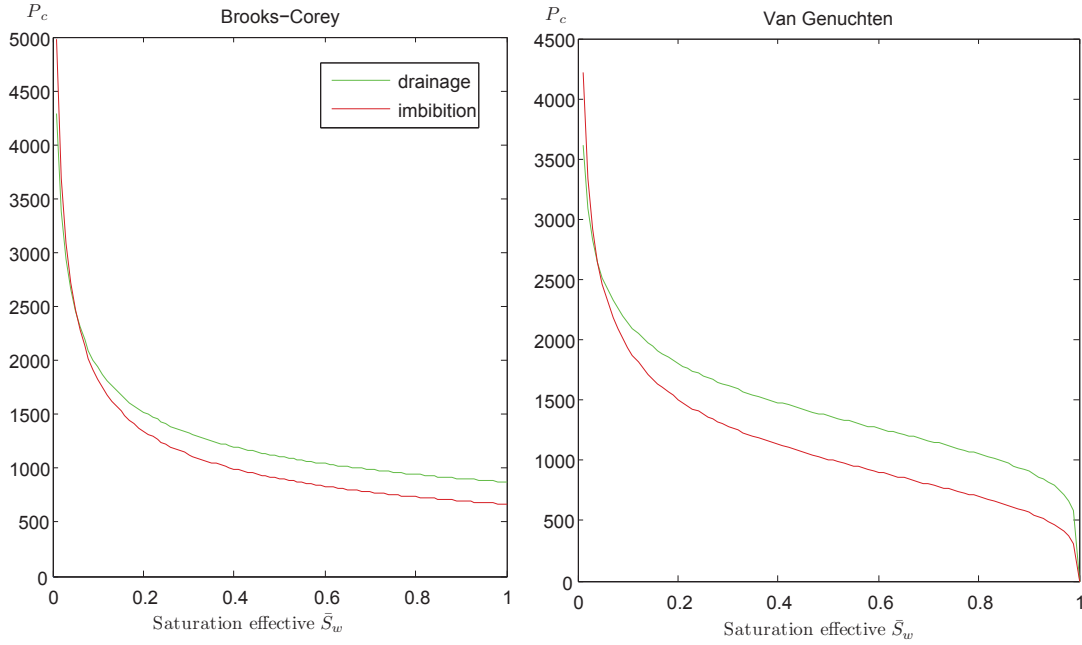


FIGURE 1.8 – Courbes capillaires sur le modèle de Brooks-Corey (gauche) et de Van Genuchten (droite) dans le cas d'un drainage et d'un imbibition. Pour le drainage : $\lambda = 2.89$, $P_d = 873 \text{ Pa}$, $n = 5.5$, $j = 0.00077 \text{ Pa}^{-1}$. Pour l'imbibition : $\lambda = 2.29$, $P_d = 667 \text{ Pa}$, $n = 4$, $j = 0.0011 \text{ Pa}^{-1}$ [Turner, 2004]

Soient a, b , et c des paramètres réels. Alors un exemple de relation constitutive est donné par :

$$kr_w(S_w) = S_w^a \left(\frac{\int_0^{S_w} p_c(s)^{-b} ds}{\int_0^1 p_c(s)^{-b} ds} \right)^c \quad (1.28)$$

et

$$kr_{nw}(S_w) = (1 - S_w)^a \left(\frac{\int_0^{S_w} p_c(s)^{-b} ds}{\int_0^1 p_c(s)^{-b} ds} \right)^c \quad (1.29)$$

En substituant dans les relations (1.28), (1.29) le modèle de pression capillaire de Brooks-Corey 1.24 et en posant $a = 2$, $b = 2$ et $c = 1$, on obtient le modèle capillaire de *Burdine Brooks-Corey* :

$$kr_w(S_w) = S_w^{\frac{2+3\lambda}{\lambda}} \quad (1.30)$$

et

$$kr_{nw}(S_w) = (1 - S_w)^2 (1 - S_w^{\frac{2+\lambda}{\lambda}}) \quad (1.31)$$

De même, le modèle mathématiques de *Mualem-Van Genuchten* est obtenu avec la pression capillaire de Van Genuchten 1.26 et pour $a = 1/2$, $b = 1$ et $c = 2$ soit [Morel-Seytoux et al., 1996] :

$$kr_w(S_w) = S_w^{\frac{1}{2}} \left(1 - \left(1 - S_w^{\frac{1}{m}} \right)^m \right)^2 \quad (1.32)$$

et

$$kr_{nw}(S_w) = (1 - S_w)^{\frac{1}{2}} \left(1 - S_w^{\frac{1}{m}} \right)^{2m} \quad (1.33)$$

Dans la figure 1.9 sont représentés en exemple les modèles de *Burdine Brooks-Corey* ainsi que *Mualem-Van Genuchten*

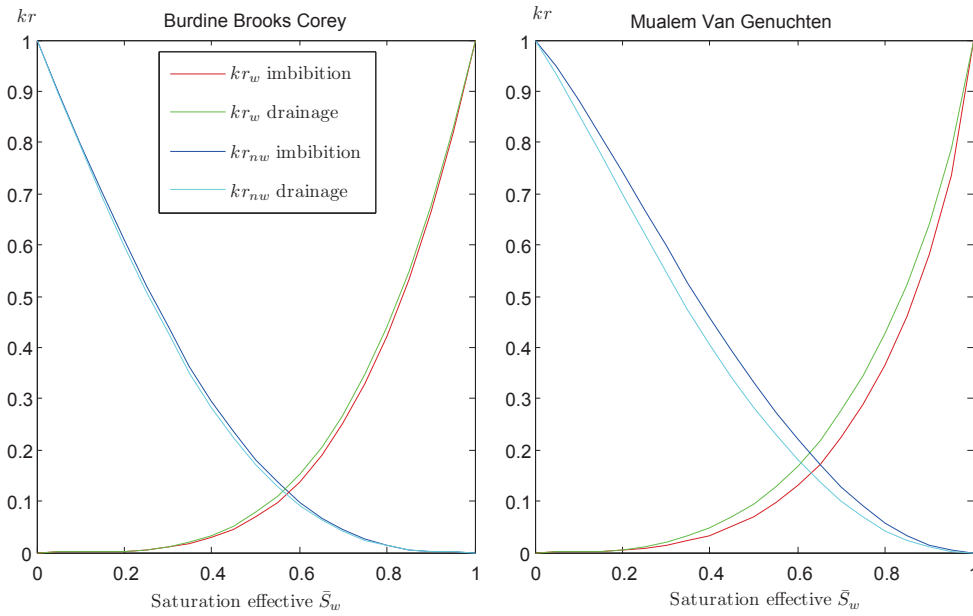


FIGURE 1.9 – *Perméabilités relatives associées au drainage et à l'imbibition. Paramètres pour le drainage : $\lambda = 2.89$, $P_d = 873 Pa$, $n = 5.5$, $\alpha = 0.00077 Pa^{-1}$. Paramètres pour l'imbibition : $\lambda = 2.29$, $P_d = 667 Pa$, $n = 4$, $\alpha = 0.0011 Pa^{-1}$ [Turner, 2004]*

Un modèle de perméabilité relative simplifié est donné par le *modèle de Todd* en système diphasique (cf figure 1.10) :

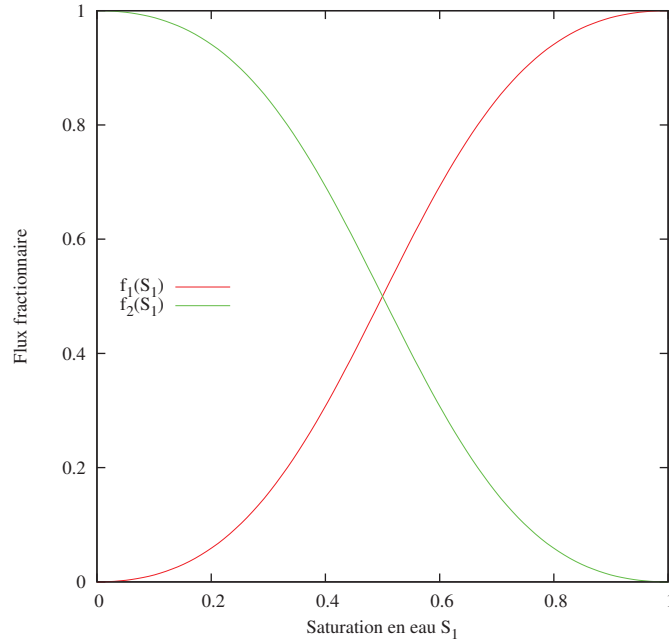
$$kr_w = S_w^2 \quad (1.34)$$

$$kr_{nw} = (1 - S_w)^2 \quad (1.35)$$

1.2.5 Flux fractionnaires

Autre variable secondaire que nous définissons, le flux fractionnaire s'écrit, pour la phase j :

$$f_j(S_w) = \frac{\frac{kr_j(S_w)}{\mu_j}}{\frac{kr_1(S_w)}{\mu_1} + \frac{kr_2(S_w)}{\mu_2}} \quad (1.36)$$

FIGURE 1.10 – *Modèle de Todd diphasique eau-huile*

Nous verrons dans la suite comment construire les variables secondaires de perméabilité en système triphasique à partir de chaque paire de perméabilités diphasiques : eau-gaz, eau-huile et huile-gaz.

1.3 Modélisation des écoulements multiphasiques dans les hydrosystèmes souterrains

1.3.1 Equation de conservation de la masse

Considérons un volume de référence $G \subseteq \Omega$ et la normale en chaque point de la surface \mathbf{n} . On suppose que le volume G est invariant en temps et en espace. Soit $\sigma(\mathbf{x})$ la section du domaine étudié. On définit alors la masse du fluide saturant le volume G ([Chavent and Jaffré, 1986]) :

$$m_G = \int_G \sigma(\mathbf{x}) \phi \rho(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad (1.37)$$

L'équation de continuité pour une seule phase en formalisme Lagrangien est cette fois fonction de la porosité du milieu :

$$\mathcal{L}(\phi, \rho, \mathbf{v}) := \int_G \left[\frac{\partial(\sigma \phi \rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma \rho_j \mathbf{v}) - \rho Q \right] d\mathbf{x} = 0 \quad (1.38)$$

avec ρQ un terme-source et $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$ la vitesse [$m \cdot s^{-1}$] du fluide à travers $\sigma = dS$.

En présence de plusieurs phases coexistantes dans le milieu poreux, on a :

$$\mathcal{L}(S_j, \rho_j, \mathbf{v}_j) := \int_G \left[\frac{\partial(\sigma S_j \phi \rho_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma \rho_j \mathbf{v}_j) - \rho Q_\alpha \right] d\mathbf{x} = 0 \quad (1.39)$$

avec la *vitesse moyenne de la phase j* au sein du pore :

$$\mathbf{v}_j = \frac{\mathbf{v}}{\phi S_j}$$

Nous supposons que la masse volumique du fluide est une fonction de la pression P_j . En divisant par la masse volumique de référence, l'équation de continuité généralisée pour la phase j s'écrit ([Chavent and Jaffré, 1986]) :

$$\boxed{\frac{\partial(\sigma\phi B_j(\rho_j)S_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma\rho_j\mathbf{v}_j) - \rho Q_j = 0} \quad (1.40)$$

1.3.2 Loi de Darcy

Loi de Darcy pour un écoulement monophasique

Les premiers modèles d'écoulement macroscopiques en milieu poreux datent du 19^{ème} siècle : ce sont les lois de Darcy.

Soit un système de coordonnées cartésiennes, avec Z la profondeur d'après la figure 1.6. Alors la loi de Darcy s'écrit :

$$\mathbf{v} = -\mathbf{K} \cdot \frac{\rho g}{\mu} \nabla h \quad (1.41)$$

où :

- $h = \frac{P}{\rho g} + z$ [m] est la hauteur piézométrique
- \mathbf{K} [m^2] est le tenseur de perméabilité intrinsèque
- $g = 9.81$ [$m \cdot s^{-2}$] est la constante d'accélération gravitationnelle

- $\nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$

Loi de Darcy-Muskat

En présence de plusieurs phases, le coefficient de perméabilité de la phase j s'écrit :

$$\mathbf{K}_j = kr_j\mathbf{K}$$

En présence de deux fluides non miscibles, Muskat a montré par des études expérimentales que la loi de Darcy est toujours applicable aux deux phases distinctes, à savoir : la vitesse de Darcy \mathbf{v}_j du fluide j s'exprime :

$$\mathbf{v}_j = -\frac{kr_j B_j(\rho_j)}{\mu_j} \mathbf{K} \cdot (\nabla P_j - \rho_j(P_j)g\nabla Z) \quad (1.42)$$

et le flux associé dans un domaine de section $\sigma(x)$ est donné par :

$$\mathbf{q}_j = -\sigma \frac{kr_j B_j(\rho_j)}{\mu_j} \mathbf{K} \cdot (\nabla P_j - \rho_j(P_j)g\nabla Z) \quad (1.43)$$

On obtient pour chaque phase [Chavent and Jaffré, 1986] :

$$\frac{\partial(\sigma \phi B_j(\rho_j) S_j)}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\sigma \frac{kr_j B_j(\rho_j)}{\mu_j} \mathbf{K} \cdot (\nabla P_j - \rho_j(P_j)g\nabla Z) \right) = 0 \quad \text{dans } G. \quad (1.44)$$

1.3.3 Variables primaires et secondaires

Pour résumer, rappelons les variables du système ainsi que les équations de l'écoulement multiphasique ($j=1,2,3$).

Les variables primaires/inconnues du système sont :

- S_j la saturation de la phase j
- P_j la pression de la phase j
- $\sigma \mathbf{v}_j$ le flux volumique de la phase j

Les variables secondaires du système sont :

- $kr_j(p_j)$ la perméabilité relative
- f_j le flux fractionnaire
- $d_j = \frac{B_j(\rho_j)}{\mu_j}$ $d = \sum_j kr_j d_j$
- $\nu_j = \frac{kr_j d_j}{d}$
- $\rho_j(P_j)$ $\bar{\rho} = \sum_j \nu_j \rho_j$
- $P^{12}(S_1, S_3) = P_1 - P_2$ la pression capillaire eau-huile
- $P^{32}(S_1, S_3) = P_3 - P_2$ la pression capillaire gaz-huile

Les équations régissant le système sont :

$$\bullet \mathbf{v}_j = -\frac{kr_j B_j(\rho_j)}{\mu_j} \mathbf{K} \cdot (\nabla P_j - \rho_j(P_j)g\nabla Z) \quad j = 1, 2, 3$$

$$\bullet \frac{\partial(\sigma\phi B_j(\rho_j)S_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma\mathbf{v}_j) = 0 \quad j = 1, 2, 3$$

$$\bullet \sum_j S_j = 1$$

1.4 Quelques formulations classiques pour les écoulements multiphasiques

Les équations d'écoulement multiphasique peuvent être de forme diverse selon le choix des variables primaires. Ce choix a une forte influence sur la résolution numérique du système. Citons par exemple les formulations pression-pression, les formulations pression pondérée, ou pression globale ([di Chiara R., 2009], [Chen and Ewing, 1997], [di Chiara R. et al., 2010]).

1.4.1 Formulation pression-pression

Par exemple, la combinaison des équations de continuité avec la loi de Darcy (Voir [Binning and Celia, 1999]) en système diphasique génère un système d'équations paraboliques fortement couplées "*pression-pression*" pour les phases mouillantes et non-mouillantes puisque la variable primaire de ce système est la pression :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi\sigma \frac{\partial}{\partial t}(B_\omega(\rho_\omega)S_\omega) - \nabla \cdot \left(\sigma \frac{kr_\omega}{\mu_\omega} B_\omega(\rho_\omega) \mathbf{K} \cdot (\nabla P_\omega - \rho_\omega g \nabla Z) \right) = 0 \\ \phi\sigma \frac{\partial}{\partial t}(B_{n\omega}(\rho_{n\omega})S_{n\omega}) - \nabla \cdot \left(\sigma \frac{kr_{n\omega}}{\mu_{n\omega}} B_{n\omega}(\rho_{n\omega}) \mathbf{K} \cdot (\nabla P_{n\omega} - \rho_{n\omega} g \nabla Z) \right) = 0. \end{array} \right. \quad (1.45)$$

Le système est clos grâce à la relation de saturation 1.20. Les conditions aux limites peuvent être de type Dirichlet, Neumann ou Mixte.

1.4.2 Formulation pression mouillante - saturation non mouillante

Une autre méthode consiste à se servir de la définition de la pression capillaire 1.22 pour dériver une relation *Pression mouillante - Saturation non mouillante* :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi\sigma \frac{\partial}{\partial t}(B_\omega(\rho_\omega)S_\omega) - \nabla \cdot \left(\sigma \frac{kr_\omega}{\mu_\omega} B_\omega(\rho_\omega) \mathbf{K} \cdot (\nabla P_\omega - \rho_\omega g \nabla Z) \right) = 0 \\ \phi\sigma \frac{\partial}{\partial t}(B_{n\omega}(\rho_{n\omega})S_{n\omega}) - \nabla \cdot \left(\sigma \frac{kr_{n\omega}}{\mu_{n\omega}} B_{n\omega}(\rho_{n\omega}) \mathbf{K} \cdot (\nabla P_{n\omega} - \nabla P_c - \rho_{n\omega} g \nabla Z) \right) = 0 \end{array} \right. \quad (1.46)$$

Lorsque la pression capillaire est fonction de la seule saturation, on a la relation différentielle suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla P_c = \frac{dP_c}{dS_\omega} \nabla S_\omega \quad \text{ou} \\ \nabla P_c = \frac{dP_c}{dS_{n\omega}} \nabla S_{n\omega} \end{array} \right.$$

et en ré-injectant dans la relation précédente 1.46 :

$$\begin{aligned} \phi\sigma \frac{\partial}{\partial t}(B_\omega(\rho_\omega)S_\omega) - \underbrace{\nabla \cdot \left(\sigma \frac{kr_\omega}{\mu_\omega} B_\omega(\rho_\omega) \mathbf{K} \cdot (\nabla P_{n\omega} - \rho_\omega g \nabla Z) \right)}_{\text{Convection}} \\ + \underbrace{\nabla \cdot \left(\sigma \frac{kr_\omega}{\mu_\omega} B_\omega(\rho_\omega) \frac{dP_c}{ds_\omega} \mathbf{K} \cdot (\nabla s_\omega) \right)}_{\text{Diffusion}} = 0 \end{aligned} \quad (1.47)$$

On note que l'équation de saturation est composée d'une partie convective et d'une partie diffusive, comportant un gradient de pression capillaire, plus délicat à discrétiser au voisinage des saturations résiduelles où le gradient prend des valeurs très grandes.

Le couplage non linéaire entre les deux équations engendre des difficultés de résolution. La formulation en pression globale introduite en 1981 par Chavent et Jaffré et en parallèle par Antoncev and Mohanov 1978 puis reprise par Amaziane et al. [Amaziane et al., 2010], se propose d'y remédier. Elle a été construite de diverse manière, toutefois le principe de construction reste le même.

1.4.3 Formulation en pression globale pour les écoulements multiphasiques

Le principe de la formulation en pression globale ([Chavent and Jaffré, 1986], [Amaziane et al., 2010], [di Chiara R. et al., 2010]) consiste à introduire une nouvelle variable, homogène à une pression, mais qui n'a pas de correspondant physique, la *pression globale* p , en fonction de laquelle on exprimera les variables secondaires, et grâce à laquelle on pourra découpler partiellement les équations d'écoulement. On note P le champ de pression globale. On dérive des équations d'écoulement un système en pression globale (parabolique) - saturation (système parabolique ou hyperbolique en l'absence de terme de diffusion), non linéaire mais faiblement couplé.

Tout d'abord, on suppose qu'il existe une variable p , telle que $\nu_j = \nu_j(S_1, S_3, p)$, $j = 1, 2, 3$.

Soit la fonction *pression capillaire globale* dont le champ s'écrit P_c^g , définie implicitement (car construite point par point à partir de la relation suivante) :

$$\begin{aligned} \nabla P_c^g(S_1, S_3, p) = \nu_1(S_1, S_3, p) \nabla P_c^{12}(S_1, S_3) + \nu_3(S_1, S_3, p) \nabla P_c^{32}(S_1, S_3) \\ + \frac{\partial P_c^g}{\partial p}(S_1, S_3, p) \nabla P \end{aligned} \quad (1.48)$$

Cette condition est équivalente à la condition de Différentielle Totale suivante :

$$\frac{\partial \nu_1}{\partial S_1} \frac{\partial P_c^{12}}{\partial S_3} - \frac{\partial \nu_1}{\partial S_3} \frac{\partial P_c^{12}}{\partial S_1} = \frac{\partial \nu_3}{\partial S_3} \frac{\partial P_c^{32}}{\partial S_1} - \frac{\partial \nu_3}{\partial S_1} \frac{\partial P_c^{32}}{\partial S_3} \quad (1.49)$$

Cette égalité signifie concrètement que le calcul de la pression capillaire globale, illustrée par un chemin d'intégration sur le diagramme ternaire (figure 1.11) ne dépend pas du chemin d'intégration emprunté (cette propriété est également illustrée dans la figure). On pourra consulter pour plus de détails la publication [di Chiara R. et al., 2010] sur la construction de la pression globale, à partir des perméabilités relatives et pressions capillaires, qui sont interpolées sur le diagramme ternaire.

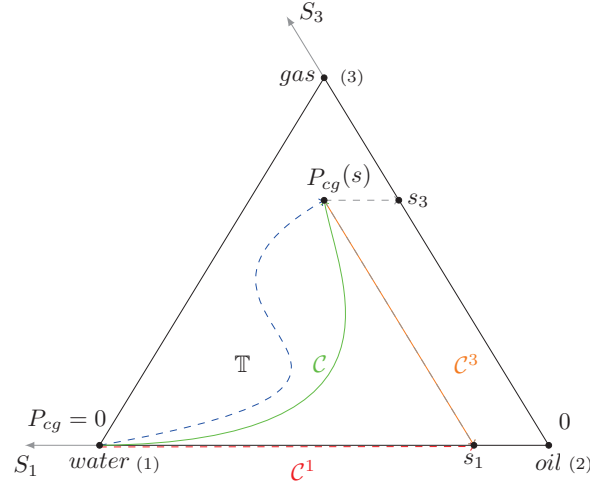


FIGURE 1.11 – Diagramme ternaire \mathbb{T} de la Pression capillaire globale en fonction des saturations en eau ($j = 1$) et en gaz ($j = 3$). Deux chemins d'intégration $C \sim C^1 \cup C^3$ [di Chiara R. et al., 2010].

Lorsque cette condition est remplie, on pose :

$$\boxed{\begin{cases} P(\mathbf{x}, t) = P_2(\mathbf{x}, t) + P_c^g(S_1(\mathbf{x}, t), S_3(\mathbf{x}, t), p(\mathbf{x}, t)) \\ p_1 \leq p \leq p_2 \\ \forall \mathbf{x} \in G \quad \forall t > 0 \end{cases}} \quad (1.50)$$

Ainsi, P est uniquement déterminée, sous la condition de stabilité :

$$\left\| \frac{\partial P_c^g}{\partial p}(S_1, S_3, p) \right\| < 1 \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \mathbb{T}, \quad p_{min} \leq p_1 \leq p \leq p_3 \leq p_{max} \quad (1.51)$$

A présent sommions les flux volumiques (d'après 1.3.3) :

$$\mathbf{v} = \sum_j^3 \mathbf{v}_j = - \sum_j^3 dv_j \mathbf{K} \cdot (\nabla P_j - \rho_j(p_j) g \nabla Z) \quad (1.52)$$

En remplaçant les pressions en eau et en gaz par :

$$\begin{aligned} P_1 &= P_c^{12} + P_2 \\ P_3 &= P_c^{32} + P_2 \end{aligned}$$

et à partir de 1.49 puis 1.50 :

$$\begin{aligned}
 \nu_1 \nabla P_1 + \nu_2 \nabla P_2 + \nu_3 \nabla P_3 &= \nu_1 \nabla P_c^{12} + \nu_3 \nabla P_c^{32} + \underbrace{(\nu_1 + \nu_2 + \nu_3)}_{=1} \nabla P_2 \\
 &= \nabla P_c^g - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \nabla P + \nabla P_2 \\
 &= \nabla (P_c^g + P_2) - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \nabla P \\
 &= \nabla P - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \nabla P = \left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p}\right) \nabla P
 \end{aligned} \tag{1.53}$$

Et finalement, l'équation en pression globale est donnée par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \sigma \frac{\partial (\sum_j^3 B_j(\rho_j) S_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma \mathbf{v}) = 0 \\ \mathbf{v} = -d\mathbf{K} \cdot \left[\left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p}\right) \nabla P - \bar{\rho} g \nabla Z \right] \\ P(\mathbf{x}, t) = P_2(\mathbf{x}, t) + P_c^g(S_1(\mathbf{x}, t), S_3(\mathbf{x}, t), p(\mathbf{x}, t)) \end{array} \right. \tag{1.54}$$

C'est une famille d'équations paraboliques.

Les équations de saturation s'écrivent :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \sigma \frac{\partial (B_j(\rho_j) S_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma \mathbf{v}_j) = 0 \quad j = 1, 3 \\ \mathbf{v}_j = -d\nu_j \mathbf{K} \cdot (\nabla P_j - \rho_j(P_j) g \nabla Z) \quad j = 1, 3 \\ \sum_j^3 S_j = 1 \quad j = 1, 3 \end{array} \right. \tag{1.55}$$

On constate que les termes de second ordre en saturation n'apparaissent plus dans l'équation de pression : il s'agit d'un découplage partiel. Les équations en saturation sont paraboliques dégénérées (le terme de diffusion peut prendre des valeurs nulles).

1.4.4 Formulation variationnelle des équation de saturation

Proposition 5. *En formulation pression globale, on peut réécrire les équations de saturation en fonction des flux fractionnaires ainsi que du flux total en distinguant une partie diffusive et une partie convective. Par exemple, pour l'équation de saturation en eau ou en gaz, on a (pour plus de détails, voir dans l'annexe A) :*

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \phi \sigma \frac{\partial (B_j(P_j) S_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma \mathbf{V}_j) = 0 \quad j = 1, 3 \\
 \mathbf{V}_j = \underbrace{\frac{\nu_j}{\omega} \mathbf{V} - \nu_j d\mathbf{K} \cdot \left[\frac{1-\omega}{\omega} \bar{\rho} - \Delta \rho_j \right] g \nabla Z}_{\text{Partie convective}} - \underbrace{\nu_j d\mathbf{K} \cdot [\nabla (P_c^{j2} - P_c^g)]}_{\text{Partie diffusive}} \\
 \Delta \rho_1 = (\nu_2(\rho_2 - \rho_1) + \nu_3(\rho_3 - \rho_2)) \\
 \Delta \rho_3 = (\nu_2(\rho_2 - \rho_3) + \nu_1(\rho_3 - \rho_1)) \\
 \sum_{j=1}^3 S_j = 1 \\
 \omega = \left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \right)
 \end{array} \right. \quad (1.56)$$

1.4.5 Equations d'écoulement diphasique en formulation pression globale

On peut définir un équivalent de la formulation en pression globale en système diphasique mouillant-non mouillant ([Amaziane et al., 2011a]). Ainsi :

Proposition 6. :

Il existe une fonction P , la pression globale, définie implicitement et une fonction $P_c^g(S_{n\omega}, p)$, telle qu'on puisse déterminer $\omega(S_{n\omega}, p)$ vérifiant :

$$\nabla P_{n\omega} + \nu_\omega(S_{n\omega}, p) \frac{\partial P_c}{\partial S_{n\omega}} \nabla S_{n\omega} = \omega(S_{n\omega}, p) \nabla P \quad (1.57)$$

Il en résulte :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 P = P_{n\omega} + P_c^g(S_{n\omega}, p) \quad \forall (S_{n\omega}, p) \in [0, 1[\times [p_\omega, p_{n\omega}] \\
 \omega(S_{n\omega}, p) = 1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p}(S_{n\omega}, p) \quad \forall (S_{n\omega}, p) \in [0, 1[\times [p_\omega, p_{n\omega}] \\
 P_c^g(S_{n\omega}, p) = - \int_0^{S_{n\omega}} \nu_\omega \frac{\partial P_c}{\partial S_{n\omega}} dS_{n\omega} \quad \forall (S_{n\omega}, p) \in [0, 1[\times [p_\omega, p_{n\omega}] \\
 P_c = P_{n\omega} - P_\omega
 \end{array} \right.$$

Le terme $\frac{\partial P_c^g}{\partial p}$ est appelé *facteur de compressibilité*.

Remarque :

Dans le cas où un ou plusieurs fluides en présence sont compressibles, les densités de ces fluides dépendent des pressions des fluides. Certains auteurs ont fait le choix d'évaluer la densité en fonction de la pression de la phase ([Chavent, 2009]). Amaziane [Amaziane et al., 2011a] a montré que les densités peuvent être évaluées à la pression globale.

Proposition 7. *On peut également exprimer ces équations à l'aide de la formulation flux fractionnaire en pression globale pour un système diphasique compressible :*

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \frac{\partial}{\partial t} (B_{n\omega}(\rho_{n\omega})S_{n\omega} + B_{\omega}(\rho_{\omega})S_{n\omega}) + \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \\ \mathbf{v} = -d\mathbf{K} \cdot [\omega \nabla P - \bar{\rho}g \nabla Z] \\ P = P_{n\omega} + P_c^g \\ P_c^g(S_{\omega}) = - \int_0^{S_{n\omega}} \nu_{\omega} \frac{\partial P_c}{\partial S_{n\omega}} dS_{n\omega} \\ P_c = P_{n\omega} - P_{\omega} \end{array} \right. \quad (1.58)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \frac{\partial S_{n\omega}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}_{n\omega} = 0 \\ \mathbf{v}_{n\omega} = \nu_{n\omega} \mathbf{v} + \nu_{\omega} \nu_{n\omega} d(\rho_{n\omega} - \rho_{\omega}) \mathbf{K} \cdot \nabla z - \nu_{\omega} \nu_{n\omega} d \frac{dP_c}{dS_{n\omega}}(S_{n\omega}) \mathbf{K} \cdot \nabla S_{n\omega} \\ S_{\omega} + S_{n\omega} = 1 \end{array} \right. \quad (1.59)$$

On trouvera dans l'annexe A plus de détails sur la construction du système diphasique en pression globale.

Proposition 8. *En particulier, lorsque les fluides en présence sont incompressibles, on a :*

- $B_j = 1$
- $\nu_j = f_j$
- $\rho_j(p) = \rho_j$
- $\frac{\partial P_c^g}{\partial p}(S_1, p) = 0$
- $\omega = 1$

(1.60)

Dans toute la suite, on supposera que $\sigma = 1[m^2]$.

Conclusion

Dans ce premier chapitre, nous avons introduit les équations usuelles de l'écoulement multiphasique de fluide en milieu poreux. Les modèles hydrologiques dont sont issus ces résultats sont le fruit de plus d'un siècle de recherches en hydrogéologie sur le terrain, en laboratoire sur des échantillons ou en bassin d'expérimentation. En ce qui concerne la question de l'évolution des systèmes, la mécanique des fluides ainsi que les mathématiques, à travers l'analyse numérique, permettent de modéliser de mieux en mieux le devenir des hydrosystèmes. Il est donc naturel de nous interroger, dans la section suivante, sur l'existence de solutions au cours du temps pour les équations posées dans le premier chapitre. Enfin nous proposerons une résolution numérique sous certaines conditions aux limites.

-

Analyse numérique relative aux écoulements multiphasiques de fluides incompressibles

Dans le chapitre précédent, nous avons proposé un modèle d'écoulement incompressible en milieu poreux à partir de plusieurs hypothèses simplificatrices. Comme bien souvent en modélisation, la question n'est pas de reproduire la réalité le plus finement possible, mais de proposer un modèle bien posé mathématiquement et qui soit suffisamment précis pour décrire des phénomènes physiques à l'échelle d'étude. Quel est donc l'intérêt d'un problème bien posé? Tout l'enjeu réside dans la convergence des variables vers les solutions physiques, avec des moyens de calculs et des temps les plus faibles possibles qui n'altèrent pas l'acceptabilité des solutions. Ainsi, on pourra trouver dans la littérature de nombreuses modélisations de processus de transport, d'écoulement ou de réaction aboutissant, selon les hypothèses avancées, à des systèmes d'équations aux dérivées partielles de nature paraboliques, hyperboliques ou elliptiques, comme c'est le cas de notre équation en pression globale. Une fois le problème posé et les résultats de convergence établis, nous détaillerons le schéma de résolution Implicite Pression Explicite Saturation (IMPES) utilisé pour résoudre les équations de pression globale et de saturation dans le cas triphasique incompressible. Ce schéma tient compte des effets gravitaires dans l'équation de pression ainsi que dans les parties convective et diffusive de l'équation de saturation.

2.1 Conditions aux limites

La résolution analytique ou numérique d'un système est dépendante des caractéristiques du système à ses frontières. Nous devons avant tout analyser les valeurs possibles de variables primaires aux bords du domaine. Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un domaine fixé sur le modèle d'un puit d'injection et de pompage, aux frontières $\Gamma = \Gamma_e \cup \Gamma_s \cup \Gamma_l$ (d'après le schéma 2.1), avec Γ_e le puit d'injection, Γ_s le puit de production et Γ_l les frontières imperméables.

On impose sur la pression globale :

- Des conditions de Neumann en Γ_l : $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$
- Des conditions de Dirichlet $p = p_e$ ou de Neumann $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v}_e$ sur Γ_e

On en déduira les valeurs de la pression sur Γ_s connaissant la densité en tout point du domaine.

Remarque : Si plusieurs fluides sont en présence à la frontière, alors on a égalité des pressions ([Chavent and Jaffré, 1986]). On utilisera uniquement la condition de Dirichlet pour les saturations aux frontières. Il faudra imposer prudemment les valeurs de saturation selon la physique du problème, en particulier en cas d'injection d'une phase à travers Γ_e ($S \equiv 1$), puisqu'une autre phase pourra également aller à contre-courant. De même, au bout d'un certain temps de production d'huile, une autre phase pourra aussi traverser Γ_s . On pose également l'intervalle de temps $]0, T[$, $T > 0$.

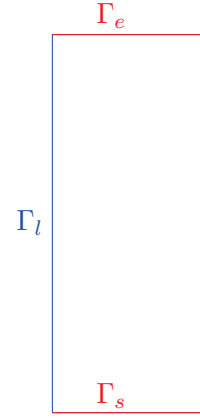


FIGURE 2.1 – Conditions aux limites

Le système d'équations à résoudre en écoulement triphasique compressible s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \frac{\partial(\sum_j^3 B_j(P_j)S_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}) = 0 \\ \mathbf{v} = -d\mathbf{K} \cdot \left[\left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \right) \nabla P - \bar{\rho}g\nabla Z \right] \\ P(\mathbf{x}, t) = P_2(\mathbf{x}, t) + P_c^g(S_1(\mathbf{x}, t), S_3(\mathbf{x}, t), p(\mathbf{x}, t)) \\ \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = v_e \quad \text{sur} \quad \Gamma_e \\ P = P_s \quad \text{sur} \quad \Gamma_s \\ \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma_l \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \phi \frac{\partial(B_j(P_j)S_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_j) = 0 \\ \mathbf{v}_j = -dv_j\mathbf{K} \cdot (\nabla P_j - \rho_j(P_j)g\nabla Z) \\ \sum_j^3 S_j = 1 \\ (S_{1,e}, S_{3,e}) \quad \text{sur} \quad \Gamma_e \end{array} \right.$$

Depuis les travaux de Chavent et Jaffré en 1987, de nombreux écrits sur l'existence et l'unicité de solutions de l'écoulement multiphasique de fluides ont été publiés ([Amaziane et al., 2011b], [Khalil and Saad, 2010], [Khalil and Saad, 2011]).

2.2 Existence de solution pour l'écoulement diphasique incompressible dégénéré

Sous certaines hypothèses de compressibilité, il est possible, à l'aide d'éléments d'analyse fonctionnelle et notamment du théorème de Lax-Milgram (cf [Brezis, 1983]), de prouver l'existence et l'unicité de solutions pour un écoulement faiblement compressible d'huile dans un milieu poreux déformable (écoulement monophasique non saturé). On trouvera une démarche détaillée de ce résultat dans le chapitre deux de [Chavent and Jaffré, 1986].

Todd et Arbogast ont élaboré un modèle d'écoulement diphasique immiscible incompressible en milieu poreux avec plusieurs types de conditions aux limites ([Arbogast, 1992]). En 2008, Galusinski et Saad ont proposé un modèle d'écoulement immiscible compressible avec densité dépendante de la pression globale ([Galusinski and Saad, 2008]).

En 2011, puis en 2012, les travaux d'Amaziane et al. ([Amaziane et al., 2011b]) prouvent l'existence de solution pour un écoulement compressible immiscible gaz-eau, avec différentes

conditions aux limites.

Nous allons présenter un exemple de preuve pour l'existence et l'unicité de solution en écoulement diphasique incompressible. Ce développement ne se veut pas exhaustif, il donne un aperçu d'une technique de démonstration d'existence.

2.2.1 Formulation en flux fractionnaire pour un système diphasique

Tout au long du chapitre, nous supposons que les fluides en présence sont incompressibles. D'après 1.58, et 1.60, la formulation flux fractionnaire pression globale en système diphasique huile-eau s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \nabla \cdot (\mathbf{v}) = 0 \\
 \mathbf{v} = -\psi \cdot [\nabla P - \bar{\rho}g\nabla Z] \quad \psi = d\mathbf{K} \\
 P(\mathbf{x}, t) = P_2(\mathbf{x}, t) + P_c^g(S_1(\mathbf{x}, t), p(\mathbf{x}, t)) \\
 \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = v_e \quad \text{sur} \quad \Gamma_e \\
 \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \lambda(P - P_e) \quad \text{sur} \quad \Gamma_s \\
 P = P_s \quad \text{sur} \quad \Gamma_s \\
 \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma_l
 \end{array} \right. \tag{2.1}$$

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \phi \frac{\partial S_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_2) = 0 \\
 \mathbf{v}_2 = \mathbf{v}f_2 + f_1f_2(\rho_2 - \rho_1)g\psi \cdot \nabla Z - f_1f_2d\frac{dP_c^{12}}{dS_2}\psi \cdot \nabla S_2 \\
 S_1 + S_2 = 1 \\
 S_{2,e} \quad \text{sur} \quad \Gamma_e \\
 S_{2,s} \quad \text{sur} \quad \Gamma_s
 \end{array} \right.$$

Dans [Chavent and Jaffré, 1986], les auteurs imposent moins de contraintes sur la pression capillaire, et supposent qu'elle s'écrit en fonction de la pression capillaire et d'un facteur d'échelle $P_{CM}(\mathbf{x}) \in [0 : 1]$ en chaque point du domaine : $P_c = P_{CM}(\mathbf{x})P_c(S_2)$. On pose :

$$\left\{ \begin{array}{l} a(S_2) = -f_1 f_2 \frac{dP_c^{12}}{dS_2} \\ \alpha = \int_1^{S_2} a(t) dt \\ b_0 = f_1 \\ b_1 = f_1 f_2 dP_c^{12} \\ b_2 = f_1 f_2 d(\rho_2 - \rho_1) \\ \gamma_0 = \int_{S_2}^1 f_1 \frac{dP_c^{12}}{dS_2} \\ \gamma_1 = \int_{S_2}^1 f_1' \frac{dP_c^{12}}{dS_2} dS_2 \\ \gamma_2 = f_1 \rho_1 + f_2 \rho_2 \end{array} \right. \quad (2.2)$$

Afin de prouver l'existence de solution, on fait les hypothèses suivantes : il existe $m > 0$ tel que

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi, \psi \in L^\infty(\Omega) = \{u \in \Omega \mid \exists C \in \mathbb{R}, |u(\mathbf{x})| \leq C \ \forall \mathbf{x} \in \Omega\} \\ \phi(\mathbf{x}) \geq m, \ \psi(\mathbf{x}) \geq m \quad \text{presque partout sur } \Omega \\ \mathbf{v}_j \in L^2(\Omega \times]0, 1[) \quad L^2(\Omega) = \{u \in \Omega \mid \|u\|_{L^2}^2 = \int_\Omega |u(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} < \infty \} \\ v_e \in L^\infty(\Gamma_e) \\ \lambda \in L^\infty(\Gamma_s) \\ \lambda \geq m^2 \quad \text{presque partout sur } \Omega \end{array} \right. \quad (2.3)$$

On suppose que d, α, a, β, b_j ($j=0,1,2$), γ_j ($j=0,1,2$) sont des fonctions continues, bornées de \mathbb{R} dans \mathbb{R} telles que :

$$\left\{ \begin{array}{l} d(S_2) \geq m \\ a(S_2) = \alpha'(S_2) \geq 0 \ \forall S_2 \in]0 : 1[\\ \beta = \sqrt{\int a(s)} \\ b_0(S_2) \in]0 : 1[\end{array} \right. \quad (2.4)$$

Notons que pour les modèles proposés de Van Genuchten (VG) ou de Brooks-Corey (BC), les hypothèses ci-dessous sont toutes satisfaites.

2.2.2 Formulation variationnelle

Soient l'espace de Hilbert $H^1(\Omega) = \{u \in \Omega \mid \int_{\Omega} |u(\mathbf{x})|^2 + |\nabla u(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} < \infty\}$ et $\|u\|_{H^1} = (\|u\|_{L^2}^2 + \|\nabla u\|_{L^2}^2)^{1/2}$ une norme associée.

Soit l'ensemble :

$$U = \{u \in H^1(\Omega), |u|_{\Gamma_e} = 0\} \quad ; \quad \|u\|_U = \int_{\Omega} |\nabla u|^2 d\mathbf{x} \quad ; \quad H = L^2(\Omega) \quad (2.5)$$

On définit un produit scalaire sur H : $\langle u, v \rangle_{\phi} = \int_{\Omega} \phi u v d\mathbf{x}$, et la norme qui en découle.

Soit :

$$\mathcal{U} = L^2(]0 : T[; U) \quad \text{de norme} \quad \|u\|_{\mathcal{U}}^2 = \int_0^T \|u(\mathbf{x}, t)\|_U^2 dt \quad (2.6)$$

$$\mathcal{K} = \langle u \in \mathcal{U} \mid |u|_{\Gamma_s} \geq 0 \rangle \quad (2.7)$$

Et enfin :

$$W = \left\langle u \in \mathcal{U} \mid \frac{du}{dt} \in L^2(]0 : T[; \mathcal{U}') \right\rangle \quad (2.8)$$

La formulation variationnelle pour ce problème est :

Trouver $(S_2(\mathbf{x}, t), P) \in (W \times L^2(]0 : T[; H^1(\Omega)))$ tel que \mathcal{P} :

$$\left\{ \begin{array}{l} - \int_{\Omega} \mathbf{v} \nabla w d\mathbf{x} + \lambda \int_{\Gamma_s} (P - P_s) w d\mathbf{x} = \int_{\Gamma_e} v_e w d\Gamma \quad \forall w \text{ in } H^1(\Omega) \text{ presque partout }]0 : 1[\\ \mathbf{v} = -d(S_2(\mathbf{x}, t))\psi \cdot [\nabla P + \gamma_1 b_1 + \gamma_2 b_2] \\ S_2(\mathbf{x}, t) \in W \\ \left\langle \frac{dS_2}{dt}, u - S_2 \right\rangle_{\phi} + \int_{\Omega} \mathbf{v}_2 \cdot \nabla (u - S_2) \geq 0 \quad \forall u \in K \quad \forall t \in]0 : T[\\ S_2(\mathbf{x}, 0) = S_{2,0}(\mathbf{x}) \end{array} \right. \quad (2.9)$$

Ce problème se rapproche d'un problème de type elliptique, souvent résolu à l'aide du théorème de Lax-Milgram. Le problème ne peut être résolu en l'état à cause du défaut de coercivité dû à la dégénérescence du terme diffusif. Pour remédier à cela, il est courant de faire des hypothèses supplémentaires : les deux théorèmes qui suivent sont issus de [Chavent and Jaffré, 1986].

Lemme de compacité

Supposons qu'il existe $\theta \in]0 : 1]$ tel que

$$\sup_{0 \leq \zeta \leq \xi \leq 1} \frac{\xi - \zeta}{\int_{\zeta}^{\xi} \sqrt{a(\tau)} d\tau} < \infty \quad (2.10)$$

Alors pour tout $M > 0$, $S_M = \{u \in L^2(\Omega \times]0 : T[) \mid 0 \leq S(\mathbf{x}, t) \leq 1 \text{ presque partout sur } \Omega \times]0 : T[\}$ et $\gamma_0(S_M)$ sont relativement compacts dans $L^2(\Gamma)$.

Théorème 1. *Supposons que le Lemme de compacité précédent est vérifié et que pour $j=1,2$:*

$$\sup_{0 \leq \zeta \leq 1} \left(\frac{b_j}{\beta(\zeta)} \right) < \infty \quad (2.11)$$

Alors le problème 2.9 admet une unique solution (S,P) .

2.3 Schéma numérique de résolution des équations d'écoulement triphasiques incompressibles

Parmi les diverses méthodes numériques ayant fait leurs preuves, on peut citer les méthodes des Eléments Finis, des Volumes Finis, la méthode fully-implicit Galerkin. La méthode des Eléments Finis Mixtes Hybrides (EFMH [Chavent and Jaffré, 1986], [Huber and Helmig, 1999]) a été retenue pour la résolution de l'équation de pression globale. L'hybridisation associée au flux conduit à un système linéaire en traces de pression (voir description précise dans la section suivante 2.4). Les équation de saturation (1.55) sont traitées en résolvant la partie diffusives avec la méthode des Eléments Finis Mixtes Hybrides de manière similaire, et la partie convective avec la méthode des éléments finis discontinus (dans la section 2.5.1). Les deux parties sont traitées l'une à la suite de l'autre par séparation d'opérateur. Le pas de temps diffusif est divisé en n_c pas de temps convectifs : $\Delta t^d = n_c \times \Delta t^c$.

Le pas de temps convectif est déterminé de sorte que la condition CFL soit inférieure à 1 :

$$C = \frac{\Delta t}{\Delta \mathbf{x}} \max_{S \in [0,1]} \|\lambda(S)\|, \quad (2.12)$$

avec $\lambda(S) = \frac{v}{\phi} \frac{\partial F}{\partial S}(S)$ ([LeVeque, 2002]) et $F(S) = f_j \mathbf{v} - f_j d\mathbf{K} \cdot [\bar{\rho} - \Delta \rho_j] g \nabla Z$

D'où :

$$\frac{v \Delta t}{\phi \Delta \mathbf{x}} \max_{S \in [0,1]} \left\| \frac{\partial F}{\partial S} \right\| \leq C = 1. \quad (2.13)$$

Le système est régi par deux opérateurs :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (\mathcal{L}_{conv} + \mathcal{L}_{diff})(u) = 0 \quad (2.14)$$

que l'on résout séparément avec un schéma d'Euler d'ordre un :

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t^d} + \mathcal{L}_{diff}(u) = 0 \quad \frac{u^{k+1} - u^k}{\Delta t^c} + \mathcal{L}_{conv}(u) = 0 \quad (2.15)$$

La résolution des deux parties pression globale-saturation n'est pas simultanée, mais s'inscrit dans un schéma numérique IMPES ([Huber and Helmig, 1999]). Son principe est de résoudre la pression implicitement et la saturation explicitement. Cependant, d'après [Helmig, 1997], ce schéma est optimal lorsque les effets diffusifs ne sont pas dominants.

2.3.1 Linéarisation du système

Du fait des fortes non-linéarités présentes dans les équations à travers les variables secondaires, nous sommes amenés à employer une technique de linéarisation. La méthode de PICARD [Celia and Binning, 1992] qui a été mise en oeuvre pour le code MPTRACES repose sur

l'itération du schéma IMPES jusqu'à atteindre le critère :

$$\max \|TC^{k+1} - TC^k\| < \epsilon_1 + \epsilon_2 \|TC^{k+1}\| \quad (2.16)$$

avec $\|TC^{k+1}\| = \max \left(\max_{N_f} (|TP^{k+1}|), \max_{N_f} (|S_1^{k+1}|), \max_{N_f} (|S_3^{k+1}|) \right)$ et ϵ_1, ϵ_2 deux constantes

fixées.

L'adaptation du pas de temps dans la méthode de PICARD est essentielle car elle permet de trouver un pas de temps optimal sachant que la méthode impose de grands pas de temps. Le nombre d'itération maximum $N_{iter,max}$ et minimum $N_{iter,min}$ exigés sont fixés et on procède comme suit :

- Si $N_{iter} > N_{iter,max}$, le pas de temps est diminué ;
- Si $N_{iter} < N_{iter,min}$, le pas de temps est augmenté ;
- Si $N_{iter,min} < N_{iter} < N_{iter,max}$, le pas de temps reste inchangé.

2.3.2 Schéma numérique

Le schéma numérique est résumé dans la figure 2.2 et se déroule de manière suivante :

1. On commence par initialiser le système, avec les conditions aux limites.
2. A chaque pas de temps, les variables secondaires, fonctions de la saturation et de la pression, sont mises à jour d'après le pas de temps précédent t^n .
3. On résout la pression en commençant par les traces de pression TP^{n+1} , puis on en déduit le flux Q^{n+1} et la pression moyenne sur la maille P^{n+1} .
4. On résout la partie diffusive de l'équation de saturation en calculant les traces de saturation (diffusion capillaire), puis on en déduit le flux diffusif et la saturation moyenne S_{diff}^{n+1} .
5. Calcul de la partie convective de l'équation de saturation $S_{conv}^{n+1,k}$, et stabilisation de la solution par limiteur de pente de Chavent [Chavent and Jaffré, 1986]. On répète le processus pour les n_c pas de temps convectifs.
6. Couplage des termes diffusifs et convectifs pour obtenir la solution S^{n+1} .
7. Linéarisation de PICARD : si la convergence est atteinte, adaptation du pas de temps, retour à l'étape 1. Sinon retour à l'étape 3 avec $k=k+1$.

Ainsi la saturation est-elle mise à jour explicitement à chaque pas de temps.

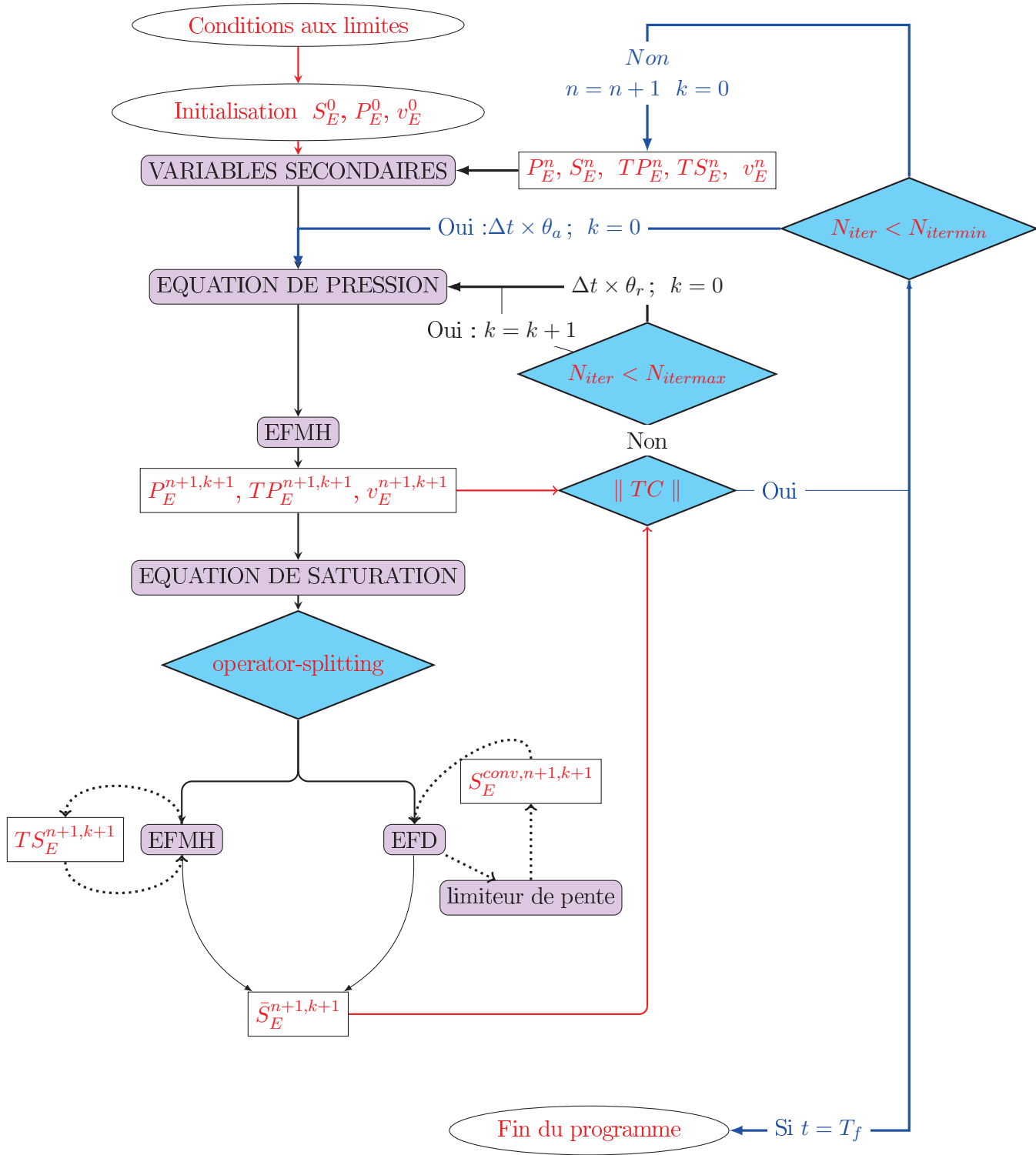


FIGURE 2.2 – Schéma IMPES

1

1. $\theta_r = 0.5, \theta_a = 2$ si $N_{iter} < N_{itermin}$, $\theta_a = 1$ sinon.

2.4 Discrétisation de l'équation de pression globale par la méthode des EFMH

2.4.1 Espace de Raviart-Thomas

Pour cette étude, nous avons discrétisé les équations sur un maillage triangulaire. Comme établi dans [Raviart, 1984], l'espace de Raviart-Thomas d'ordre k sur l'élément E est défini :

$$\mathbb{RT}_k^n(E) = \mathcal{P}_k(E)^n + \mathbf{x}\mathcal{P}_k(E)^n$$

Ainsi, l'espace $\mathbb{RT}_0(E)$ est généré par des polynômes vectoriels \mathbf{u}_j (schématisés en 2.3) de degré un dont la base est :

$$\mathbb{RT}_0^2 = \left\{ \begin{pmatrix} u \\ v-1 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} u-1 \\ v \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \right\}$$

De plus, en notant \mathbf{n}_i la normale aux côtés, ils vérifient :

$$\begin{aligned} \bullet \nabla \cdot \mathbf{u}_j &= \frac{1}{|E|} & \bullet (\mathbf{u}_j \cdot \mathbf{n}_i) &= \begin{cases} \frac{1}{|\partial E|} & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \\ \bullet \int_E \nabla \cdot \mathbf{u}_j &= 1 & \bullet \int_{\partial E_j} (\mathbf{u}_j \cdot \mathbf{n}_i) d\Gamma &= \delta_{ij}. \end{aligned}$$

Rappelons l'équation de pression en écoulement compressible d'après 1.54 et 1.60 :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \\ \mathbf{v} = -d\mathbf{K} \cdot [\nabla P - \bar{\rho}g\nabla Z] \\ P(\mathbf{x}, t) = P_2(\mathbf{x}, t) + P_c^g(S_1(\mathbf{x}, t), S_3(\mathbf{x}, t), P(\mathbf{x}, t)) \end{cases} \quad (2.17)$$

On pose $\Lambda_{\bar{\rho}} = \bar{\rho}g$ en système incompressible.

On note P_E l'approximation de la valeur moyenne de la pression sur l'élément E (respectivement $S_{E,j}$ l'approximation de la valeur moyenne de la saturation de la phase j), TP_i l'approximation de la trace de pression resp. $TS_{j,i}$ l'approximation de la trace de saturation de la phase j sur E_i (la i -ème facette de E).

On approxime la vitesse volumique \mathbf{v} par \mathbf{v}_E sur la base $\mathbb{RT}_0^2(E)$:

$$\mathbf{v}_E = \sum_{i=1}^3 Q_{Ei} \mathbf{u}_i, \quad (2.18)$$

avec Q_{Ei} le flux à travers E_i

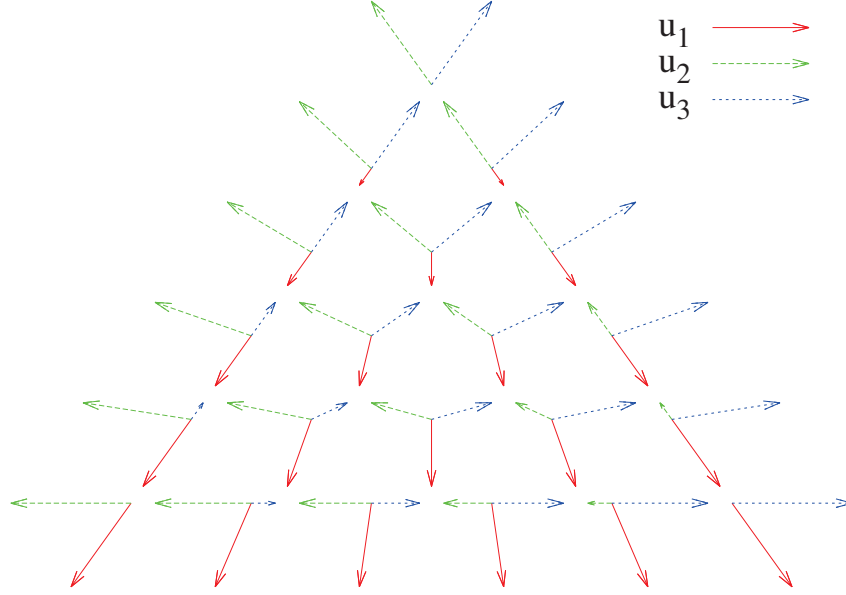


FIGURE 2.3 – Espace de Raviart-Thomas

De même, on approxime d , $\Lambda_{\bar{\rho}}$ sur E : d_E , $\Lambda_{\bar{\rho},E}$. $\Lambda_{\bar{\rho},E}$ et d_E dépendent uniquement de la saturation.

2.4.2 Formulation variationnelle de l'équation de pression

L'approximation du flux sur E nous donne :

$$\mathbf{v}_E = -[d_E \mathbf{K}] (\nabla P_E - \Lambda_{\bar{\rho},E} \nabla Z) \quad (2.19)$$

En multipliant par $\mathbf{u}_i \in H(\text{div}, E)$ ([Huber and Helmig, 1999], [di Chiara R., 2009]) et en intégrant sur E :

$$\int_E (\nabla P_E - \Lambda_{\bar{\rho},E} \nabla Z) \cdot \mathbf{u}_i dx = - \int_E [d_E \mathbf{K}]^{-1} \mathbf{v}_E \cdot \mathbf{u}_i dx \quad (2.20)$$

Dans un deuxième temps, on relie le flux total aux pressions via la relation 2.17 sur E :

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2.21)$$

Remarque :

En considérant que l'eau et l'huile comme incompressibles, et l'air comme un gaz parfait, et en négligeant la pression capillaire gaz-huile par rapport à la pression globale, il est possible de tenir compte de la compressibilité du gaz et de simplifier l'expression de B_3 :

$$B_3 = c_3 P_3 = c_3 (P - P_c^g) \quad (2.22)$$

On approxime ensuite la relation de compressibilité 2.21 sur E , et par le théorème on multiplie par $v \in L^2(E)$ et on intègre sur E :

$$\int_E (\nabla \cdot \mathbf{v}_E) v d\Omega = 0 \quad (2.23)$$

Finalement, la formulation faible de résolution de la pression s'écrit :

On cherche $(\mathbf{v}_E, \mathbf{P}_E) \in (\mathbb{RT}_0^2(E) \times L^2(E))$, tel que $\forall (\mathbf{u}_i, v) \in (\mathbb{RT}_0^2(E) \times L^2(E))$:

$$\boxed{\begin{cases} \int_E (\nabla P_E - \Lambda_{\bar{\rho}, E} \nabla Z) \cdot \mathbf{u}_i d\Omega = - \int_E [d_E \mathbf{K}]^{-1} \mathbf{v}_E \cdot \mathbf{u}_i d\Omega \\ \int_E (\nabla \cdot \mathbf{v}_E) v d\Omega = 0 \end{cases}} \quad (2.24)$$

2.4.3 Discrétisation du flux associé à la pression globale

On commence par réécrire la première égalité du système 2.24 en fonction des valeurs du flux aux facettes :

$$\sum_{j=1}^3 Q_{E_j} \int_E [d_E \mathbf{K}]^{-1} \mathbf{u}_j \cdot \mathbf{u}_i d\Omega = \int_E \Lambda_{\bar{\rho}, E} \nabla Z \cdot \mathbf{u}_i d\Omega - \int_E \nabla P_E \cdot \mathbf{u}_i d\Omega = 0$$

On applique la formule de Green sur le membre de droite $\forall \mathbf{u}_i \in \mathbb{RT}_0^2(E)$:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^3 Q_{E_j} \frac{1}{d_E} \int_E \mathbf{u}_j \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{u}_i d\Omega \\ &= P_E \int_E \nabla \cdot \mathbf{u}_i d\Omega - \int_{\partial E} T P_E \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}_{\partial E} d\Gamma + \Lambda_{\bar{\rho}, E} \int_E \nabla Z \cdot \mathbf{u}_i d\Omega \\ &= P_E \int_E \nabla \cdot \mathbf{u}_i d\Omega - \sum_{j=1}^3 \int_{\partial E_j} T P_{E_j} \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}_j d\Gamma + \Lambda_{\bar{\rho}, E} \int_E \nabla Z \cdot \mathbf{u}_i d\Omega \end{aligned} \quad (2.25)$$

avec

$$\mathbf{B}_{Eji} = \int_E \frac{1}{d_E} \mathbf{u}_j \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{u}_i d\Omega \quad (2.26)$$

et

$$G_{Ei} = \int_E \nabla Z \cdot \mathbf{u}_i d\Omega \quad (2.27)$$

Par les propriétés sur \mathbf{u}_i dans la section 2.4.1 on obtient :

$$\sum_{j=1}^3 Q_{Ej} B_{Eji} = P_E - TP_{Ei} + \Lambda_{\bar{\rho},E} G_{Ei} \quad (2.28)$$

Sachant la matrice B_{Eji} inversible, on peut exprimer sur ∂E :

$$Q_{Ej} = \sum_{i=1}^3 B_{Eji}^{-1} (P_E - TP_{Ei}) + \Lambda_{\bar{\rho},E} \sum_{i=1}^3 B_{Eji}^{-1} G_{Ei} \quad (2.29)$$

2.4.4 Discrétisation du terme de gravité dans l'équation de pression globale

L'implémentation du terme de gravité dans l'équation de pression se fait à partir des termes :

$$G_{Ei} = \int_E \nabla Z \cdot \mathbf{u}_i d\Omega \quad (2.30)$$

$$\boxed{\Lambda_{\bar{\rho},E} = [f_\omega(S)\rho_\omega + f_{n\omega}(S)\rho_{n\omega}]g} \quad (2.31)$$

Et plus précisément, l'évaluation des termes G_{Ei} pour une maille triangulaire E de sommets (x_1, z_1) , (x_2, z_2) et (x_3, z_3) vaut :

$$\begin{pmatrix} G_{E,1} \\ G_{E,2} \\ G_{E,3} \end{pmatrix} = -\frac{1}{6} \begin{pmatrix} (z_1 - z_3) + (z_2 - z_3) \\ (z_3 - z_2) + (z_1 - z_2) \\ (z_2 - z_1) + (z_3 - z_1) \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

Sachant que les flux fractionnaires dépendent uniquement de la saturation dans la maille, nous avons proposé d'évaluer celle-ci au centre de la maille :

$$\boxed{S = S_E} \quad (2.33)$$

La pertinence de ce choix sera testée au chapitre 4.

2.4.5 Discrétisation de la pression globale

La relation d'incompressibilité 2.21 s'écrit également, en intégrant sur E :

$$\int_E \nabla \cdot \mathbf{v}_E d\Omega = 0 \quad (2.34)$$

et en appliquant le théorème de Green :

$$\int_{\partial E} \mathbf{v}_E \cdot \mathbf{n}_E d\Gamma = 0 \quad (2.35)$$

Dans un deuxième temps, cela se traduit par :

$$\sum_{i=1}^3 Q_{E_i} \int_{\partial E} \mathbf{u}_i \mathbf{n}_{E_i} d\Omega = 0 \quad (2.36)$$

Et enfin par définition des \mathbf{u}_i :

$$\sum_{i=1}^3 Q_{E_i} = 0$$

Ensuite, on applique un schéma d'Euler implicite, avec $t \in [0, T]$:

$$t_n = n\Delta t = n\frac{T}{N}, \forall n \in [0, n]$$

tel que :

$$\sum_{i=1}^3 Q_{E_i}^{n+1} = 0 \quad (2.37)$$

Et on injecte dans cette relation l'expression des flux aux facettes au temps t^{n+1} d'après 2.29 :

$$\sum_{i,j=1}^3 B_{E_{ij}}^{-1} (P_E^{n+1} - TP_{E_j}^{n+1}) + \Lambda_{\bar{\rho},E} \sum_{i,j=1}^3 B_{E_{ij}}^{-1} G_{E_j} = 0 \quad (2.38)$$

Et P_E^{n+1} s'écrit finalement :

$$P_E^{n+1} = \frac{\sum_{i,j=1}^3 B_{E_{ij}}^{-1} TP_{E_j}^{n+1} - \Lambda_{\bar{\rho},E} \sum_{i,j=1}^3 B_{E_{ij}}^{-1} G_{E_j}}{\left[\sum_{i,j=1}^3 B_{E_{ij}}^{-1} \right]} \quad (2.39)$$

2.4.6 Evaluation de la pression aux frontières et hybridisation

Enfin, pour achever la méthode, on exprime la valeur des flux en fonction des conditions aux limites, et des pressions calculées à t^{n+1} (hybridisation). Ainsi, pour deux facettes voisines E et E' :

- Conditions de Dirichlet sur Γ_s : $\text{TP}_{E_j}^{n+1} = \text{TP}_D$
- Conditions de Neumann sur Γ_e : $Q_{Ei} = Q_N$
- Continuité des traces de pression sur toutes les facettes intérieures du maillage :

$$\text{TP}_{Ei}^{n+1} = \text{TP}_{E'i}^{n+1} \quad (2.40)$$

- Continuité des flux aux facettes :

$$\begin{aligned} Q_{Ei}^{n+1} + Q_{E'i}^{n+1} = 0 \Leftrightarrow \\ \sum_{j=1}^3 B_{Eij}^{-1} P_E^{n+1} - \sum_{j=1}^3 (B_{Eij})^{-1} \text{TP}_{E_j}^{n+1} + \Lambda_{\bar{\rho},E} \sum_{j=1}^3 (B_{Eij})^{-1} G_{E_j} \\ + \sum_{j=1}^3 B_{E'ij}^{-1} P_{E'}^{n+1} - \sum_{j=1}^3 (B_{E'ij})^{-1} \text{TP}_{E',j}^{n+1} + \Lambda_{\bar{\rho},E} \sum_{j=1}^3 (B_{E'ij})^{-1} G_{E',j} = 0 \end{aligned} \quad (2.41)$$

Notons :

- $\alpha_{Ei} = \sum_{j=1}^3 (B_{Eij})^{-1}$
- $\alpha_E = \sum_{i,j=1}^3 (B_{Eij})^{-1}$

L'expression de la pression 2.39 au temps t^{n+1} se simplifie :

$$P_E^{n+1} = \frac{\sum_{i,j=1}^3 B_{Eij}^{-1} \text{TP}_{E_j}^{n+1} - \Lambda_{\bar{\rho},E} \sum_{i,j=1}^3 B_{Eij}^{-1} G_{E_j}}{\alpha_E} \quad (2.42)$$

L'égalité 2.41 se réécrit :

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_{Ei}}{\alpha_E} \left(\sum_{i,j=1}^3 B_{Eij}^{-1} \text{TP}_{E_j}^{n+1} - \Lambda_{\bar{\rho},E} \sum_{i,j=1}^3 B_{Eij}^{-1} G_{E_j} \right) - \alpha_{Ei} \text{TP}_{E_j}^{n+1} + \Lambda_{\bar{\rho},E} \alpha_{Ei} G_{E_j} \\ + \frac{\alpha_{E'i}}{\alpha_{E'}} \left(\sum_{i,j=1}^3 B_{E'ij}^{-1} \text{TP}_{E',j}^{n+1} - \Lambda_{\bar{\rho},E} \sum_{i,j=1}^3 B_{E'ij}^{-1} G_{E',j} \right) - \alpha_{E'i} \text{TP}_{E',j}^{n+1} + \Lambda_{\bar{\rho},E} \alpha_{E'i} G_{E',j} = 0 \end{aligned}$$

puis encore

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\alpha_{Ei}}{\alpha_E} \sum_{i,j=1}^3 B_{Eij}^{-1} - \alpha_{Ei} + \frac{\alpha_{E'i}}{\alpha_{E'}} \sum_{i,j=1}^3 B_{E'ij}^{-1} - \alpha_{E'i} \right) TP_{E_j}^{n+1} \\ & - \Lambda_{\bar{\rho},E} \left(\frac{\alpha_{Ei}}{\alpha_E} \sum_{i,j=1}^3 B_{Eij}^{-1} - \alpha_{Ei} \right) G_{E_j} - \Lambda_{\bar{\rho},E'} \left(\frac{\alpha_{E'i}}{\alpha_{E'}} \sum_{i,j=1}^3 B_{E'ij}^{-1} - \alpha_{E'i} \right) G_{E'_j} = 0 \end{aligned}$$

Nous noterons $\gamma_{E_i}^{n+1} = \frac{\alpha_{Ei}}{\alpha_E}$

On obtient au final un système algébrique dont les inconnues sont les traces de pression, à chaque iter $k+1$. En notant N_f le nombre total de facettes :

$$\boxed{(\mathcal{M}_P)_{N_f \times N_f} TP_{N_f}^{n+1,k+1} = \mathbf{F}_{N_f} - \mathbf{R}_{N_f}} \quad (2.43)$$

Et pour chaque facette i , la contribution de la maille E aux traces de pression s'écrit :

$$\left(\gamma_{E_i}^{n+1,k+1} \sum_{i,j=1}^3 (B_{Eij}^{n+1,k+1})^{-1} - \alpha_{E_i}^{n+1,k+1} \right) TP_{E_j}^{n+1,k+1} \quad (2.44)$$

Ainsi, le système mixte-hybride s'écrit :

► Matrice mixte-hybride \mathcal{M}_P

- Termes diagonaux m_{xx}

$$m_{xx} = m_{Eii} + m_{E'jj} : m_{Eii} = (\gamma_{E_i}^{n+1,k+1} - 1)(B_{Eii}^{n+1,k+1})^{-1} \quad (2.45)$$

- Termes spérique m_{xy}

$$\begin{aligned} m_{xy} &= m_{Eij} = 0 \text{ si la facette } i \in E \text{ et } j \notin E, \text{ sinon} \\ m_{xy} &= m_{Eij} : m_{Eij} = (\gamma_{E_i}^{n+1,k+1} - 1)(B_{Eij}^{n+1,k+1})^{-1} \end{aligned} \quad (2.46)$$

► Membre de droite \mathbf{F}_{N_f}

$$\begin{aligned} f_x &= -\Lambda_{\rho E} \left(\gamma_{E_i}^{n+1,k} \sum_{i,j=1}^3 (B_{Eij}^{n+1,k})^{-1} - \sum_{j=1}^3 (B_{Eij}^{n+1,k})^{-1} \right) G_{E_j} \\ & - \Lambda_{\rho E'} \left(\gamma_{E'_i}^{n+1,k} \sum_{i,j=1}^3 (B_{E'ij}^{n+1,k})^{-1} - \sum_{j=1}^3 (B_{E'ij}^{n+1,k})^{-1} \right) G_{E'_j} \end{aligned} \quad (2.47)$$

Le vecteur \mathbf{R}_{N_f} représente les flux imposés (condition de Neumann). Ainsi, si la facette i de l'élément E appartient à une limite à flux imposé (Γ_N), la composante r_{Ei} du vecteur \mathbf{R}_{N_f} sera telle que :

$$\begin{cases} r_{Ei} = -Q_N \text{ si la facette } i \subset \Gamma_N \\ r_{Ei} = 0 \text{ sinon} \end{cases} \quad (2.48)$$

2.5 Discrétisation de l'équation de saturation

2.5.1 Traitement du terme gravitaire dans l'équation de saturation

Le choix de séparer l'équation de saturation en deux parties convectives et diffusives et d'intégrer le terme gravitaire $f_1 f_2 d\mathbf{K}(\rho_2 - \rho_1)g\nabla Z$ dans la partie convective de l'équation de saturation en formulation flux fractionnaire n'est pas anodin :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \frac{\partial(S_2)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_2) = 0 \\ \mathbf{v}_2 = \underbrace{\mathbf{v}f_2 + f_1 f_2 d(\rho_2 - \rho_1)g\mathbf{K} \cdot \nabla Z}_{\text{partie convective}} - \underbrace{f_1 f_2 d \frac{dP_c^{12}}{dS_2} \mathbf{K} \cdot \nabla S_2}_{\text{partie diffusive}} \\ S_1 + S_2 = 1 \end{array} \right. \quad (2.49)$$

En effet, la nature convective du terme gravitaire suggère naturellement qu'il soit discrétisé de façon similaire au reste de la partie convective. D'autres ont fait le choix d'une intégration du terme gravitaire dans la partie diffusive comme terme puit-source ([Nayagum, 2001]). La pertinence de notre démarche sera discutée en détails dans le chapitre 3.

2.5.2 Discrétisation de la partie diffusive des équations de saturation

Rappelons en premier lieu l'expression de la partie diffusive des équations de saturations d'après 1.56 et 1.60 :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \frac{\partial(S_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_l) = 0 \quad l = 1, 3 \\ \mathbf{v}_l = -\nu_l d\mathbf{K} \cdot [\nabla(P_c^{l2} - P_c^g)] \\ \sum_{l=1}^3 S_l = 1 \end{array} \right. \quad (2.50)$$

On exprime tout d'abord le flux diffusif de la manière suivante :

$$\tilde{\mathbf{q}}_l = -\mathbf{h}_{l,E} \cdot \nabla S_l \quad \mathbf{h}_{l,E} = \nu_l d\mathbf{K} \cdot \frac{d(P_c^{l2} - P_c^g)}{dS_l} \quad (2.51)$$

Pour $l = 1, 3$, l'équation de saturation diffusive s'écrit :

$$\phi \frac{\partial(S_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{q}}_l) = 0 \quad l = 1, 3$$

L'approximation de la partie diffusive de l'équation sur E nous donne :

$$\tilde{\mathbf{q}}_{l,E} = -[\mathbf{h}_{l,E}] \cdot \nabla S_l = \sum_{j=1}^3 \tilde{Q}_{l,E_j} \tilde{\mathbf{u}}_j \quad (2.52)$$

Dans un second temps, on multiplie par $\tilde{\mathbf{u}}_i \in H(\text{div}, E)$ et on intègre sur E :

$$\int_E [\mathbf{h}_{l,E}]^{-1} \tilde{\mathbf{q}}_{l,E} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_i d\Omega = \int_E \nabla S_l \cdot \tilde{\mathbf{u}}_i d\Omega \quad (2.53)$$

Dans une troisième étape, on relie le flux diffusif aux saturations via la relation 2.50 sur E :

$$\phi \frac{\partial (S_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{q}}_l) = 0 \quad (2.54)$$

On approxime enfin ces relations sur E, on les multiplie par $v \in L^2(E)$ et on intègre sur E :

$$\phi \int_E \left(\frac{\partial S_{l,E}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{q}}_{l,E}) \right) v d\Omega = 0 \quad (2.55)$$

Finalement, la formulation faible de résolution des équations de saturation s'écrit :

On cherche $((\tilde{\mathbf{q}}_{1,E}, \tilde{\mathbf{q}}_{3,E}), (S_{1,E}, S_{3,E})) \in (\mathbb{RT}_0^2(E)^2 \times L^2(E)^2)$, tel que $\forall (\tilde{\mathbf{u}}_i, v) \in (\mathbb{RT}_0^2(E) \times L^2(E))$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_E [\mathbf{h}_{1,E}]^{-1} \cdot \tilde{\mathbf{q}}_{1,E} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_i d\Omega = \int_E \nabla S_1 \cdot \tilde{\mathbf{u}}_i d\Omega \\ \int_E [\mathbf{h}_{3,E}]^{-1} \cdot \tilde{\mathbf{q}}_{3,E} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_i d\Omega = \int_E \nabla S_3 \cdot \tilde{\mathbf{u}}_i d\Omega \\ \phi \int_E \left(\frac{\partial S_{3,E}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{q}}_{3,E}) \right) v d\Omega = 0 \\ \phi \int_E \left(\frac{\partial S_{1,E}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{q}}_{1,E}) \right) v d\Omega = 0 \end{array} \right. \quad (2.56)$$

2.5.3 Evaluation des flux fractionnaires et de la pression capillaire en fonction des traces de saturation

L'évaluation du terme de flux diffusif sur la maille E dépend des variables primaires de saturation :

$$\mathbf{h}_{l,E} = \nu_l d\mathbf{K} \cdot \frac{d(P_c^{l2} - P_c^g)}{dS_l} \quad (2.57)$$

dont on peut évaluer les pression capillaires analytiquement.

En posant $\sigma_D = \nu_l d \cdot \frac{d(P_c^{l2} - P_c^g)}{dS_l}$, une première démarche consisterait à prendre la valeur moyenne de saturation sur la maille pour l'évaluation de la pression capillaire :

Méthode A :

$$\sigma_D(S_l)_E = \sigma_D \left(\sum_{i=1}^3 \frac{TS_{l,E_i}}{3} \right) \quad (2.58)$$

Nous avons constaté une forte diffusion liée à cette formulation (voir chapitre 4), qui peut être partiellement réduite en diminuant le pas de temps. Nayuagum propose une évaluation à partir des valeurs au centre des facettes ([Nayuagum, 2001]) :

Méthode B :

$$\sigma_D(S_l)_E = \sum_{i=1}^3 \frac{\sigma_D(TS_{l,E_i})}{3} \quad (2.59)$$

Dans le chapitre 4, un cas-test sera étudié afin d'évaluer les deux méthodes.

2.5.4 Discrétisation du flux diffusif

On commence par réécrire la première égalité du système 2.56, avec $l = 1, 3$ (respectivement les phases eau et gaz) :

$$\sum_{j=1}^3 \tilde{Q}_{l,E_j} \int_E [\mathbf{h}_{l,E}]^{-1} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_j \cdot \tilde{\mathbf{u}}_i d\Omega = \int_E \nabla S_l \cdot \tilde{\mathbf{u}}_i d\Omega \quad (2.60)$$

On applique la formule de Green sur le membre de droite :

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^3 \tilde{Q}_{l,E_j} \int_E \tilde{\mathbf{u}}_j \mathbf{h}_{l,E}^{-1} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_i d\Omega \\ &= S_{l,E} \int_E \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_i d\Omega - \int_{\partial E} TS_{l,E_i} \tilde{\mathbf{u}}_i \cdot \mathbf{n}_{\partial E} d\Gamma \quad \forall \tilde{\mathbf{u}}_i \in \mathbb{RT}_0^2(E). \end{aligned}$$

Notons :

$$\tilde{B}_{l,E_{ji}} = \int_E (\tilde{\mathbf{u}}_j \mathbf{h}_{l,E})^{-1} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_i d\Omega \quad (2.61)$$

Par les propriétés sur $\tilde{\mathbf{u}}_i$ dans la section 2.4.1 on obtient :

$$\sum_{j=1}^3 \tilde{Q}_{l,E_j} \tilde{B}_{l,E_{ji}} = S_{l,E} - TS_{l,E_i} \quad (2.62)$$

Sachant la matrice \tilde{B} inversible, on exprime le flux diffusif sur ∂E_i :

$$\tilde{Q}_{l,E_j} = \sum_{i=1}^3 \tilde{B}_{l,E_{ji}}^{-1} (S_{l,E} - TS_{l,E_i}). \quad (2.63)$$

2.5.5 Discrétisation de l'équation de continuité

Dans un deuxième temps les deux derniers termes du système 2.56 se réécrivent, pour $l = 1, 3$:

$$\phi \int_E \frac{\partial S_l}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \tilde{Q}_{l,E_i} \int_E \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}}_i) v d\Omega = 0 \quad (2.64)$$

En supposant que $v = v_E$ est une fonction constante non nulle sur E et en divisant par v_E :

$$\phi|E| \frac{\partial S_{l,E}}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \tilde{Q}_{l,E_i} = 0 \quad (2.65)$$

Ensuite, on applique un schéma d'Euler implicite, avec $t \in [0, T]$:

$$t_n = n\Delta t = n \frac{T}{N}, \forall n \in [0, n]$$

tel que, pour $l = 1, 3$:

$$\phi|E| \frac{S_{l,E}^{n+1} - S_{l,E}^n}{\Delta t} + \sum_{i=1}^3 \tilde{Q}_{l,E_i}^{n+1} = 0 \quad (2.66)$$

On récupère de 2.63 la valeur de \tilde{Q}^{n+1} que l'on injecte dans l'égalité précédente :

$$\phi|E| \frac{S_{l,E}^{n+1} - S_{l,E}^n}{\Delta t} + \sum_{i,j=1}^3 \tilde{B}_{l,E_{ij}}^{-1} (S_{l,E}^{n+1} - TS_{l,E_j}^{n+1}) = 0$$

Et les $S_{l,E}^{n+1}$ s'écrivent finalement, pour $l = 1, 3$:

$$S_{l,E}^{n+1} = \frac{\frac{\phi|E|}{\Delta t} S_{l,E}^n - \sum_{i,j=1}^3 \tilde{B}_{l,E_{ij}}^{-1} T S_{l,E_j}^{n+1}}{\frac{\phi|E|}{\Delta t} + \sum_{i,j=1}^3 \tilde{B}_{l,E_{ij}}^{-1}} \quad (2.67)$$

2.5.6 Evaluation de la saturation aux frontières et hybridisation

En dernier lieu, pour achever la méthode, on exprime la valeur des flux en fonction des conditions aux limites, et des saturations calculées à t^{n+1} : c'est l'hybridisation. Ainsi, pour deux facettes voisines E et E' :

- Conditions de Dirichlet sur Γ_e : $\text{TS}_{E_j}^{n+1} = \text{TS}_D$
- Conditions de Neumann sur Γ_s : $\tilde{Q}_{E_i} = \tilde{Q}_N$
- Continuité des traces de saturation sur toutes les facettes intérieures du maillage :

$$\text{TS}_{E_i}^{n+1} = \text{TS}_{E'_i}^{n+1} \quad (2.68)$$

- Continuité des flux aux facettes :

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{l,E_i}^{n+1} + \tilde{Q}_{l,E'_i}^{n+1} = 0 &\Leftrightarrow \\ &\sum_{j=1}^3 \tilde{B}_{l,E_{ij}}^{-1} S_{j,E}^{n+1} - \sum_{j=1}^3 \tilde{B}_{l,E_{ij}}^{-1} \text{TS}_{l,E_i}^{n+1} \\ &+ \sum_{j=1}^3 \tilde{B}_{l,E'_{ij}}^{-1} S_{j,E'}^{n+1} - \sum_{j=1}^3 \tilde{B}_{l,E'_{ij}}^{-1} \text{TS}_{l,E'_i}^{n+1} = 0 \end{aligned} \quad (2.69)$$

De même que dans la section précédente, on obtient un système algébrique pour chaque phase $l = 1, 3$ dont les inconnues sont les traces de saturation, à chaque iter $k+1$:

$$\boxed{(\mathcal{M}_{Diff,l})_{N_f \times N_f} \text{TS}_{l,N_f}^{n+1,k+1} = \tilde{\mathbf{F}}_{l,N_f} - \tilde{\mathbf{R}}_{l,N_f}} \quad (2.70)$$

2.6 Discrétisation du terme convectif de l'équation de saturation

La partie convective des équations de saturation s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \frac{\partial(S_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_l) = 0 \quad l = 1, 3 \\ \mathbf{F}_l(S, p) = \mathbf{v}_l = \nu_l \mathbf{v} - \nu_l \Delta \rho d \mathbf{K} \cdot g \nabla Z \\ \Delta \rho_1 = (\nu_2(\rho_2 - \rho_1) + \nu_3(\rho_3 - \rho_2)) \\ \Delta \rho_3 = (\nu_2(\rho_2 - \rho_3) + \nu_1(\rho_3 - \rho_1)) \\ \sum_{l=1}^3 S_l = 1 \quad l = 1, 3 \end{array} \right. \quad (2.71)$$

Nous proposons de discrétiser ce système avec une méthode des Eléments Finis Discontinus de Galerkin ([Hoteit and Firoozabadi, 2005], [Younes et al., 2010]) combinée à un schéma de

Godunov généralisé. De la même manière qu'avec les éléments finis, on divise le domaine Ω en éléments triangulaires (on se ramène alors à un triangle de référence par transformation affine). On utilise des fonctions $\phi \in \mathbb{P}^1(\Omega)$, qui peuvent être discontinues sur les facettes des éléments E (consulter l'annexe B) :

On commence par exprimer la saturation de la phase l en fonction des valeurs de saturation aux noeuds :

$$S_l(\mathbf{x}, t)_E = \sum_{j=1}^3 S_{l,j}^E(t) \varphi_{l,j}^E(\mathbf{x})$$

De la même manière, on évalue ν_l ainsi que $\nu_l \nu_2 dg$:

$$\nu_l(\mathbf{x}, t)_E = \sum_{j=1}^3 \nu_{l,j}^E(t) \varphi_j^E(\mathbf{x}) \quad (2.72)$$

$$(\nu_l \nu_2 dg)(\mathbf{x}, t)_E = \sum_{j=1}^3 \psi_{l,j}^E(t) \varphi_j^E(\mathbf{x}) \quad (2.73)$$

Le flux \mathbf{v} est donné par ses **traces** sur les facettes :

$$\mathbf{v} = \sum_{j=1}^3 \mathbf{q}_j^E(t) \Phi_j(\mathbf{x})$$

De même :

$$\mathbf{q}_g = \Delta \rho \mathbf{K} \cdot \nabla Z = \sum_j G_j^E(t) \Phi_j(\mathbf{x})$$

En multipliant 2.71 par $\varphi_i^E \in \mathcal{C}_0^\infty$, on obtient :

$$\phi \left[\frac{\partial(S_l^E)}{\partial t} \varphi_i^E \right] = -\nabla \cdot (\nu_l \mathbf{v}) \varphi_i^E + \nabla \cdot (\nu_l \nu_2 dg \Delta \rho \mathbf{K} \cdot \nabla Z) \varphi_i^E.$$

En développant les variables de la saturation en fonction des saturations aux noeuds et des fonctions test, il vient :

$$\phi \sum_{j=1}^3 \left[\frac{\partial(S_{l,j}^E)}{\partial t} \varphi_j^E \varphi_i^E \right] = - \sum_{j=1}^3 \nabla \cdot (\nu_{l,j}^E \varphi_j^E \mathbf{v}) \varphi_i^E + \sum_{j=1}^3 \nabla \cdot (\psi_{l,j}^E \varphi_j^E \Delta \rho \mathbf{K} \cdot \nabla Z) \varphi_i^E.$$

En utilisant le théorème de Green (intégration par parties) :

$$\begin{aligned}
 \phi \sum_{j=1}^3 \left[\frac{\partial(S_{l,j}^E)}{\partial t} \int_E \varphi_j^E \varphi_i^E \right] &= - \underbrace{\sum_{j=1}^3 \int_E (\nu_{l,j}^E \varphi_j^E) \mathbf{v} \cdot \nabla \varphi_i^E dX}_{A_j} + \underbrace{\sum_{j=1}^3 \int_{\partial E} (\nu_{l,j}^E \varphi_j^E \varphi_i^E) \mathbf{v} \cdot \mathbf{nd}\Gamma}_{B_j} \\
 &\quad + \underbrace{\sum_{j=1}^3 \int_E (\psi_{l,j}^E \varphi_j^E) \Delta \rho \mathbf{K} \cdot \nabla Z \cdot \nabla \varphi_i^E dX}_{C_j} \\
 &\quad - \underbrace{\sum_{j=1}^3 \int_{\partial E} (\psi_{l,j}^E \varphi_j^E \varphi_i^E) \Delta \rho \mathbf{K} \cdot \nabla Z \cdot \mathbf{nd}\Gamma}_{D_j}
 \end{aligned}$$

$$\left(\phi \frac{\partial S_{l,j}^E}{\partial t} \right)_j (\mathcal{M}_{Conv,l})_{j,i} = B_{i,j} - A_{i,j} + C_{i,j} - D_{i,j} \quad (2.74)$$

$$\frac{\partial S_{l,j}^E}{\partial t} = \frac{1}{\phi} \sum_{i=1}^3 (\mathcal{M}_{Conv,l}^{-1})_{i,j} (B_{i,j} - A_{i,j} + C_{i,j} - D_{i,j}) \quad (2.75)$$

Pour finir, on discrétise la partie temporelle de l'équation à l'aide de la méthode d'Euler d'ordre un :

$$S_{l,j}^{E,n+1} = S_{l,j}^{E,n} + \frac{\Delta t^c}{\phi} \sum_{i=1}^3 (\mathcal{M}_{Conv,l}^{-1})_{i,j} (B_{i,j} - A_{i,j} + C_{i,j} - D_{i,j}) \quad (2.76)$$

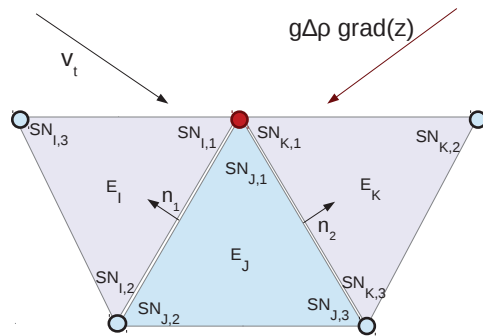


FIGURE 2.4 – Répartition des noeuds dans les triangles

2.6.1 Evaluation des intégrales de volume

Afin de quantifier les intégrales A et C dans l'élément E_J (Fig 2.4), on approxime $\nu_{l,j}^E(S_l)$ et $\psi_{l,j}^E(S_l)$ en prenant pour S_l la valeur de la saturation au centre de la maille, qui dans notre

modèle correspond à la moyenne des saturations aux noeuds (dans la maille E_J dans la figure 2.4) :

$$S_l(E_J) = \sum_{i=1}^3 \frac{SN_{J,i}}{3} \quad (2.77)$$

2.6.2 Evaluation de l'intégrale de contour liée au flux total

Le calcul de l'intégrale de frontière B dépend de l'évaluation du terme $\nu_{l,j}^E(S_l)$ aux noeuds avals $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_i$, puisque la fonction $\nu(S)$ est monotone. Plus précisément, si on considère deux triangles adjacents $E_I E_J$, la méthode de Godunov est fondée sur la relation :

$$\nu_{l,j}^{E_J}(S_l) = \begin{cases} \nu_{l,j}^{E_J}(SN_{J,1}), \nu_{l,j}^{E_J}(SN_{J,2}) & \text{si } \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_1 \geq 0 \\ \nu_{l,j}^{E_J}(SN_{I,1}), \nu_{l,j}^{E_J}(SN_{I,2}) & \text{si } \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_1 \leq 0 \end{cases} \quad (2.78)$$

2.6.3 Evaluation de l'intégrale de contour liée au terme de gravité

En revanche, lorsque la fonction flux n'est pas monotone, comme c'est le cas des fonction ψ_l , on est contraint d'appliquer un schéma de Godunov généralisé pour évaluer l'intégrale de frontière D ([Kaasschieter, 1999], [Eymard et al., 1998] (see fig 2.5). En effet, il est nécessaire de rajouter une boucle conditionnelle qui compare la valeur de saturation aux noeuds avec S_l^* , le point maximal de la fonction $\psi_l d$, qui vérifie :

$$\psi_l'(S_l^*) = 0$$

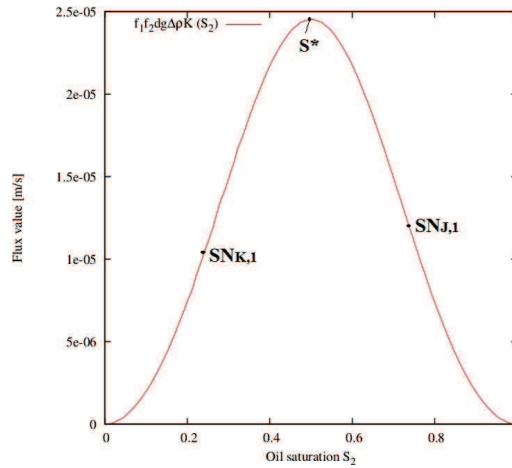


FIGURE 2.5 – Evaluation des saturations aux noeuds par rapport à S_2^* pour un écoulement diphasique incompressible

Par exemple, étant donnés les deux triangles adjacents $E_J E_K$, on obtient au noeud 1 (coloré en rouge dans la figure 2.4) :

Si $\mathbf{q}_g \cdot \mathbf{n}_2 < 0$,

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_{l,j}^{EJ}(SN_{J,1}) \quad \text{si } SN_{K,1} < S^* \text{ et } SN_{J,1} < S^* \\ \psi_{l,j}^{EJ}(SN_{K,1}) \quad \text{si } SN_{K,1} > S^* \text{ et } SN_{J,1} > S^* \\ \psi_{l,j}^{EJ}(S^*) \quad \quad \text{si } SN_{K,1} > S^* \text{ et } SN_{J,1} < S^* \\ \min\{\psi_{l,j}^{EJ}(SN_{K,1}), \psi_{l,j}^{EJ}(SN_{J,1})\} \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \text{si } SN_{K,1} < S^* \text{ and } SN_{J,1} > S^* \end{array} \right.$$

Si $\mathbf{q}_g \cdot \mathbf{n}_2 \geq 0$,

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_{l,j}^{EJ}(SN_{J,1}) \quad \text{si } SN_{K,1} > S^* \text{ et } SN_{J,1} > S^* \\ \psi_{l,j}^{EJ}(SN_{K,1}) \quad \text{si } SN_{K,1} < S^* \text{ et } SN_{J,1} < S^* \\ \psi_{l,j}^{EJ}(S^*) \quad \quad \text{si } SN_{K,1} < S^* \text{ et } SN_{J,1} > S^* \\ \min\{\psi_{l,j}^{EJ}(SN_{K,1}), \psi_{l,j}^{EJ}(SN_{J,1})\} \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \text{si } SN_{K,1} > S^* \text{ et } SN_{J,1} < S^* \end{array} \right.$$

Remarque :

La saturation S^* a été déterminée analytiquement dans le cas du modèle de Todd (pour plus de précisions on consultera le chapitre 3). En ce qui concerne le modèle de Brooks-Corey, S^* fut évaluée par une méthode itérative (dichotomie).

2.6.4 Alternative dynamique au calcul de S^*

Notre approche de résolution du terme convectif est fondée sur la séparation du vecteur flux en deux entités traitées de manières distinctes. Nous avons également envisagé de conserver la forme du vecteur flux et de lui appliquer le schéma de Godunov généralisé. Il faut cependant garder à l'esprit que les projections des vecteurs vitesse totale et flux gravitaire sont susceptibles de varier. Ceci requiert un nouveau calcul de S^* pour chaque noeud. De même dans un cadre dynamique : en cas de variation de la vitesse totale ou de la densité, il faudra proposer un calcul de S^* pour chaque facette, pour chaque noeud, à tous les pas de temps. Cette boucle conditionnelle est susceptible d'être coûteuse en terme de temps de calcul.

Par exemple, pour un cas particulier d'écoulement diphasique eau-huile, on a représenté dans la figure 2.6 les valeurs de la fonction :

$$F(S) = f_2(q_c + f_1(\rho_2 - \rho_1)q_g) \quad q_c = 10^{-2} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} \quad \rho_2 - \rho_1 = 800 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \quad (2.79)$$

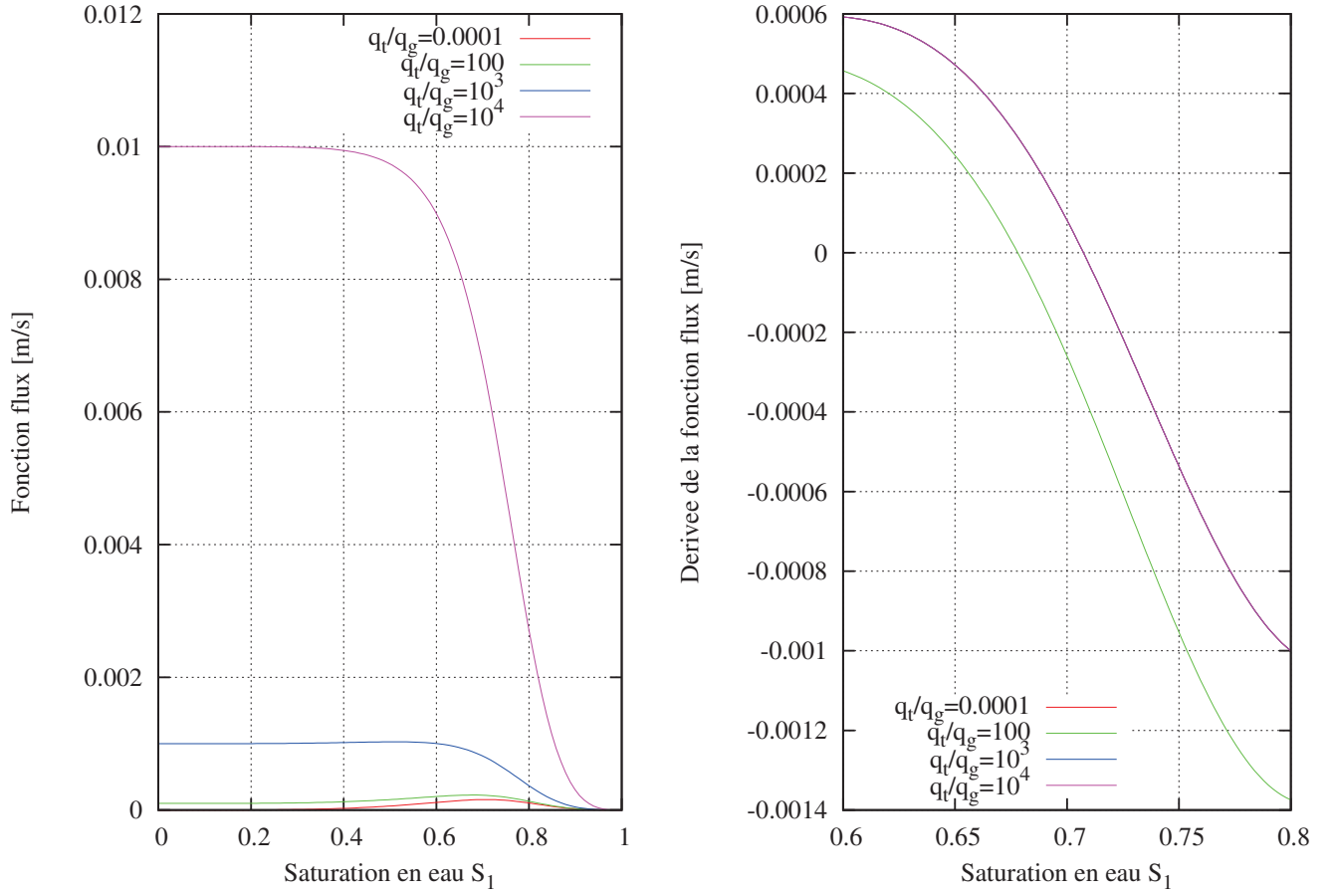


FIGURE 2.6 – *Evaluation de la saturation S_1^* pour un écoulement diphasique incompressible eau-huile*

En revanche, on peut montrer que dans certaines configurations diphasiques, les valeurs de S^* ne diffèrent pas. On a représenté dans la figure 2.7 les valeurs de la fonction :

$$F(S) = f_3(q_c + f_1(\rho_3 - \rho_1)q_g) \quad q_c = 10^{-5} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} \quad \rho_3 - \rho_1 = -1000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \quad (2.80)$$

Un comparaison des profils de saturations obtenus avec les deux méthodes d'évaluation des flux dans un cas d'écoulement monodirectionnel diphasique incompressible nous a conforté dans notre choix.

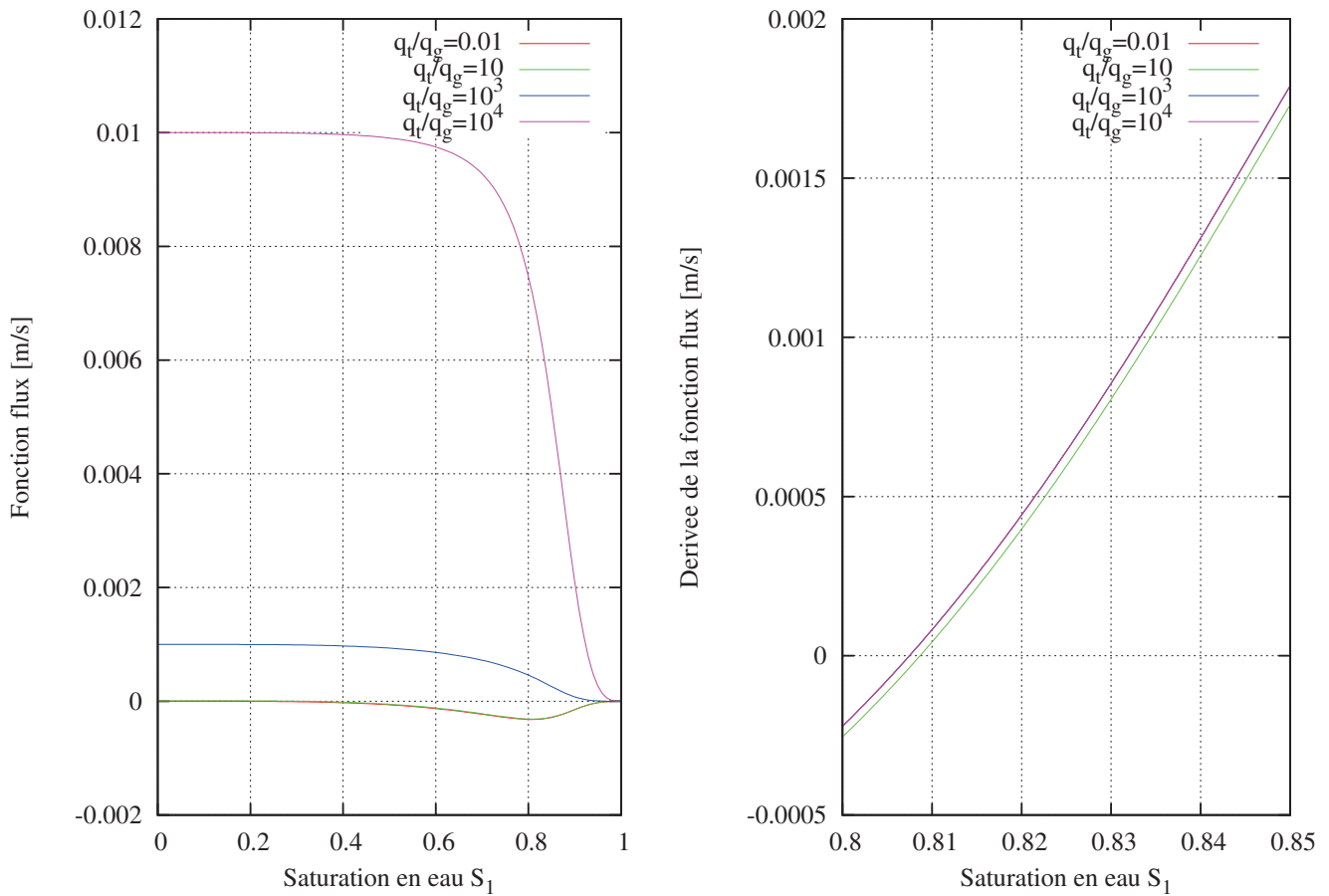


FIGURE 2.7 – Evaluation de la saturation S_1^* pour un écoulement diphasique incompressible eau-gaz

Conclusion

Au terme de cette partie, nous avons mis en place les outils théoriques et numériques nous permettant de modéliser les écoulements gravitaires en milieu homogène. Nous décrirons plus en détails par la suite les discrétisations choisies pour intégrer les effets gravitaires dans le code. Une série de cas-test est menée dans les chapitres 3 et 4 afin de valider les différents modules convectifs/diffusifs.

Le prochain chapitre sera entièrement consacré aux écoulements diphasiques eau-huile à gravité dominante. Lorsque les milieux présentent des hétérogénéités, la résolution des problèmes au niveau des interfaces est délicate. On pourra consulter avec intérêt les travaux récents de Cancès [Cancès and Pierre, 2012] sur le traitement des discontinuités de la pression capillaire.

3

Écoulements dominés par le terme de convection

Dans ce chapitre, nous proposons une résolution possible du terme convectif de l'équation de saturation. A chaque pas de temps en saturation, le terme de pression ou de flux est constant, ce qui permet de nous ramener au problème hyperbolique bien connu de Buckley-Leverett. Dans un premier temps, nous présentons une introduction à la résolution des systèmes hyperboliques. Dans une deuxième partie, nous posons le problème de Buckley-Leverett, qui concerne les écoulements diphasiques incompressibles avec effets gravitaires. La troisième partie du chapitre est consacrée, dans une publication soumise au journal *Computational Geoscience*, à une étude approfondie de l'implémentation du terme gravitaire ainsi qu'à la présentation des résultats numériques.

3.1 Introduction aux systèmes hyperboliques

Les définitions et théorèmes de cette section sont issus de [Lagoutière, 2011], [Toro, 2009], [LeVeque, 2002].

3.1.1 Définitions, solutions faibles

Définition 11. Soit $u(x, t) : \mathbb{R}^N \times [0, +\infty[\rightarrow \mathbb{R}^N$ et $A \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$ une matrice réelle.

Soit $f(u) = A \cdot u$ la fonction que l'on supposera convexe et de classe $C^2(\mathbb{R}^N \times [0, \infty[)$.

On dit que le système linéaire de lois de conservation :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 & u : \mathbb{R}^N \times [0, +\infty[\rightarrow \mathbb{R}^N \\ u(x, 0) = u_0(x) & t > 0 \quad x \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (3.1)$$

est hyperbolique si et seulement si A est diagonalisable, à valeurs propres réelles.

Définition 12. Une solution régulière u de 3.1 est une fonction $C^1(\mathbb{R}^N \times [0, \infty[)$ qui vérifie l'équation du système en chaque point.

A partir d'ici, on supposera que $N = 1$.

Définition 13. Une solution faible est une fonction $L_{LOC}^\infty(\mathbb{R} \times [0, +\infty[)$ qui vérifie :

$$\int_0^{+\infty} \int_{\mathbb{R}} u \partial_t \psi + f(u) \partial_x \psi \, dx \, dt + \int_{\mathbb{R}} u(x, 0) \psi(x, 0) \, dx = 0,$$

pour toute fonction test $\psi \in C_0^1(\mathbb{R} \times [0, +\infty[)$.

3.1.2 Conditions de Rankine-Hugoniot

Considérons à présent une solution faible v discontinue du **Problème de Riemann** suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial f(v)}{\partial x} = 0 \\ v(x, 0) = \begin{cases} v_g(x, t) & \text{si } x < \sigma(t) \\ v_d(x, t) & \text{si } x > \sigma(t) \end{cases} \end{cases} \quad (3.2)$$

où $\Sigma = \{\sigma(t), t\}$ est une courbe régulière du demi-plan $\mathbb{R} \times \mathbb{R}_+$, et v_g, v_d sont des solutions régulières de l'EDP : $\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0$.

Le saut de v sur Σ est défini par :

$$[v](t) = \lim_{t \rightarrow \sigma(t)^+} v_d(t) - \lim_{t \rightarrow \sigma(t)^-} v_g(t).$$

La notion de solution discontinue dans l'étude des systèmes hyperboliques non linéaires est très importante. En effet, les discontinuités sont la traduction de l'apparition d'un choc au sein d'une solution initialement continue. Les solutions discontinues doivent être interprétées en terme de solutions faibles comme ci-dessus. De plus, les deux parties de la solution de part et d'autre de la discontinuité ne peuvent pas être arbitraires mais sont reliées par les relations de Rankine-Hugoniot, comme l'illustre le théorème suivant.

Théorème 2. *La fonction v définie en 3.2 est solution faible de 3.1 si et seulement si pour tout $t \geq 0$:*

$$[f(v)](t) = \frac{d\sigma}{dt}(t) [v](t).$$

Par exemple, si $\sigma(t) = \zeta + st$, et si au point (x, t) , $v_g(x, t) = v_g$ et $v_d(x, t) = v_d$, alors :

$$f(v_g) - f(v_d) = s(v_g - v_d).$$

Remarque : Une fonction C^1 par morceaux satisfait l'EDP : $\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial f(v)}{\partial x} = 0$ dans le sens des distributions si et seulement si :

- v est solution classique de 3.1 aux points où v est C^1
- v satisfait les conditions de Rankine-hugoniot au travers des discontinuités :

$$s[v] = [f(v)],$$

avec s la vitesse de propagation de la discontinuité.

3.1.3 La méthode des caractéristiques

La méthode des caractéristiques est une méthode utilisée pour la résolution des équations aux dérivées partielles. Son principe est de trouver une courbe le long de laquelle l'EDP peut se ramener à une équation différentielle ordinaire, que l'on pourra résoudre.

Soit u une solution de :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 \\ u(x, 0) = u_0(x) \end{cases} \quad (3.3)$$

avec u_0 assez régulière.

Définition 14. Les courbes caractéristiques sont les courbes intégrales de l'équation différentielle :

$$\begin{aligned} \partial_t X(x, t) &= f'(X(x, t), t) \\ X(x, 0) &= x_0. \end{aligned}$$

u est constante le long de ces courbes intégrales puisque :

$$\frac{du(X(x, t), t)}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t}(X(x, t), t) + \frac{\partial X(x, t)}{\partial t} \frac{\partial u}{\partial x}(X(x, t), t) \quad (3.4)$$

$$= \left(\frac{\partial u}{\partial t} + f'(X(x, t), t) \frac{\partial u}{\partial x} \right)(X(x, t), t) \quad (3.5)$$

$$= 0$$

Les courbes caractéristiques sont donc des droites passant par un point x_0 et de pente $f'(u(x_0, 0))$.

Les caractéristiques pourront naturellement se croiser dans l'espace des phases (t, x) , en cas de variation des pentes (voir dans les figures 3.1 et 3.2). Dans ce cas, on ne pourra pas définir de solution régulière aux points de croisement des caractéristiques.

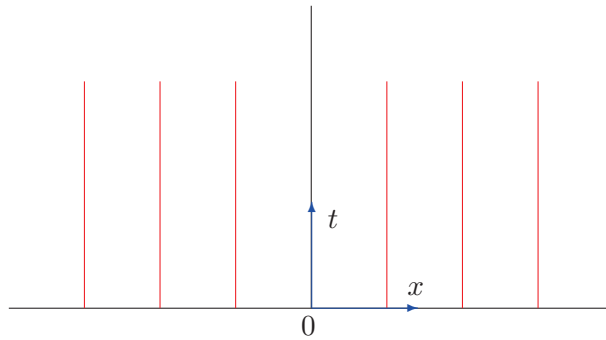


FIGURE 3.1 – Caractéristiques qui ne se croisent pas

Pour préciser ce point, rappelons ci-dessous un théorème important de la théorie des équations hyperboliques :

Théorème 3. Soit l'EDP 3.1 avec donnée initiale $u_0(x) \in C^1(\mathbb{R}) \cap L^\infty(\mathbb{R})$, telle que $u'_0(x) \in L^\infty(\mathbb{R})$. Alors :

- si $f''(u_0(x))u'_0(x) \geq 0, \forall x \in \mathbb{R}$, le problème a une unique solution $u \in C^1([0, +\infty[\times \mathbb{R})$
- sinon le problème a une unique solution $u \in C^1([0, \frac{-1}{\inf_{x \in \mathbb{R}} \{f''(u_0(x))u'_0(x)\}}] \times \mathbb{R})$ qui ne peut être prolongée au delà de $T_{max} = \frac{-1}{\inf_{x \in \mathbb{R}} \{f''(u_0(x))u'_0(x)\}}$.

Dans les deux cas, la solution vérifie : $u(t, x + tf'(u_0(x))) = u_0(x)$.

Ce théorème signifie que, lorsque les pentes des caractéristiques sont croissantes, les caractéristiques ne se croisent pas. Et inversement, si ce n'est pas le cas, il existe au moins un point de croisement.

3.1.4 Exemple de l'équation de Burgers :

Pour l'équation de Burgers :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial(u^2)}{\partial x} = 0 \\ u(x, 0) = \begin{cases} 1, & x < 0 \\ 1 - x, & 0 \leq x \leq 1 \\ 0, & x > 1 \end{cases} \end{cases} \quad (3.6)$$

La relation de Rankine-Hugoniot s'écrit :

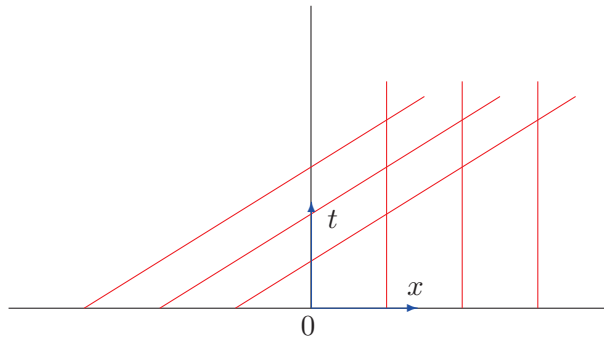


FIGURE 3.2 – Caractéristiques qui se croisent

$$\frac{1}{2}(u_d^2 + u_g^2) = [\sigma][u]$$

Par conséquent, si $[u] \neq 0$:

$$\sigma = \frac{(u_d + u_g)}{2}$$

Pour $t < T = 1$, il existe une unique solution au problème 3.6. Au-delà de $T=1$, un choc apparaît puis se propage, comme l'illustre la figure 3.3.

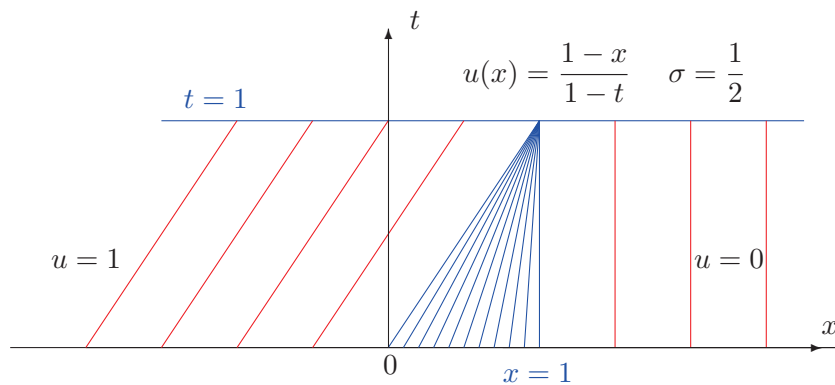


FIGURE 3.3 – Caractéristiques pour l'équation de Burgers

3.1.5 Introduction à la notion d'entropie.

Un schéma qui n'est pas sous forme conservative pourra converger vers une limite qui ne satisfait pas les conditions de Rankine Hugoniot. Il s'agit de savoir si la limite faible est l'unique solution *entropique*.

Donnons quelques définitions :

Définition 15. Une entropie mathématique pour la loi de conservation :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 \\ u(x, 0) = u_0(x) \end{cases} \quad (3.7)$$

est une fonction η convexe régulière telle qu'il existe une fonction régulière, appelée **flux d'entropie** $\xi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, telle que :

$$\xi' = \eta' f'$$

Définition 16. On dit que u est solution faible entropique du problème de Cauchy :

$$u(x, t) = \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 \\ u(x, 0) = u_0(x) \in L_{LOC}^{\infty}(\mathbb{R}) \end{cases} \quad (3.8)$$

lorsque :

1. u est solution faible de 3.8
2. Pour toute entropie de flux η associée à ξ , on a, $\forall \varphi \in C_0^{\infty}(\mathbb{R} \times [0, \infty[), \varphi \geq 0$ puis l'inégalité suivante :

$$\int \left[\frac{\partial \varphi}{\partial t} \eta(u) + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \xi(u) \right] dx dt \geq 0.$$

3.1.6 Solutions entropiques

Théorème 4. Soit $u_0 \in L^{\infty}(\mathbb{R})$, que l'on suppose continue par morceaux. Alors le problème :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} \\ u(x, 0) = \begin{cases} u_g(x, t) & \text{si } x < \sigma(t) \\ u_d(x, t) & \text{si } x > \sigma(t) \end{cases} \end{cases} \quad (3.9)$$

admet une unique solution entropique $u \in L^{\infty}(\mathbb{R} \times [0, T])$.

On a de plus :

$$\|u(\cdot, t)\|_{L^{\infty}(\mathbb{R})} \leq \|u(\cdot, 0)\|_{L^{\infty}(\mathbb{R})}.$$

Le problème de Riemann possède la propriété d'être invariant par similitude. Il en résulte que la solution u est invariante le long des courbes : $\frac{x}{t}$ est une constante. La solution u est constituée de zones où elle est constante séparées par des chocs ou des détente.

Pour résumer :

- une **onde de détente** reliant un point u_1 à un point u_0 sera de la forme :

$$u(x, t) = \begin{cases} u_0 & \text{si } x/t \leq f'(u_0) \\ v(x/t) & \text{si } f'(u_0) \leq x/t \leq f'(u_1) \\ u_1 & \text{si } x/t \geq f'(u_1), \end{cases} \quad (3.10)$$

où $v(x/t)$ est une solution auto-semblable du système ci-dessus.

- Une **onde de choc** reliant un point u_1 à un point u_0 sera une solution du système de la forme :

$$u(x, t) = \begin{cases} u_0 & \text{si } x < st \\ u_1 & \text{si } x > st, \end{cases} \quad (3.11)$$

où s est la vitesse de propagation de la discontinuité, donnée par la relation :

$$s = \frac{f(u_1) - f(u_0)}{u_1 - u_0}.$$

Nous invitons le lecteur à consulter le livre [LeVeque, 2002] pour plus de détails. Les solveurs de Riemann sont des méthodes numériques de résolution des systèmes hyperboliques. On pourra aussi citer les méthodes de Godunov, de Van Leer [Van Leer, 1979], ou d'ordre supérieur [Harten, 1983], [Toro, 2009].

3.2 Problème de Buckley-Leverett avec effets gravitaires

3.2.1 Définition

Le problème de Buckley-Leverett décrit le déplacement monodimensionnel d'une phase incompressible par une autre à vitesse constane \mathbf{v} . Notons $S_2(x, t)$ la saturation en NAPL en x et au temps t . D'après les notations introduites dans le premier chapitre, le problème de Buckley-Leverett s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \frac{\partial S_2}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}(S_2) = 0, \\ S_2(x, t) \in L_{LOC}^{\infty}(\mathbb{R} \times [0; +\infty[) \\ S_2(x, 0) = \begin{cases} 1 & \text{si } x < 0 \\ 0 & \text{si } x > 0 \end{cases} \\ \mathbf{F}(S_2) = \mathbf{v}f_2 + f_1f_2d(\rho_2 - \rho_1)g\mathbf{K} \cdot \nabla Z \\ \mathbf{F}(S_2) \in C^1([0; 1]) \end{array} \right. \quad (3.12)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \\ \mathbf{v} = -d\mathbf{K} \cdot [\nabla P - \bar{\rho}g\nabla Z] \\ P(x, t) = P_2(x, t) = P_1(x, t) \end{array} \right. \quad (3.13)$$

On peut réécrire l'équation de saturation de la manière suivante :

$$\phi \frac{\partial S_2}{\partial t} + \frac{dF}{dS_2} \frac{\partial S_2}{\partial x} = 0, \quad (3.14)$$

On en déduit la vitesse du front :

$$\boxed{\mathbf{v}_2 = \frac{1}{\phi} \frac{dF(S_2)}{dS_2}}$$

Nous avons vu dans la section précédente qu'il est possible de trouver une solution analytique aux problèmes hyperboliques. On obtient donc, le long des caractéristiques : $\tilde{S}_2(t, x)$:

$$\boxed{\frac{dx}{dt} = \mathbf{v}_2 = \frac{1}{\phi} \mathbf{F}'(\tilde{S}_2)} \quad (3.15)$$

Les caractéristiques sont déduites par intégration :

$$x(t) = \frac{1}{\phi} \int_0^t \mathbf{F}'(\tilde{S}_2) dt \quad (3.16)$$

Le front de saturation correspond au point de croisement des caractéristiques, ou encore au point d'inflexion de la fonction flux (figure 3.4).

De plus, la saturation en NAPL au front $S_{2,f}$ satisfait la relation suivante :

$$F_{objectif}(S_{2,f}) = \frac{1}{2\phi} \left(\frac{d\mathbf{F}}{dS_2} \Big|_{S_{2,f}} - \frac{\mathbf{F}(S_{2,f})}{S_{2,f}} \right)^2 = 0 \quad (3.17)$$

de par la valeur de la fonction flux à droite : $F(S_{2,d}) = 0$.

La fonction objectif définie ci-dessus (3.17) nous permet de retrouver la valeur de saturation au front, puis d'en déduire une approximation quasi-analytique du profil. Nous avons utilisé la méthode de Newton (on aurait pu utiliser aussi la méthode de Householder, schéma en théorie deux fois plus rapide [di Chiara R., 2009]).

Afin de tester notre algorithme, nous simulons dans l'article qui suit l'écoulement avec vitesse constante d'une phase huile dans une colonne saturée initialement en eau.

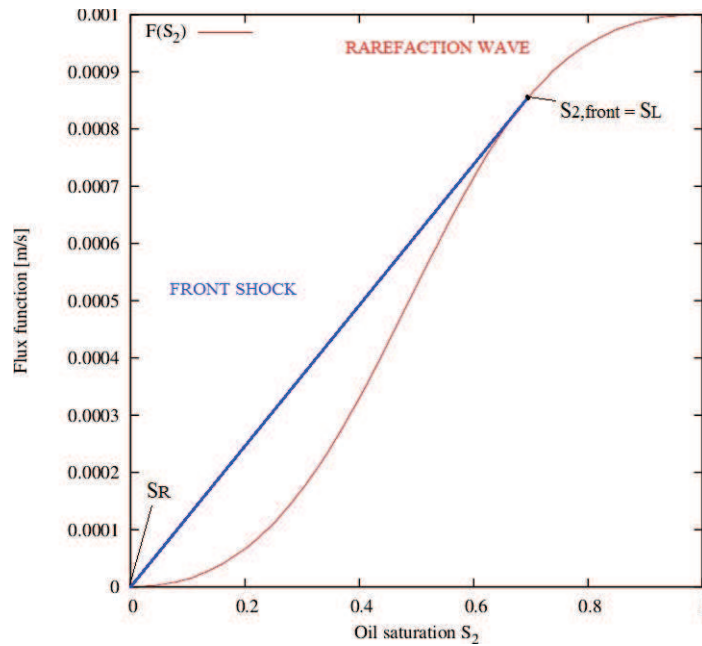


FIGURE 3.4 – Fonction flux F et valeur de saturation en huile au front (tangente de Welge)

3.3 Etude de cas d'un écoulement unidirectionnel diphasique en milieux poreux saturé

Ce travail fait l'objet d'un article soumis à la revue *Computational Geoscience* le 29 mai 2014. On y développe une implémentation du terme de gravité dans le cadre d'une formulation en pression globale, pour un schéma numérique fondé sur une approche Implicite en Saturation-Explicite en Pression (IMPES). Afin de modéliser un écoulement diphasique non miscible avec effets gravitaires dominants (figure 3.5), on utilise une Méthode d'Eléments Finis Discontinus de Galerkin couplée avec un schéma de Godunov généralisé. Le profil de saturation de la phase non aqueuse (NAPL) déplaçant l'eau dans un milieu poreux initialement saturé en eau est fonction du ratio entre la différence de densité entre les deux phases sur la vitesse totale. On propose une solution à l'équation non linéaire de Buckley-Leverett, y compris dans les cas où la fonction flux n'est pas monotone. Par une analyse fonctionnelle de l'équation hyperbolique fondée sur la méthode des caractéristiques, on distingue trois cas que l'on a jugé représentatifs de la répartition des chocs et des ondes de raréfaction. Les saturations d'entrée et du front qui en sont déduites sont fonctions de la viscosité ainsi que du nombre de gravité G . On commence par tester le modèle numérique dans le cas d'un écoulement monodimensionnel eau-NAPL en milieux poreux dont le moteur sont les effets gravitaires. Les valeurs de saturation en entrée ainsi qu'au front correspondent aux prédictions de la théorie. De plus, on observe une réduction de la diffusion numérique au niveau du front en comparaison des simulations menées à partir d'une méthode des Volumes Finis d'ordre un, généralement utilisée en ingénierie des réservoirs car elle présente une grande robustesse. Enfin, on teste le schéma numérique dans le cas d'un milieu poreux hétérogène, et on analyse la réponse du schéma aux hétérogénéités en utilisant une méthode des moments spatiaux.

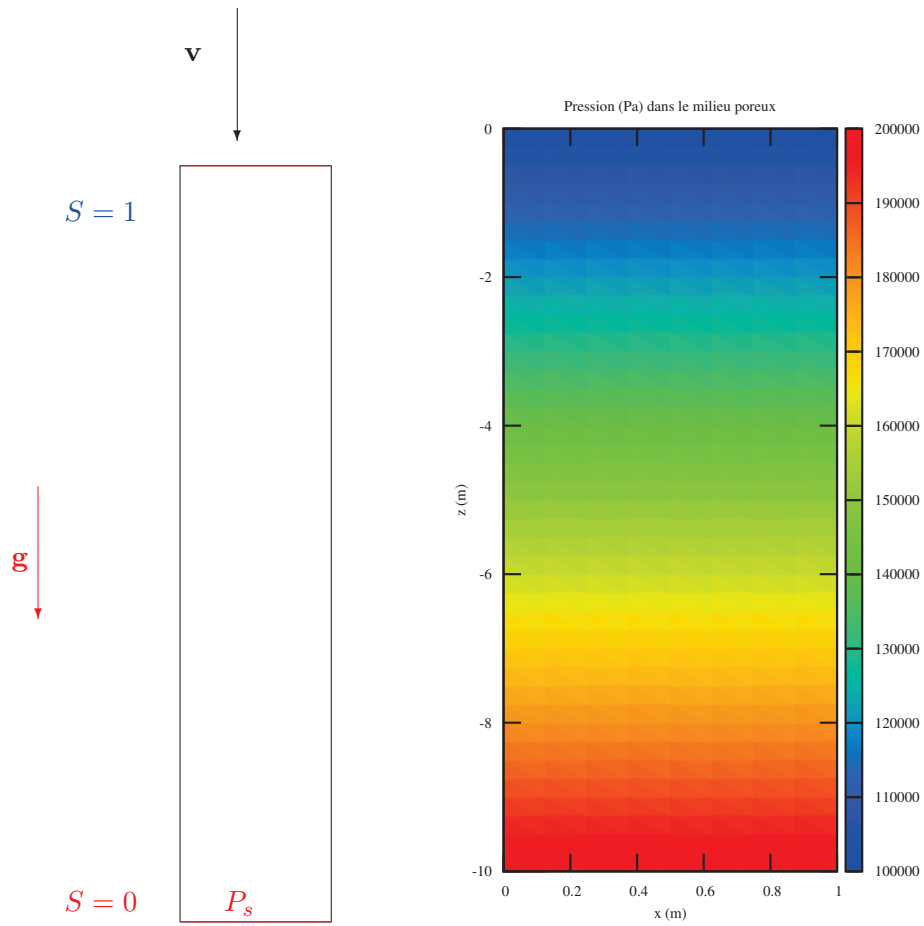


FIGURE 3.5 – Injection d’huile à vitesse constante dans une colonne saturée en eau : conditions aux limites et valeurs de pression

**Highly gravity-driven flow of a NAPL in
water-saturated porous media using the Discontinuous
Galerkin Finite-Element Method with a generalised
Godunov scheme**

Schneider Lauriane

di Chiara R. Raphaël
Helluy Philippe

Schäfer Gerhard

Revised January, 25th 2015

In this paper, we develop an implementation of gravity effects within a Global Pressure formulation in a numerical scheme based on the implicit pressure explicit saturation (IMPES) approach. We use the Discontinuous Galerkin Finite-Element Method (DGFEM) combined with a generalised Godunov scheme to model an immiscible two-phase flow with predominant gravity effects. The saturation profile of a displacing non-aqueous phase liquid (NAPL) in an initially water-saturated porous medium depends strongly on the ratio between the total specific discharge and the density difference between the NAPL and water. We discuss the solution of the nonlinear Buckley-Leverett equation for the general case in which the flux function is non-monotonic. Using a detailed functional analysis of the characteristics of the given hyperbolic equation, three limit cases are identified as significant for modelling the shock and rarefaction regions. The derived maximum (or entry) and front saturations of NAPL are functions of the viscosity ratio M and the gravity number G . We first test the developed numerical model in the case of a one-dimensional highly gravity-driven flow of NAPL within a homogeneous porous medium. The numerically calculated NAPL entry and front saturations of NAPL agree well with the theoretical values. Furthermore, the numerical diffusion of the shock front is much lower than that calculated using a first-order finite-volume method, which is generally used in reservoir engineering because of its robustness. Finally, we apply the developed DGFEM scheme to a 2D heterogeneous porous medium and analyse its capability of modelling the non-uniform saturation field using spatial moment analysis.

Introduction

Numerical simulation has become a crucial tool in addressing water-resource management and other environmental problems such as CO_2 sequestration in saline aquifers. Multiphase models (water, NAPL and gas phases) were initially adopted in petroleum research for reservoir simulation, and they are now successfully exploited for hydrosystem monitoring or remediation.

The major variables in the study of multiphase flow are the pressure and the saturation of the fluid, the latter being defined as the ratio between the volume occupied by the fluid within a reference volume over the pore volume within the reference volume, according to [Helmig, 1997]. Among the various formulations of multiphase flow, each one that is characterised by its own pressure-saturation system of equations, the Global Pressure formulation, an approach that was initiated by [Chavent and Jaffré, 1986] and modified by [Amaziane et al., 2010], [Amaziane et al., 2011a], presents the advantage of reducing the coupling between the saturation and pressure equations. The numerical efficiency of three-phase flow schemes based on global pressure formulation is discussed in [Chen, 2005], [di Chiara R., 2009], [Chen and Ewing, 1997]. The resulting saturation equations that govern the phases are degenerate parabolic equations, with diffusive and advective parts ([Chavent and Jaffré, 1986], [Kaasschieter, 1999], [Langtangen and Tveiko, 1992], [Riaz and Tchelepi, 2004]). Difficulties arise from the gravity term in the advective part of the saturation equation in the absence of capillary effects, which explains why gravity has often been neglected in multiphase flow modelling. In fact, when gravity effects are not neglected, the flux function in the saturation equation, the Buckley-Leverett hyperbolic equation [Buckley and Leverett., 1942], is non-monotonic, which makes it complicated to solve. The entropy arguments discussed in [Proskurowski, 1981], [Kaasschieter, 1999] have yielded satisfactory recipes for the computation of the vanishing capillarity solution, the physical solution of the Buckley-Leverett equation. Developements in calculating the vanishing capillarity solution are summarised in [Andreianov and Cancès, 2013], [Kružkov, 1970].

Our research is motivated by the numerical modelling of multiphase flows in porous media for hydrosystem monitoring, particularly the flow driven by a low total specific discharge and a high density difference between the fluids, following the work of [di Chiara R., 2009]. We construct our scheme based on the two-phase Global Pressure model of [Amaziane et al., 2012], [Amaziane et al., 2010] and used an IMPES scheme from [di Chiara R., 2009] and [Huber and Helmig, 1999].

The first part of the article is dedicated to the presentation of the equations governing a two-phase water-NAPL flow, taking gravity effects into account. From the theoretical (essentially [Proskurowski, 1981], [Kaasschieter, 1999] and [Riaz and Tchelepi, 2007]) and experimental research, it is well known that the behaviour of the water-NAPL saturation profile depends on the ratio between the total specific discharge and the density difference between the NAPL and water. Hence, for a given permeability model, we construct a relation between the maximum NAPL saturation, also called the entry saturation, and the front saturation value as a function of certain characteristic numbers, *i.e.*, Bond, Gravity and Capillary numbers.

In the second part of the article, we present our numerical scheme based on the Discontinuous Galerkin Finite-Element Method (see, among others, [Binning and Celia, 1999], [di Chiara R., 2009], [Hoteit and Firoozabadi, 2005]), combined with a Godunov scheme dependent on the nature of the flux function.

We perform a numerical simulation of the gravity effects in the scenario of a one-directional NAPL-water two-phase flow in a homogeneous porous medium. We discuss the shape of the numerical results, compare it with the Buckley-Leverett quasi-analytical solution, and compare the entry and front saturation values to their theoretical values.

Finally, we apply the developed DGFEM scheme to a 2D heterogeneous porous medium. We analyse here its capability of modelling the NAPL saturation field.

3.4 Governing equations

The objective of this section is to recall the major mathematical results regarding a two-phase immiscible flow with gravity effects.

3.4.1 Global Pressure formulation

Many mathematical models of reservoirs are based on mass-conservation relations in combination with the Darcy relation. In this article, we study a two-phase incompressible immiscible flow, *i.e.*, the simultaneous flow of an NAPL ($j=2$ for NAPL) and a water phase ($j=1$ for water) that entirely saturate the porous medium. The primary variables in these relations are the following :

- the effective saturations $S_j = \frac{S_j - S_{j,r}}{1 - (S_{1,r} + S_{2,r})}$,
where $S_{1,r}$ and $S_{2,r}$ are the residual saturation of the water and the NAPL phase.

- the pressure $p_j(x, t)$ of the phase j .

Henceforth, $S_j(x, t)$ denotes the effective saturation of phase j .

In addition, we define the capillary pressure :

$$p_c = p_2 - p_1. \quad (3.18)$$

We assume that the fluids are incompressible, such that the densities ρ_j [$kg \cdot m^{-3}$] of each phase j are constant in the domain. The density difference reads $\Delta\rho = \rho_2 - \rho_1$ [$kg \cdot m^{-3}$].

The secondary variables governing the flow are the following :

- the relative permeabilities of the water and NAPL phases, for which we use Todd's model, as suggested in [Huber and Helmig, 1999] :

$$k_{r1}(S_1) = S_1^2, \quad S_1 \in [S_{1,r}, 1 - S_{2,r}]; \quad (3.19)$$

$$k_{r2}(S_2) = S_2^2, \quad S_2 \in [S_{2,r}, 1 - S_{1,r}]; \quad (3.20)$$

- the phase mobilities $\lambda_j = \frac{k_{rj}(S_j)}{\mu_j}$ [$kg^{-1} \cdot m \cdot s$],
- $d = \lambda_1 + \lambda_2$ [$kg^{-1} \cdot m \cdot s$];
- the fractional flow $f_j = \frac{\lambda_j}{\lambda_1 + \lambda_2}$ [-]; and
- $\bar{\rho}(S_j) = \sum_{j=1,2} f_j \rho_j$ [$kg \cdot m^{-3}$].

Remark : we assume that the models of relative permeability are functions only of the local saturation.

The mass-conservation and Darcy relations read as follows (see [Helmig, 1997], [Chavent and Jaffré, 1986] and also [Chen and Ewing, 1997], [Ewing, 2001], [Chen et al., 1994] [Ewing and Berkowitz, 1998]) :

In a given domain $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, with boundary Γ_Ω ,

$$\frac{\partial \phi S_j}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_j) = 0 \quad x \in \Omega, t > 0, \quad (3.21)$$

where \mathbf{v}_j the velocity of phase j defined by Darcy's relation :

$$\mathbf{v}_j = -\frac{k_{rj}(S_j)}{\mu_j} \mathbf{K} \cdot (\nabla p_j - \rho_j g \nabla z) \quad x \in \Omega, t > 0 \quad (3.22)$$

where ϕ is the constant porosity of the medium, where $z(x)$ is the depth [m] of point x , \mathbf{K} is the tensor of intrinsic permeability with norm K [m^2], and μ_j [$kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$] is the viscosity of phase j .

Depending on the choice of primary variables, the nature of the equation obtained by combining the equations may vary considerably. This diversity enables a wide range of numerical resolution methods of various complexity, where the complexity depends directly on the formulation.

The Global Pressure formulation, first proposed by Chavent and Jaffré [Chavent and Jaffré, 1986] and later reformulated by [Amaziane et al., 2012], [Amaziane et al., 2010], [Chavent, 2009], [di Chiara R., 2009] and [di Chiara R. et al., 2010] for numerical results using a fractional flow approach, induces a partial decoupling in the Global-Pressures-saturation system, which enables more rapid computation.

Given a function

$$P_c^g(S_1, p) = \int_1^{S_1} f_1(S_1) \frac{\partial p_c}{\partial S_1} dS_1, \quad (3.23)$$

the Global Pressure is then defined implicitly :

$$p = p_2 + P_c^g(S_1, p), \quad p_1 \leq p \leq p_2 \quad (3.24)$$

By combining the mass-conservation equations (3.21) and the generalised Darcy Law (3.22), for a two-phase flow and a constant porosity ϕ , we obtain the following fractional flow formulation, which consists of a system of two nonlinear coupled equations of the pressure and saturation :

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial}{\partial t} (S_1 + S_2) - \nabla \cdot (\mathbf{v}_t) &= 0, \\ \phi \frac{\partial S_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_2) &= 0, \end{aligned} \quad (3.25)$$

with

$$\mathbf{v}_t := \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 = -d\mathbf{K} \cdot (\nabla p - \bar{\rho}g\nabla z). \quad (3.26)$$

In addition, we suppose that the porous medium is fully saturated by the two fluids. Hence, the equation

$$S_1 + S_2 = 1, \quad (3.27)$$

closes the system.

In the following, we neglect the capillary pressure :

$$p_c = p_2 - p_1 = 0. \quad (3.28)$$

However, one must keep in mind that in presence of capillary effects, discontinuities in the saturation (when the porous medium is heterogeneous) opens up a range of additional problems [Ern and Schuh, 2010].

For the remainder of the article, $p_2 = p_1 = p$, and \mathbf{v}_t is referred to as the total velocity.

We impose a constant velocity \mathbf{v}_t through $\Gamma_o \subset \Gamma_\Omega$ in the water-saturated porous medium. Finally, based on all previously stated hypotheses, the governing system of equations for the two-phase flow under gravity can be written as follows :

- the pressure equation :

$$\nabla \cdot (\mathbf{v}_t) = 0, \quad (3.29)$$

$$\text{with } \mathbf{v}_t = -d\mathbf{K} \cdot [\nabla p - \bar{\rho}g\nabla z],$$

- and the saturation equation

$$\phi \frac{\partial S_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_2) = 0,$$

with

$$\mathbf{v}_2 = f_2(S_2)\mathbf{v}_t + \mathbf{K}f_1(S_2)f_2(S_2)d(S_2)\Delta\rho g\nabla z \quad (3.30)$$

$$= \mathbf{F}(S_2),$$

- and the closure condition :

$$S_1 + S_2 = 1. \quad (3.31)$$

We could also have used a phase pressure formulation directly (as done in [Hoteit and Firoozabadi, 2008]), as the global pressure exactly reduces to the phase pressure in this simpler case. But the global pressure formulation presents many advantages when one adds capillary effects.

3.4.2 Gravity-driven flow

From the experimental point of view, gravity effects in a subsurface hydrosystem cannot be separated from capillary and viscosity effects. One consequence of an unstable flow at the pore scale is the fingering phenomenon, which is caused by unstable infiltration fronts breaking into flow fingers. In the past, numerous detailed laboratory studies have been conducted by Nsir et al. ([Nsir and Schäfer, 2010] and also [Frette et al., 1997], [Lenormand and Zarcone, 1989], [Løvoll et al., 2011], [Toussaint et al., 2005]) to describe the complex immiscible displacement of fluids in a porous medium, driven by buoyancy, viscous and capillary forces. Some common ratios used in viscous cases are usually defined as follows :

$$M = \frac{\mu_1}{\mu_2}[-] \quad \text{the viscosity ration} \quad , \quad (3.32)$$

$$N_c = \frac{v_t \mu_1}{\sigma_{12} \cos(\theta)}[-] \quad \text{the capillary number} \quad , \quad (3.33)$$

$$N_b = \frac{a^2 \cos \alpha g \Delta \rho}{\sigma_{12} \cos \theta}[-] \quad \text{Bond Number} \quad , \quad (3.34)$$

where $v_t [m \cdot s^{-1}]$ is the norm of the total velocity, also called the total specific discharge; $\sigma_{12} [kg \cdot s^{-2}]$ is the interfacial tension between the wetting and non-wetting fluids; θ is the contact angle at the water-NAPL interface; α is the angle between the flow vector and the gravity vector; and $a[m]$ is the mean diameter of the pores.

Gravity effects in combination with viscosity and capillary forces may generate flow instabilities, characterised by fingers, that lead to the early breakthrough of the displacing fluid.

- When $N_b \leq 0$, the NAPL interface is stabilised by gravity forces, despite the presence of destabilising viscosity or capillary forces.
- Conversely, in the case when $N_b \geq 0$, the occurrence of fingering is amplified by gravity forces. More experimental details regarding this phenomenon are described in [Nsir et al., 2011].

A parameter that can be used for the comparison of water-NAPL flows with variable fluid densities consists of the ratio of the Bond number (3.34) and the capillary number (3.33)

$$N = \frac{N_b}{N_c} = \frac{a^2 \cos \alpha g \Delta \rho}{V_t \mu_1} \quad [-] \quad (3.35)$$

As our numerical model is based on a macroscopic approach, it will not be capable of simulating fingering effects at the local pore scale. However, because our scheme is mass conserving, we can use it to reproduce the global nature of the fluid displacement depending on the value of N .

The nature of the flux, whether gravity-driven or pressure-driven, is directly linked to the gravity number G , which is defined as follows [Riaz and Tchelepi, 2007] :

$$G = \frac{NK}{a^2} = \frac{\cos \alpha K g \Delta \rho}{V_t \mu_1} \quad [-]. \quad (3.36)$$

3.4.3 Solution of the Buckley-Leverett equation

From the mathematical point of view, many issues can arise from the presence of gravity forces in the saturation equation in system (3.30) when the flux function $\mathbf{F}(S_2)$ is non-monotonic. In fact, the equation governing the NAPL saturation is the well-known nonlinear hyperbolic Buckley-Leverett equation :

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_2}{\partial t} + \frac{1}{\phi} \nabla \cdot (\mathbf{F}(S_2)) &= 0 \\ S_2(x, t = 0) &= \begin{cases} 1 - S_{1,r} & x \in \Gamma_o \\ S_{2,r} & x \in \Omega \end{cases} \end{aligned} \quad (3.37)$$

For the simulation of NAPLs in reservoirs, gravity forces are often neglected, such that the flux function is monotonically increasing and equal to

$$\mathbf{F}(S_2) = f_2 \mathbf{v}_t. \quad (3.38)$$

As a result, the structure of the solution is always a shock wave followed by a rarefaction wave (see [LeVeque, 2002], [Toro, 2009], [Godlewski and Raviart, 1991a], [Kaasschieter, 1999], [Godlewski and Raviart, 1991b], [Binning and Celia, 1999]), and the shock fulfils the Lax entropy condition.

In case of non-convex flux, for example, in the presence of gravity or at permeability discontinuities (see [Kaasschieter, 1999], [Proskurowski, 1981]), the sign of the characteristic speed may vary strongly, which implies multiple shock and rarefaction waves and, potentially, entropy-violating solutions. The sign of the characteristic speed depends on the eigenvalues of the Jacobian matrix

of the system.

Therefore, it is necessary to study the sign of the flux gradient to construct the convex hull of the flux function, a process that uses the entropy inequality to determine an adequate physical solution, as demonstrated in [Van Duijn et al., 2007], [Kaasschieter, 1999] and in figure 3.6.

3.4.4 One-dimensional flow

In the particular case of uniform NAPL injection on top of a water-saturated column in the z direction, z being the depth from the top of the column, with $\alpha = 0$, the one-dimensional equation reads

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} + \frac{1}{\phi} \nabla \cdot \mathbf{F}(S_2) = 0, \quad (3.39)$$

$$S_2(z, t = 0) = \begin{cases} 1 - S_{1,r} & z \in \Gamma_o \\ S_{2,r} & z \in \Omega \end{cases},$$

$$\text{with } \mathbf{F}(S_2) \cdot \nabla z = F(S_2). \quad (3.40)$$

The characteristic speed in the flow direction is the derivative $F'(S_2)$ of the flux function :

$$F' : [S_{2,r} : 1] \rightarrow \mathbb{R}$$

$$S_2 \rightarrow \frac{\text{V}_t \left[k'_{r2} k_{r1} - k_{r2} k'_{r1} + \frac{\Delta \rho g K}{\text{V}_t \mu_1} (k_{r1}^2 k'_{r2} + M k_{r2}^2 k'_{r1}) \right]}{\mu_1 \mu_2 d^2}.$$

For Todd's model, F' is written as

$$F'(S_2) = \frac{2S_2(1 - S_2)\text{V}_t [1 + G((1 - S_2)^3 - MS_2^3)]}{\mu_1 \mu_2 d^2}. \quad (3.41)$$

To determine the sign of $F'(S_2)$, we study the following function :

$$u : [S_{2,r} : 1] \rightarrow \mathbb{R}$$

$$u(S_2) = [1 + G((1 - S_2)^3 - MS_2^3)].$$

We write its derivative :

$$u'(S_2) = -3G((1 - S_2)^2 + MS_2^2), \quad (3.42)$$

which is strictly negative when $\Delta \rho > 0$.

Thus, when $\Delta \rho > 0$, u is strictly decreasing, with a maximum value at

$$u(S_{2,r}) = 1 + G((1 - S_{2,r})^3 - MS_{2,r}^3), \quad (3.43)$$

and a minimum value at

$$u(1 - S_{1,r}) = 1 + G((S_{1,r})^3 - M(1 - S_{1,r})^3) \quad (3.44)$$

Depending on the magnitude of this minimum value, three different cases can be identified :

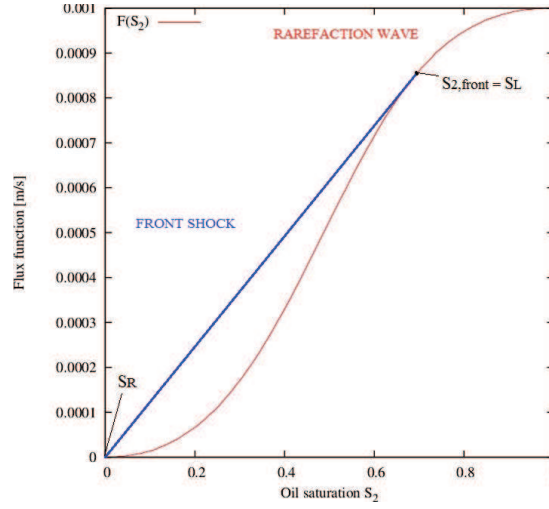


FIGURE 3.6 – Flux function F for the Buckley-Leverett equation in Case 1 ($v_t = 10^{-3} \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$, $\Delta\rho = 400 \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ and $M = 1$)

– Case 1 : $\Delta\rho \geq 0$ and $u(1 - S_{1,r}) \geq 0$

In Case 1, $u(S_2)$ is nonnegative. The characteristic speed F' is positive, and the flux function F has the shape illustrated in figure 3.6. This is a classical configuration characterised by a front shock followed by a rarefaction wave (figure 3.7), as shown by [Kaasschieter, 1999]. The shock speeds are given by the slopes

$$v_{RL} = \frac{F(S_R) - F(S_L)}{S_R - S_L}, \quad (3.45)$$

where S_L and S_R are the left and right end points of the shock, respectively. Also note that the shock satisfies the Lax entropy criterion ([LeVeque, 2002]) :

$$F'(S_L) > F'(S) > F'(S_R) \quad \forall S \in [S_L, S_R]. \quad (3.46)$$

When these conditions are fulfilled, with α equal to zero, then the gravity number satisfies the following relation :

$$G = \frac{\Delta\rho g K}{v_t \mu_1} \leq \frac{1}{M(1 - S_{1,r})^3 - (S_{1,r})^3}. \quad (3.47)$$

Conversely, when both relations (3.47) and $\Delta\rho > 0$ are satisfied, then $u(1 - S_{1,r}) \geq 0$. If we neglect residual water saturation, the criterion in terms of the gravity number for Case 1 is simply

$$G \leq \frac{1}{M}. \quad (3.48)$$

– Case 2 : $\Delta\rho > 0$ and $u(1 - S_{1,r}) < 0$

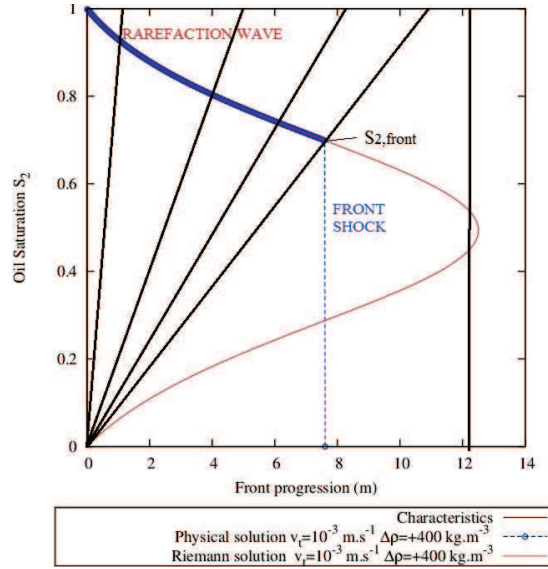


FIGURE 3.7 – Riemann solution for the Buckley-Leverett equation in Case 1, with $M = 1$

The flux function is positive (figure 3.8), but the characteristic speed (3.41) takes both positive and negative values. In fact, the negative values of the characteristic speed correspond to a backwards-travelling shock. This component is defined only upstream of the domain and corresponds to a countercurrent flow, as demonstrated in the studies of the stability of a two-phase flow conducted by Riaz et al. [Riaz and Tchelepi, 2006]. Moreover, a rarefaction wave connects the backwards shock with the front shock.

When the condition $u(1 - S_{1,r}) < 0$ is fulfilled, then the gravity number satisfies

$$G = \frac{\Delta\rho g K}{v_t \mu_1} > \frac{1}{M(1 - S_{1,r})^3 - (S_{1,r})^3}, \quad (3.49)$$

or, if we neglect the residual NAPL saturation, the criterion for Case 2 with respect to the gravity number is

$$G > \frac{1}{M}. \quad (3.50)$$

When the density difference is reduced, the backwards shock and part of the rarefaction wave vanish.

In the given model domain, the highest value of the saturation in the domain, S_2^{entry} , called the entry saturation, for which the characteristic speed cancels out, may remain far below the prescribed left boundary saturation condition, as illustrated in Examples 3 and 4 of section 3.6. For a density difference of $400 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ and a viscosity ratio M equal to 1, the physical solution is described in figure 3.9. The fluid is then said to be highly gravity driven.

The given solution of the Buckley-Leverett equation is the only physical solution to the problem because it satisfies the Lax entropy criterion for both shocks.

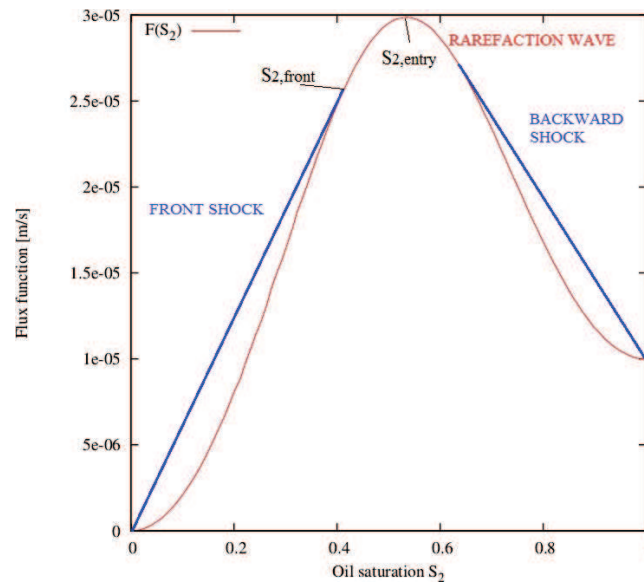


FIGURE 3.8 – Flux function F for the Buckley-Leverett equation in Case 2 ($v_t = 10^{-5} m \cdot s^{-1}$, $\Delta\rho = 400 kg \cdot m^{-3}$ and $M = 1$)

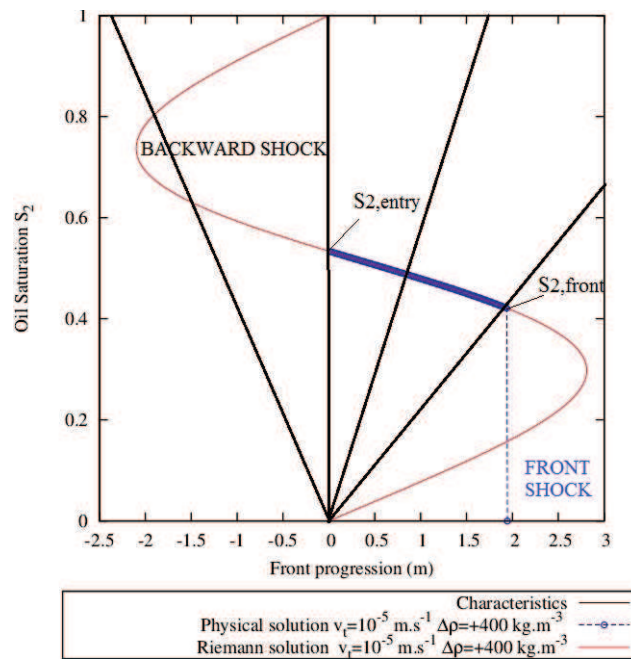


FIGURE 3.9 – Riemann solution for the Buckley-Leverett equation in Case 2, with $M = 1$

The flux function F can also take negative values. If the flux is negative, the fluid is driven out of the domain. To simplify, we neglect any residual saturation. We study only the case

in which the flux remains strictly positive, i.e., if and only if

$$\begin{aligned} \forall t \mu_1 > \max_{S_2 \in [0,1]} [|\Delta\rho| gK] \\ = |\Delta\rho| gK. \end{aligned}$$

and as a consequence,

$$|G| < 1.$$

When this condition is satisfied, a study of the characteristic speed is still necessary.

– *Case 3* : $\Delta\rho < 0$ and $1 + G > 0$

When $\Delta\rho < 0$, u is strictly increasing, with a minimum value at $u(0) = 1 + G$ and a maximum value at $u(1) = 1 - GM > 0$.

Because $|G| < 1$ when $S_{2,r} = 0$, the global shape is always the same as in Case 1.

Remark : Please note that the entry saturation presented here is not linked to the entry pressure associated to capillary phenomenon (for example in the Brooks-Corey model [Turner, 2004]).

3.4.5 Entry saturations

As shown in the previous subsection, the entry saturation may be less than or equal to the left boundary condition $1 - S_{1,r}$, and its value depends on $M = \frac{\mu_1}{\mu_2}$ and $\Delta\rho$. More specifically, in Case 1, it is equal to the left boundary condition. In Case 2, it may be very low and satisfies the following criterion :

$$u(S_2^{entry}) = 0. \quad (3.51)$$

Figures 3.10, 3.11 and 3.12 illustrate the evolution of the entry and front saturations as functions of the density difference for several different values of the total specific discharge. The evolution of the entry and front saturations as functions of M is also presented in figures 3.32, 3.33 and 3.34 in Appendix A. It is worth noting that the front saturation globally decreases as the density difference or the rate M increases.

3.5 Numerical modelling approach

This section is devoted to the presentation of the numerical scheme. To model a two-phase flow with gravity effects, we use a numerical method based on an implicit pressure explicit saturation (IMPES) scheme adapted for gravity effects.

3.5.1 Description of the numerical scheme

Numerical schemes for multiphase flows are primarily based on finite-difference and finite-volume schemes. Our study begins with an IMPES scheme, *i.e.*, we solve the pressure equation implicitly and the saturation equation explicitly. In fact, the resolution of the pressure equation is based on a mixed hybrid finite-element method that consists of a simultaneous approximation of the pressure (saturation) and the fluxes using the pressure traces (saturation traces). When

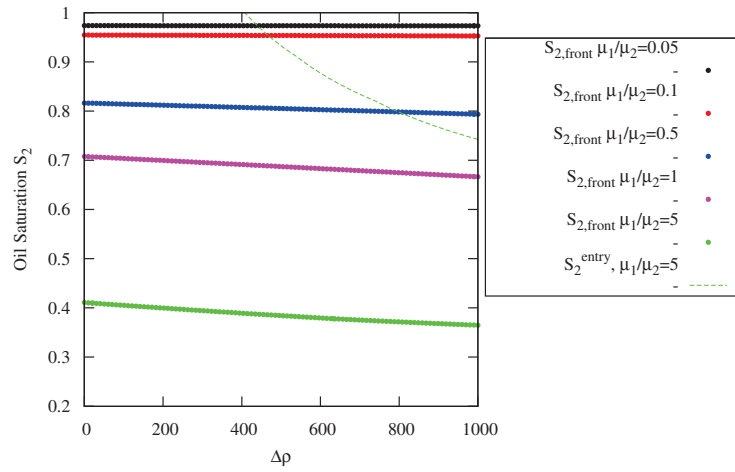


FIGURE 3.10 – Entry and front saturation as function of the density difference $\Delta\rho$ for $v_t = 10^{-3}m \cdot s^{-1}$

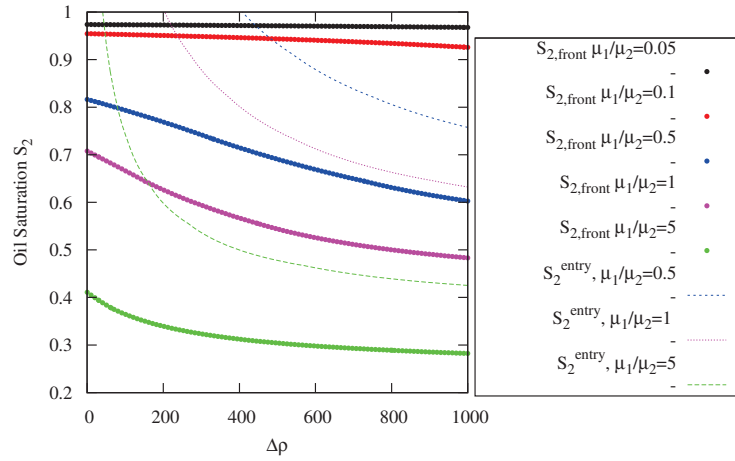


FIGURE 3.11 – Entry and front saturation as function of the density difference $\Delta\rho$ for $v_t = 10^{-4}m \cdot s^{-1}$

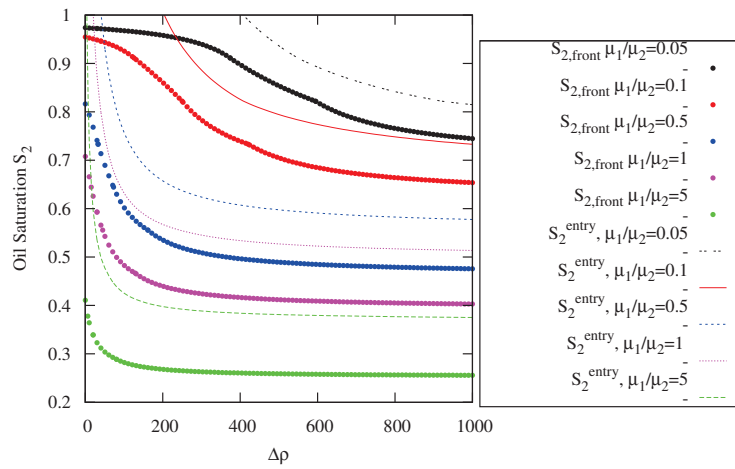


FIGURE 3.12 – Entry and front saturation as function of the density difference $\Delta\rho$ for $v_t = 10^{-5}m \cdot s^{-1}$

capillary effects are present, the saturation equation contains a diffusive part in addition to the advective part, and we require an operator-splitting technique. We also solve the diffusive part using the mixed hybrid finite-element method. However, we solve the advective part of the saturation equation explicitly in the IMPES scheme using a Discontinuous Galerkin Finite-Element Method.

We choose to implement gravity effects in the advective part of the saturation equation because of the advective nature of gravity forces. Some examples of the implementation of gravity effects in the diffusive part of the saturation equation are presented in [Nayagum et al., 2004], [Nayagum, 2001].

We recall that the advective part of the saturation equation for the non-wetting phase is written as follows (see equation (3.37)) :

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} + \frac{1}{\phi} \nabla \cdot (\mathbf{F}(S_2)) = 0.$$

$$\mathbf{F}(S_2) = f_2 \mathbf{v}_t + K f_1 f_2 d(\rho_2 - \rho_1) g \nabla z,$$

with boundary conditions :

$$S_2(x, t = 0) = \begin{cases} 1 & z \leq 0 \\ 0 & z > 0. \end{cases} \quad (3.52)$$

We solve for the term $f_2(S_2) \mathbf{v}_t$, which is strictly monotonic, using an upstream DGFEM, by evaluating of the flux \mathbf{v}_t at the edges and the saturation at the nodes of the cells.

We solve for the term $K f_1(S_2) f_2(S_2) d(S_2) \Delta \rho g \nabla z$ which is not monotonic, using the DGFEM by evaluating of the flux $\Delta \rho g \nabla z$ at the edges and the saturation at the nodes of the cells, as detailed in subsection 3.5.2.

3.5.2 Evaluation of the saturation

As in classical finite-element methods, we divide the domain Ω into triangular elements, called E . We use $\mathbb{P}^1(\Omega)$ basis functions, which can be discontinuous at the edges of each triangle. See [Hoteit and Firoozabadi, 2005], [Younes et al., 2010], [El Soueidy et al., 2009] or Appendix B for more detailed discussions of the DGFEM scheme. The unknowns are the saturations at each node of the cells. For each time step, we seek an approximation of the solution in the local space :

$$V_h = \{ \varphi \in L^\infty(\Omega) \mid \varphi|_E \in \mathbb{P}^1(E) \}. \quad (3.53)$$

Multiplying (3.52) by $\varphi_i^E \in \mathbb{P}^1(E)$ and integrating over E , one obtains

$$\begin{aligned} \phi \int_E \frac{\partial S}{\partial t} \varphi_i^E dX &= - \int_E \nabla \cdot [f_2 \mathbf{v}_t] \varphi_i^E dX. \\ &\quad - \int_E \nabla \cdot [K f_1 f_2 d(\rho_2 - \rho_1) g] \varphi_i^E dX. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Then, using Green's theorem, the weak formulation can be written as

$$\begin{aligned}
 \phi \int_E \frac{\partial S}{\partial t} \varphi_i^E dX = & \\
 & + \underbrace{\int_E f_2 \mathbf{v}_t \cdot \nabla \varphi_i^E dX}_A - \underbrace{\int_{\partial E} f_2 \varphi_i^E \mathbf{v}_t \cdot \mathbf{n} d\Gamma}_B \\
 & + \underbrace{\int_E K f_1 f_2 d(\rho_2 - \rho_1) g \nabla z \cdot \nabla \varphi_i^E dX}_C \\
 & - \underbrace{\int_{\partial E} K f_1 f_2 d(\rho_2 - \rho_1) g \varphi_i^E \nabla z \cdot \mathbf{n} d\Gamma}_D.
 \end{aligned} \tag{3.55}$$

To quantify the volume integrals A and C in element E_J (Fig 3.13), we approximate $f_1(S)$,

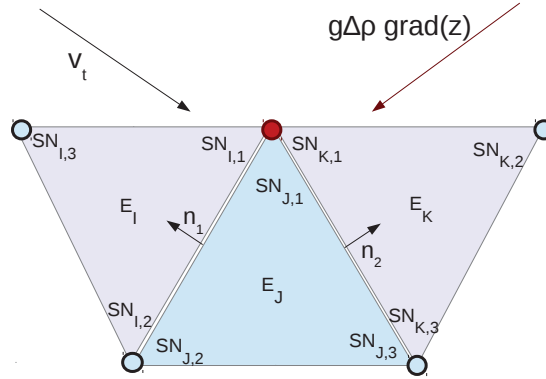


FIGURE 3.13 – Nodes repartition in the triangles

$f_2(S)$ and $d(S)$ by taking the saturation at the cell centre, which corresponds to the mean of the NAPL saturation values at the nodes (see triangle E_J in fig 3.13) :

$$S_2(E_J) = \sum_{n=1,2,3} \frac{SN_{J,n}}{3}.$$

We calculate the contour integral B using the DGFEM by evaluating f_2 at the two upstream nodes of $\mathbf{v}_t \cdot \mathbf{n}_i$, i.e., two adjacent elements E_I and E_J , using a Godunov solver :

$$f_2(S) = \begin{cases} f_2(SN_{J,1}), f_2(SN_{J,2}) & \text{if } \mathbf{v}_t \cdot \mathbf{n}_1 \geq 0, \\ f_2(SN_{I,1}), f_2(SN_{I,2}) & \text{if } \mathbf{v}_t \cdot \mathbf{n}_1 \leq 0. \end{cases} \tag{3.56}$$

To apply the generalised Godunov scheme, we must compare the saturation values with S^* , the maximum of the function $f_1 f_2 d$, which satisfies

$$(f_1 f_2 d)'(S^*) = 0.$$

Hence, we calculate the contour integral D in E_J using the DGFEM by evaluating $f_1 f_2 d$ as a functions of the extreme saturation S^* and using a generalised Godunov solver from [Kaasschieter, 1999], [Eymard et al., 1998] (see fig 3.14). For example, with the two adjacent elements E_J and E_K , we obtain the following at node 1 (node fulfilled in figure 3.13) :

if $\Delta\rho\nabla z \cdot \mathbf{n}_2 \leq 0$,

$$\begin{aligned} & (f_1 f_2 d)(SN_{J,1}) \text{ if } SN_{K,1} < S^* \text{ and } SN_{J,1} < S^*, \\ & (f_1 f_2 d)(SN_{K,1}) \text{ if } SN_{K,1} > S^* \text{ and } SN_{J,1} > S^*, \\ & (f_1 f_2 d)(S^*) \quad \text{if } SN_{K,1} > S^* \text{ and } SN_{J,1} < S^*, \\ & \min\{(f_1 f_2 d)(SN_{K,1}), (f_1 f_2 d)(SN_{J,1})\} \\ & \quad \text{if } SN_{K,1} < S^* \text{ and } SN_{J,1} > S^* \end{aligned}$$

or if $\Delta\rho\nabla z \cdot \mathbf{n}_2 > 0$,

$$\begin{aligned} & (f_1 f_2 d)(SN_{J,1}) \text{ if } SN_{K,1} > S^* \text{ and } SN_{J,1} > S^*, \\ & (f_1 f_2 d)(SN_{K,1}) \text{ if } SN_{K,1} < S^* \text{ and } SN_{J,1} < S^*, \\ & (f_1 f_2 d)(S^*) \quad \text{if } SN_{K,1} < S^* \text{ and } SN_{J,1} > S^*, \\ & \min\{(f_1 f_2 d)(SN_{K,1}), (f_1 f_2 d)(SN_{J,1})\} \\ & \quad \text{if } SN_{K,1} > S^* \text{ and } SN_{J,1} < S^*. \end{aligned}$$

We repeat the scheme for each node in the mesh.

Remark 1 : The numerical method is conservative. Moreover, the numerical flux is consistent with $(f_1 f_2 d) \cdot \mathbf{n}$.

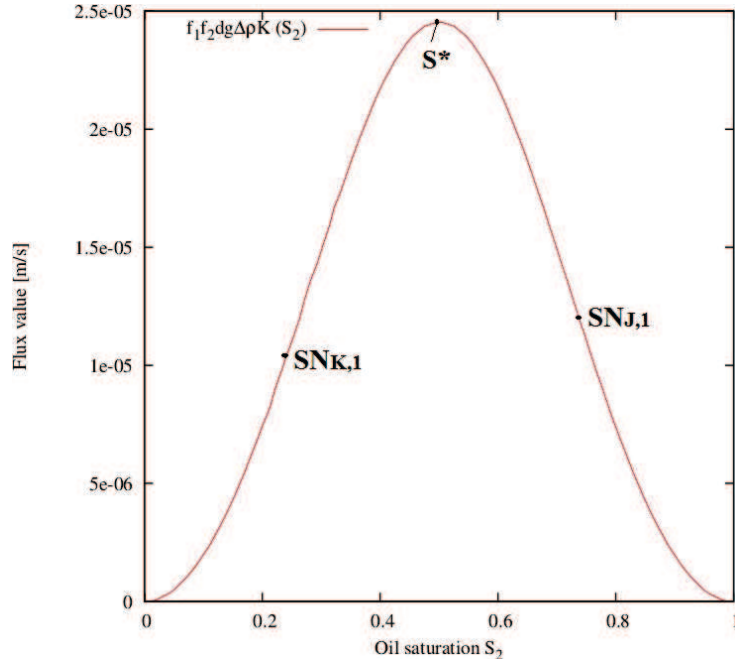
Remark 2 : In the following sections, we also compare the DGFEM scheme with a finite-volume scheme based on the generalised Godunov flux. We expect the DGFEM scheme to produce less numerical diffusion (with the cell saturation and the mean node saturation, as unknowns).

Remark 3 : When gravity effects are not neglected, $S^* \neq S_2^{entry}$, and the algorithm includes many conditional loops. By contrast, when gravity is neglected, the upstream scheme is less costly from the computational point of view.

3.5.3 CFL condition

The resolution of the advective part of the saturation equation is explicit, using a first-order Euler method as a time approximation, and thus, we must respect the Courant-Friedrichs-Lewy condition, which depends on the size of our mesh, the injection rate and the densities of the two fluids. The Courant number is defined as follows, according to [LeVeque, 2002] :

$$C = \frac{\Delta t}{\Delta x} \max_{S \in [0,1]} \|\lambda(S)\|,$$


 FIGURE 3.14 – Evaluation of the nodal saturation according to S^*

where $\lambda(S) = \frac{v_t}{\phi} \frac{\partial F}{\partial S}(S)$ is the wave speed. Our time step must therefore satisfy :

$$\frac{v_t \Delta t}{\phi \Delta x} \max_{S \in [0,1]} \left\| \frac{\partial F}{\partial S} \right\| \leq C = 1.$$

We impose $\Delta t = 0.5$ with a mesh of $\Delta x < 10^{-2}$ m.

Remark 1 : To enforce the local maximum principle, we added a slope limiter proposed by Chavent [Chavent and Jaffré, 1986] to the scheme.

Remark 2 : Under a suitable CFL condition, the scheme presented above is consistent and stable and converges towards the entropy solution of the problem (3.37).

3.6 One-dimensional flow in a homogeneous porous medium

3.6.1 Properties of the fluid and porous medium

We tested the numerical scheme presented above on a two-phase water-NAPL flow simulation in a 10 m high, 1 m wide column of sand, initially saturated with water (figure 3.15). From time $t=0$ until the final time, we simulated the injection of an incompressible NAPL, with Neumann boundary conditions, *i.e.*, a constant total specific discharge v_t . For Examples 2 and 3, the NAPL phase has a density of $\rho_2 = 1456 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$.

We use the characteristics of medium-sized sand in the numerical simulations (table 3.1). The convergence of the numerical schemes has been verified with and without gravity effects for various densities and injection rates (table 3.2), and the results are compared with the quasi-analytical Buckley-Leverett solution in section 3.4.3. The convergence of the scheme towards the quasi-analytical Buckley-Leverett solution is illustrated in figure 3.16.

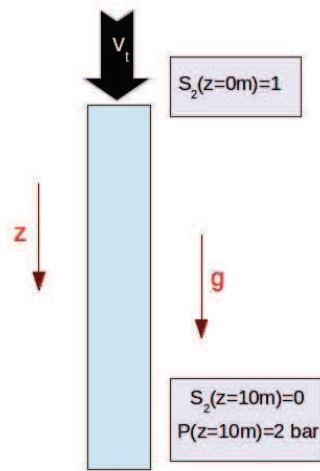


FIGURE 3.15 – Scheme of an NAPL injection into a water-saturated porous medium

TABLE 3.1 – Properties of the porous medium

permeability $K [m^2]$	5×10^{-11}
porosity [-]	0.32
$a [m]$	2×10^{-4}
$\alpha [-]$	0
Gravity constant $[m \cdot s^{-2}]$	9.81

TABLE 3.2 – Properties of the fluid and boundary conditions

Example	1	2	3	4
$ \mathbf{v}_t [m \cdot s^{-1}]$	10^{-3}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}
$\Delta\rho [kg \cdot m^{-3}]$	0/+/-600	456	456	600
$\mu_1 [Pa \cdot s^{-1}]$	10^{-3}	10^{-3}	10^{-3}	10^{-3}
$T_f [s]$	1000	1000	5000	10000
$S_2(x = 0)$	1	1	1	1
$G [-]$	0/0.294/ - 0.294	0.224	2.24	29.4
$\frac{1}{M} [-]$	1/1/1	20	2	1
Case	1/1/3	1	2	2

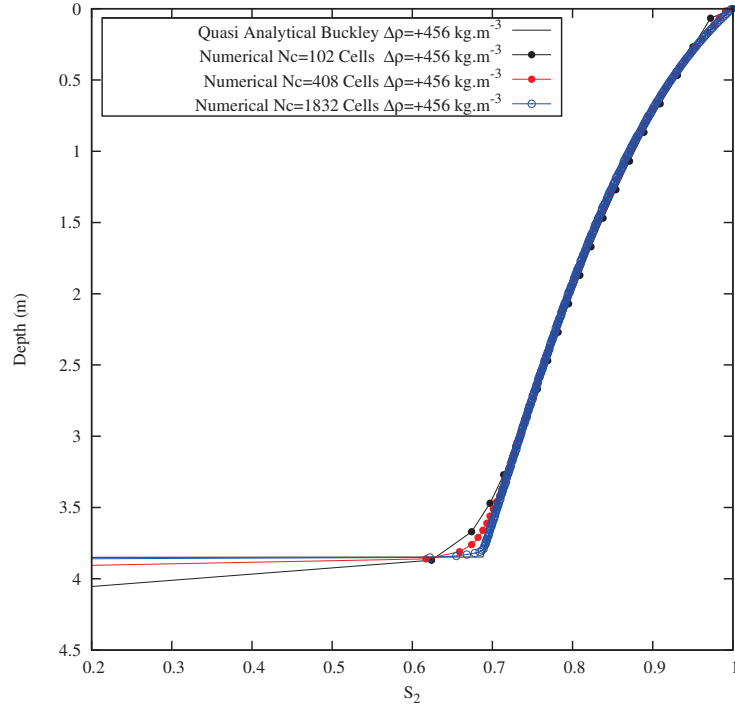


FIGURE 3.16 – Comparison of the numerical solution calculated using DGFEM with the quasi-analytical Buckley-Leverett solution, for $V_t = 10^{-3} m \cdot s^{-1}$ at 1000 s and for three different mesh sizes.

3.6.2 Results and discussion

In Example 1, we observe significant density effects in the two-phase flow simulation for a total velocity of $10^{-3} m \cdot s^{-1}$, at equal viscosities (figure 3.17). The NAPL saturation front decreases as $\Delta\rho$ increases, but goes further. Conversely, as $\Delta\rho$ decreases, the NAPL saturation front rises, but advances less. The variation in the front position as the density difference increases is consistent with experimental observations. Figure 3.18 also provides a comparison of the results calculated using the DGFEM scheme with those of a finite-volume scheme. The DGFEM scheme captures the shape of the front more precisely.

Figure 3.19 presents the numerical results obtained for the second Example, in which the behaviour of a viscous NAPL injected into a water-saturated porous medium is simulated. The high viscosity is responsible for the filling of the pores, but we note that the NAPL moves extremely slowly. This stability is attributable to the high viscosity of the displacing fluid. In figure 3.20, we present the results of Example 3. This is an intermediate situation with a low injection rate and a heavy and low-viscosity NAPL. The NAPL does not fill the pores completely, but it moves quite rapidly. Once again, the DGFEM scheme is more precise in reproducing the shape of the front than is the FV scheme.

In Example 4 (figure 3.21), we study the combined effect of a low flow rate and a high density difference, as expressed by a gravity number that is significantly greater than $\frac{1}{M}$. The flow is literally driven by gravity : the NAPL saturation does not exceed the entry saturation, which corresponds to the saturation in relation 3.51 (see figure 3.12), but the front velocity is higher to preserve mass conservation. In this case, it is clear that the DGFEM captures the backwards

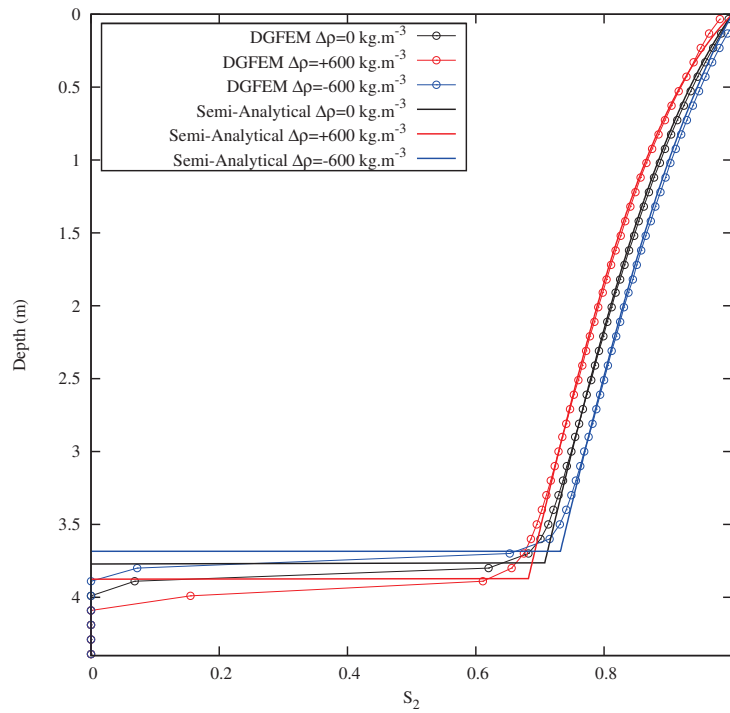


FIGURE 3.17 – *Example 1.a*; comparison of the numerical solution calculated using DGFEM with the quasi-analytical Buckley-Leverett solution, for $v_t = 10^{-3} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ at 1000 s for three NAPL densities and $M = 1$.

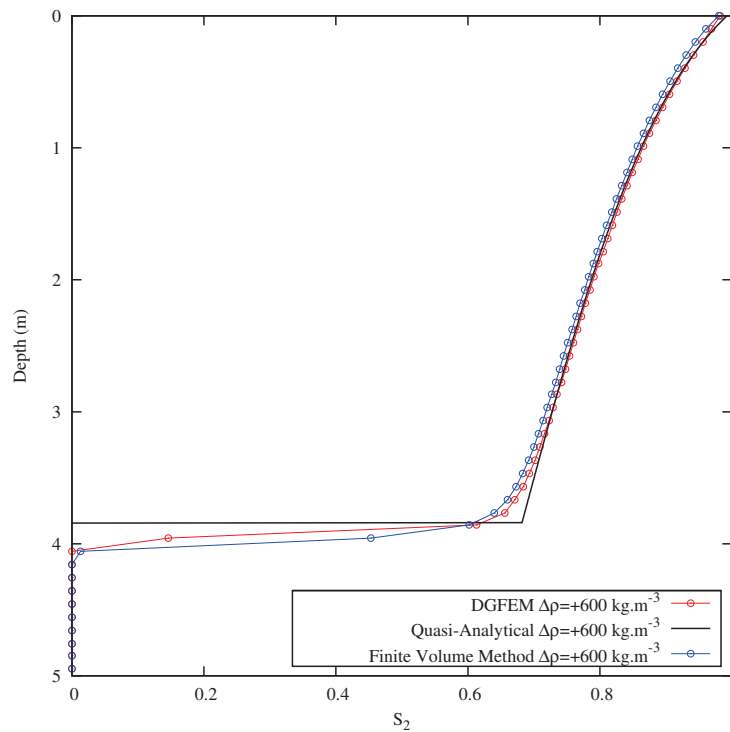


FIGURE 3.18 – *Example 1b*; comparison of the numerical solution calculated using DGFEM and FV with the quasi-analytical Buckley-Leverett solution, for $v_t = 10^{-3} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ at 1000 s and $M = 1$.

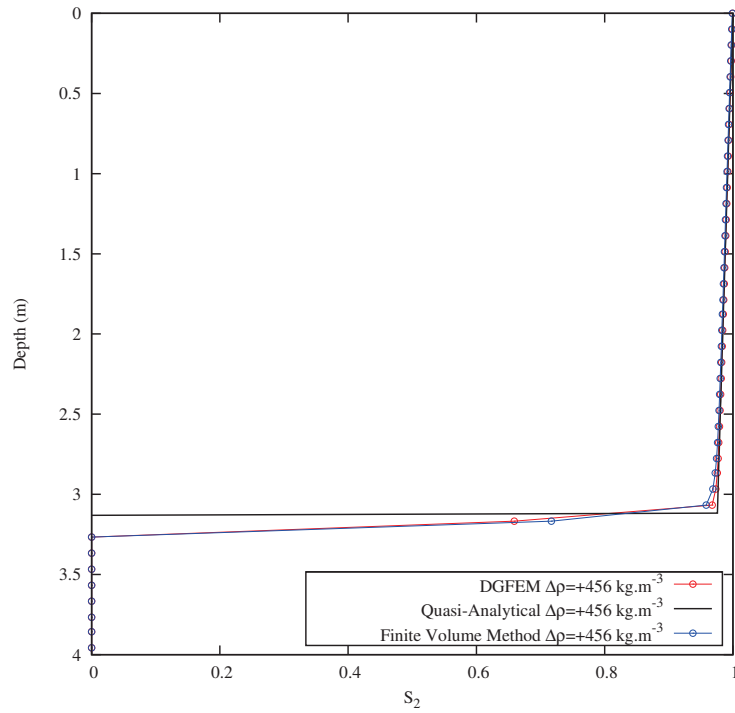


FIGURE 3.19 – Example 2; comparison of the numerical solution calculated using DGFEM and FV with the quasi-analytical Buckley-Leverett solution, for $v_t = 10^{-3} m \cdot s^{-1}$ at 1000 s for NAPL characteristics and $M = 0.05$.

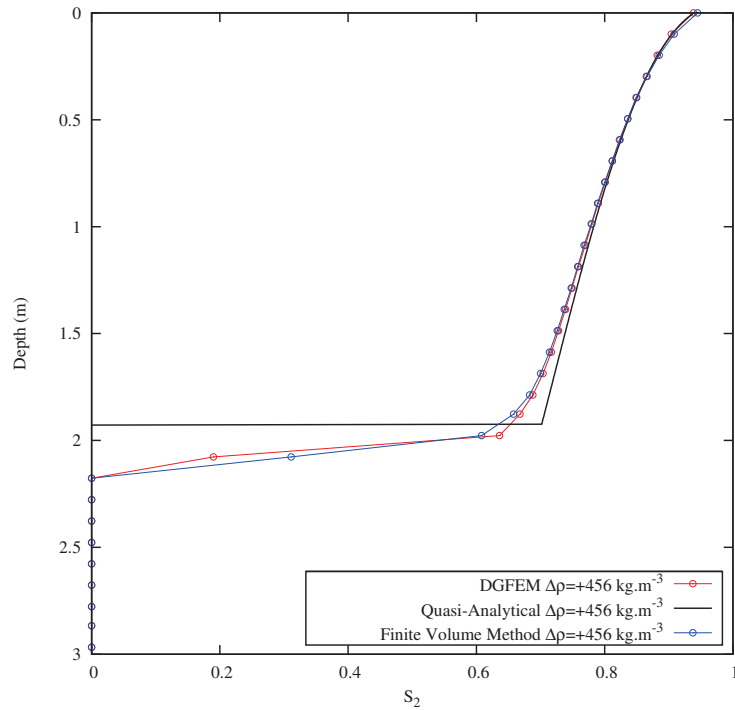


FIGURE 3.20 – Example 3; comparison of the numerical solution calculated using DGFEM and FV with the quasi-analytical Buckley-Leverett solution, for $v_t = 10^{-4} m \cdot s^{-1}$ at 5000 sec. for NAPL characteristics and $M = 0.5$.

discontinuity more precisely.

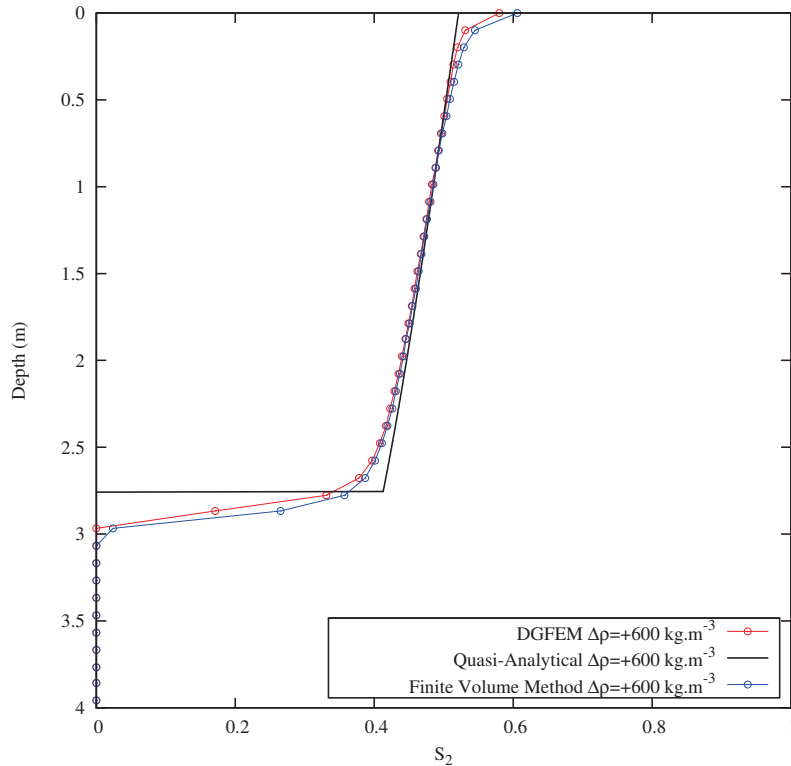


FIGURE 3.21 – *Example 4*; comparison of the numerical solution calculated using DGFEM and FV with the quasi-analytical Buckley-Leverett solution, for $v_t = 10^{-5} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ at 10000 sec. for NAPL characteristics and $M = 1$.

3.6.3 Mass conservation and error analysis

The developed DGFEM numerical scheme converges towards the quasi-analytical solution of the Buckley-Leverett equation. The Discontinuous Galerkin Finite-Elements Method with a generalised Godunov scheme is well-adapted for highly gravity-driven flow and is facile to implement. As demonstrated in figure 3.22, this approach conserves mass. However, the finite-volume scheme conserves mass more accurately.

An error analysis (figure 3.23 and figure 3.24) indicates that both the DGFEM and FV schemes have orders of convergence of less than one because of the discontinuity of the saturation. We also observe a decrease in the order of convergence in Example 4, when a second discontinuity appears in the front. However, globally, the DGFEM scheme exhibits a better order of convergence than does the FV scheme : 0.86 for DGFEM compared with 0.8 for FV in Example 1 and 0.78 for DGFEM compared with 0.76 for FV in Example 4. Studies conducted by Hoteit et al. [Hoteit and Firoozabadi, 2008] have demonstrated comparable orders of convergence in a similar configuration.

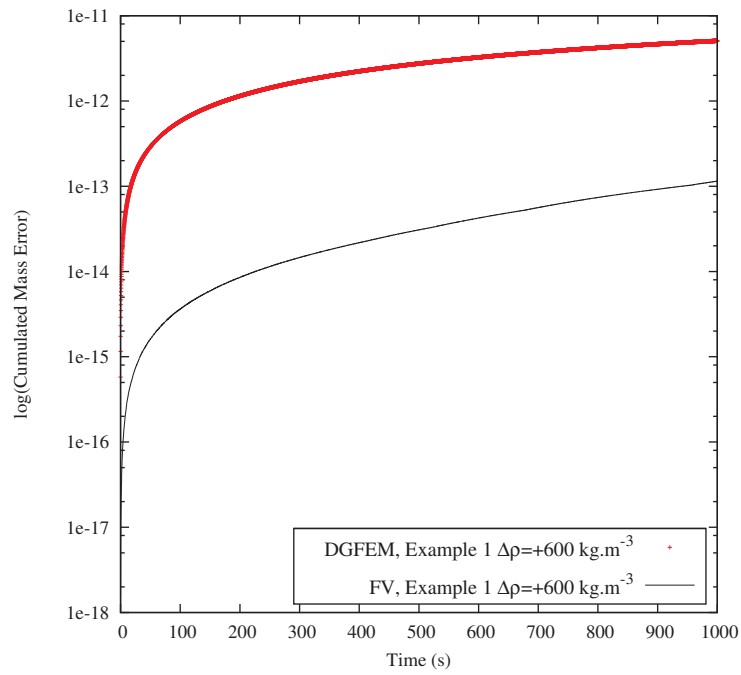


FIGURE 3.22 – Mass cumulated error with parameters from Example 1, $\Delta\rho = +600 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ and $M = 1$

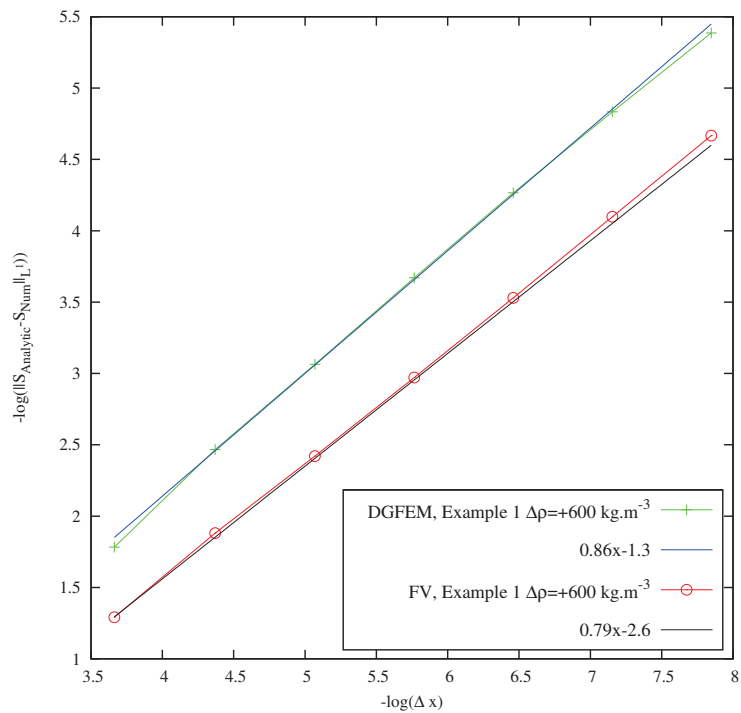


FIGURE 3.23 – Error analysis with parameters from Example 1, $\Delta\rho = +600 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, and $M = 1$ and growing mesh size

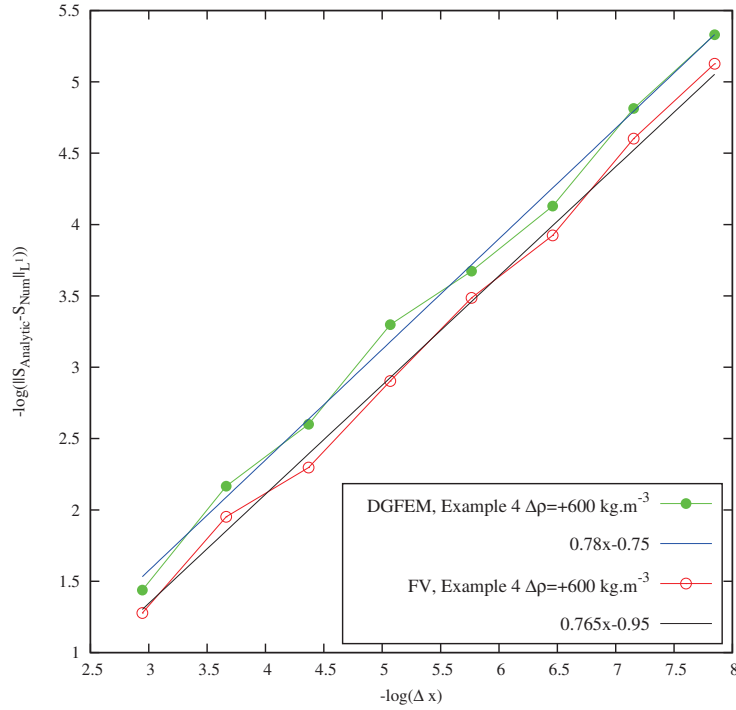


FIGURE 3.24 – Error analysis with parameters from Example 4, with $\Delta\rho = +600 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, and $M = 1$ and growing mesh size

3.7 2D flow in a heterogeneous porous medium

In this section, we apply our DGFEM scheme to a 2D heterogeneous porous medium and compare the results with those of a FV method with a generalised Godunov scheme for two test cases, A and B. For this purpose, we simulate the injection of an NAPL phase into a water-saturated heterogeneous domain Ω_1 with boundary Γ_1 (figure 3.25). We create less permeable inclusions $\Omega_2 \subset \Omega_1$ with a low permeability $K_2 = 5 \times 10^{-14} \text{ [m}^2\text{]}$ and a low porosity $\phi_2 = 0.1$ compared to the permeability $K_1 = 5 \times 10^{-11} \text{ [m}^2\text{]}$ and the porosity $\phi_1 = 0.3$ of $\Omega_1 \setminus \Omega_2$. In addition, we impose the Dirichlet condition $S_2 = 1$ for the NAPL saturation on the injection zone $\Gamma_3 \subset \Gamma_1$ centred around x_0 . Neumann boundary conditions are imposed : $v_t = 0$ on $\Gamma_1 \setminus \Gamma_3$ and $v_t = v$ on Γ_3 . To test gravity effects in heterogeneous conditions, the simulations are performed with high density differences between the water and the displacing fluid, at two different total specific discharge rates v_t . We recall that the latter quantity is constant over time and is calculated via the DGFEM as we solve the pressure equation. Additional flow and soil parameters are provided in table 3.3.

3.7.1 Spatial moment analysis

Spatial moment analysis is often used for fluid-plume monitoring. Following the definitions of [Aris, 1956], [Yeh et al., 2005] and [Ounaies et al., 2013], the ij -th spatial moment of NAPL saturation at a given time is

$$M_{ij} = \int_{\mathbb{R}^2} S_2(x, z) x^i z^j dx dz \quad (3.57)$$

The location of the centre of mass of NAPL saturation is given by

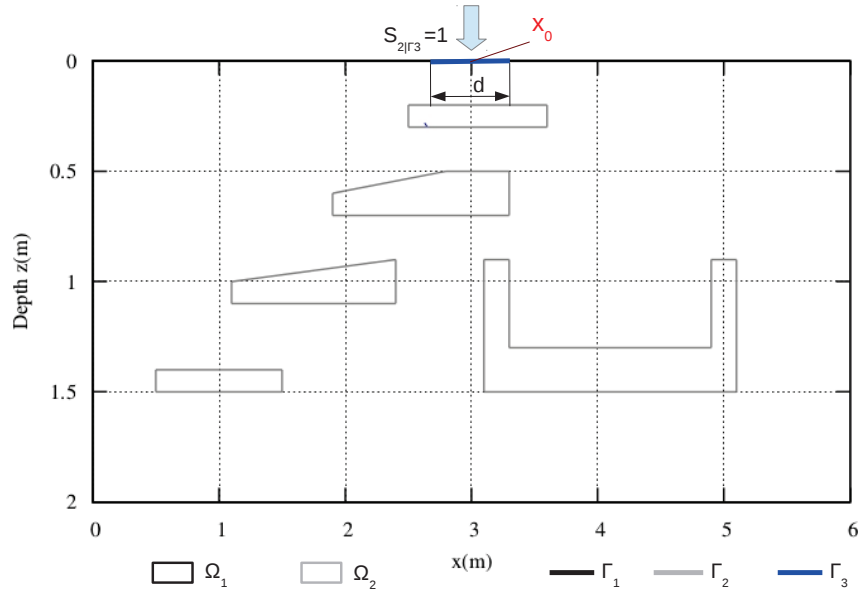


FIGURE 3.25 – 2D simulation domain and boundary conditions.

$$\bar{x} = \frac{M_{10}}{M_{00}} [m] \quad \text{and} \quad \bar{z} = \frac{M_{01}}{M_{00}} [m]. \quad (3.58)$$

The spreading of the NAPL saturation distribution about its mass centre is described by the standard deviations in x -direction σ_{xx} and z -direction σ_{zz} which are given by the following spatial variances in the x or z direction :

$$\sigma_{xx}^2 = \frac{M_{20}}{M_{00}} - \bar{x}^2 [m^2] \quad \text{and} \quad \sigma_{zz}^2 = \frac{M_{02}}{M_{00}} - \bar{z}^2 [m^2]. \quad (3.59)$$

3.7.2 Results and discussion

In figures 3.26, 3.27 and 3.28, we present the results of the water-NAPL flow simulation with a high injection rate. From figure 3.26 to figure 3.27, we note that the FV scheme is more diffusive than the DGFEM scheme : the plume is wider, and we also observe in figure 3.27 that the fluid breaks through the highest inclusion. However, when the DGFEM scheme is used, this phenomenon is milder : as shown in figure 3.26, the obstacle seems to be captured more precisely, such that the NAPL front passes it by. As a consequence, the fluid is diverted to the right, and is held back by the large inclusion, whereas it travels down straight downwards in figure 3.27. When we compare the results obtained using a fine mesh to those obtained using a coarse mesh in figure 3.28, we observe that the fluid now pierces through the first obstacle, as observed for the FV scheme. The consequence of this is quite spectacular : the plume is wider than for the fine grid, and the saturation front extends much lower. In Example A, a significant component of the NAPL is slowed by the large inclusion.

In all figures, the position of the centre of mass from the initial time to the final time indicates that the NAPL front is globally diverted to the right in Example A. In Example A calculated using the DGFEM on a fine grid, the effect is amplified because the NAPL passes by the inclusion.

TABLE 3.3 – Setup of the numerical examples

Example	A	B
d [m]	0.5	0.5
α [-]	0	0
$ \mathbf{v}_t $ [$m \cdot s^{-1}$]	10^{-3}	10^{-5}
T_f [s]	8000	80000
μ_1 [$Pa \cdot s^{-1}$]	1.2×10^{-3}	1.2×10^{-3}
$\frac{1}{M}$ [-]	2.4	2.4
$\Delta\rho$ [$kg \cdot m^{-3}$]	600	600
$ G $ [-]	0.245	24.5
ϕ_1 [-]	0.3	0.3
ϕ_2 [-]	0.1	0.1

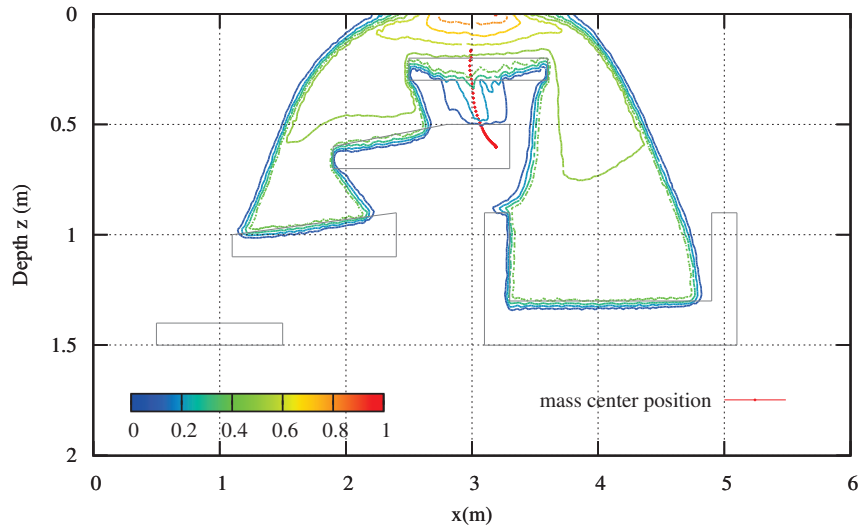


FIGURE 3.26 – Example A; final distribution of NAPL saturation calculated with DGFEM on a fine grid.

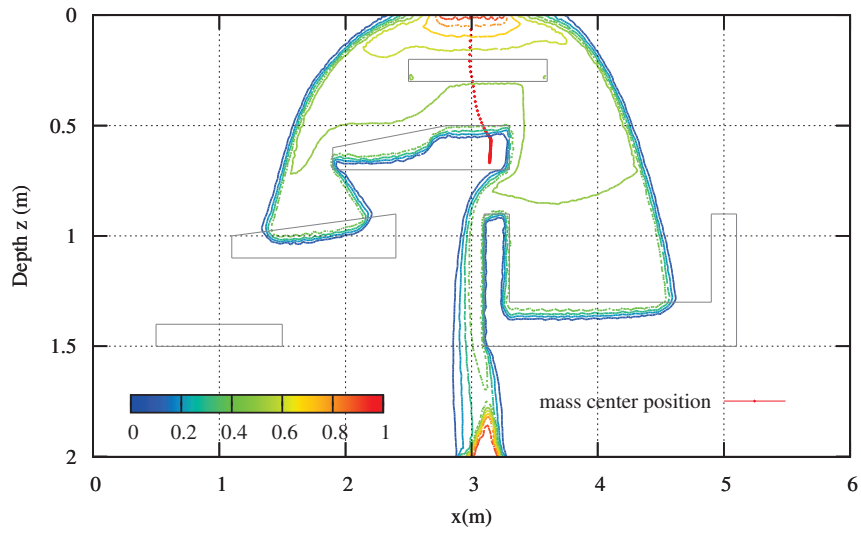


FIGURE 3.27 – Example A ; final distribution of NAPL saturation calculated with FV on a fine grid.

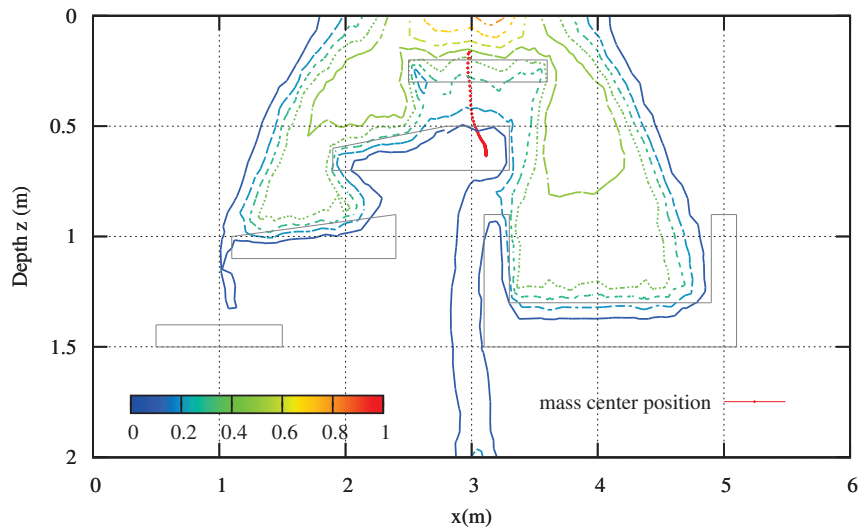


FIGURE 3.28 – Example A ; final distribution of NAPL saturation calculated with DGFEM on a coarse grid.

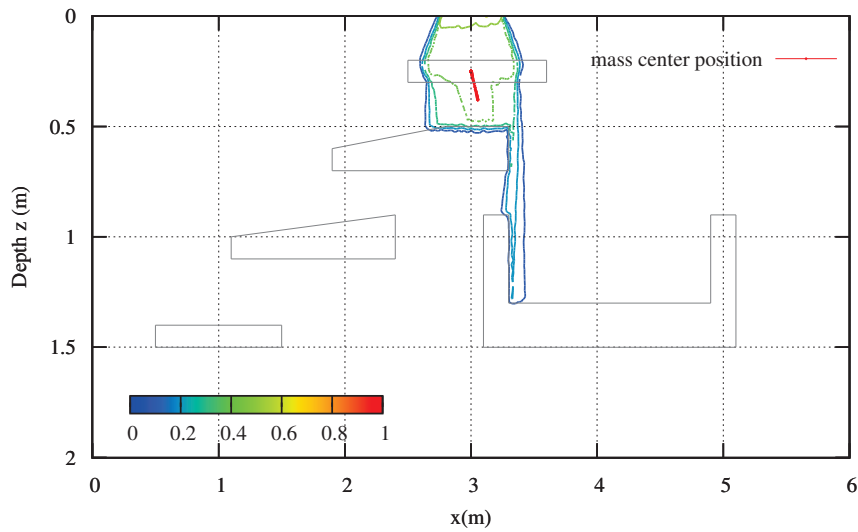


FIGURE 3.29 – Example B ; final distribution of NAPL saturation calculated with DGFEM on a fine grid.

Figures 3.29 and 3.30 represent the results of the water-NAPL flow simulation with a low injection rate. We observe that the Finite Volume scheme is characterised by higher diffusion. Clearly, the heterogeneities are captured more precisely by the DGFEM. In both figures, a fast, narrow flow of the heavy NAPL front is evident. In Example B, the NAPL front is no longer diverted by the first inclusion. Furthermore, the saturation rate diminishes more abruptly in Example B than in Example A.

Finally, we note that the centre of mass is still moving downwards and to the right in Example B, a deviation that is amplified in Example A.

The spatial moment analysis presented in figure 3.31 yields the position of the centre of mass as a function of time and the deviations along x and z .

The spatial moment analysis proves that the fluid globally spreads towards the bottom, as expected, and to the right because of the geometry of the medium. In addition, the centre of mass is diverted to the right in each case, which accounts for the global dispersion to the right. In Example A, calculated using the DGFEM, we observe a slight increase followed by a decrease in the centre-of-mass depth associated with an increase and a reduction, respectively, in the standard deviations in the z direction at the beginning of the simulations. This behaviour could be caused by an accumulation of NAPL on the highest lens at the beginning of the simulation, followed by a decrease in the amount of accumulated NAPL when it pierces the lense

In Example A, we note that the standard deviation of the position of the centre of mass in the x direction is more important for the DGFEM with a fine grid than for the FV scheme. This finding could also be explained by the presence of the inclusions : in Example A calculated using the DGFEM with a fine grid, the fluid does not truly pierce the highest inclusion and thus passes by it, unlike for the FV scheme. The importance of the standard deviation of the NAPL layer in the x direction in Example A calculated using the DGFEM with a coarse grid must therefore be a consequence of numerical diffusion.

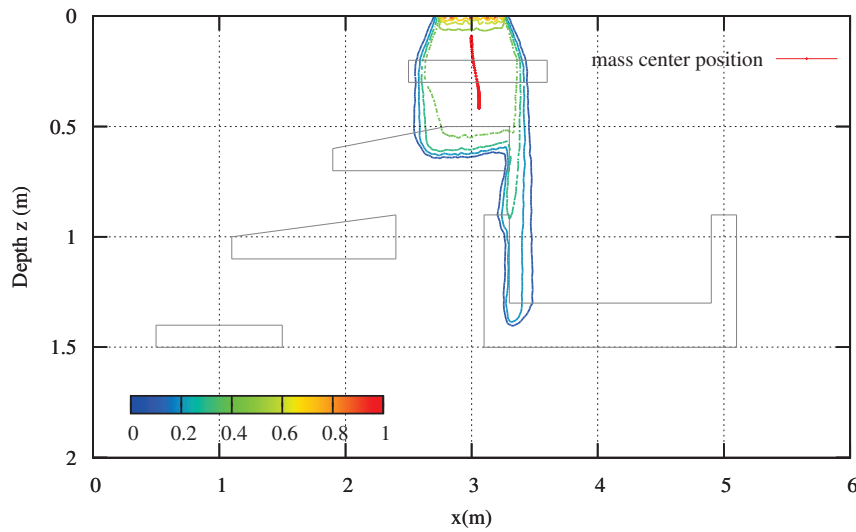


FIGURE 3.30 – Example B ; final distribution of NAPL saturation calculated with FV on a fine grid.

In Example B, we confirm our observation that the standard deviation of the NAPL layer in the x direction is dramatically reduced as the gravity number increases. In fact, the fluid no longer bypasses the inclusion according to the DGFEM scheme, and the flow is essentially directed towards the bottom. Furthermore, the final standard deviation in the z direction is lower for the FV scheme than for the DGFEM. Finally, we observe that the standard deviation in the x direction diminishes for the DGFEM, whereas it increases for the finite-volume method. Once again, in the DGFEM scheme, the NAPL is retained by the lens and laterally displaced resulting in an initial increase followed by a narrowing of the NAPL spread.

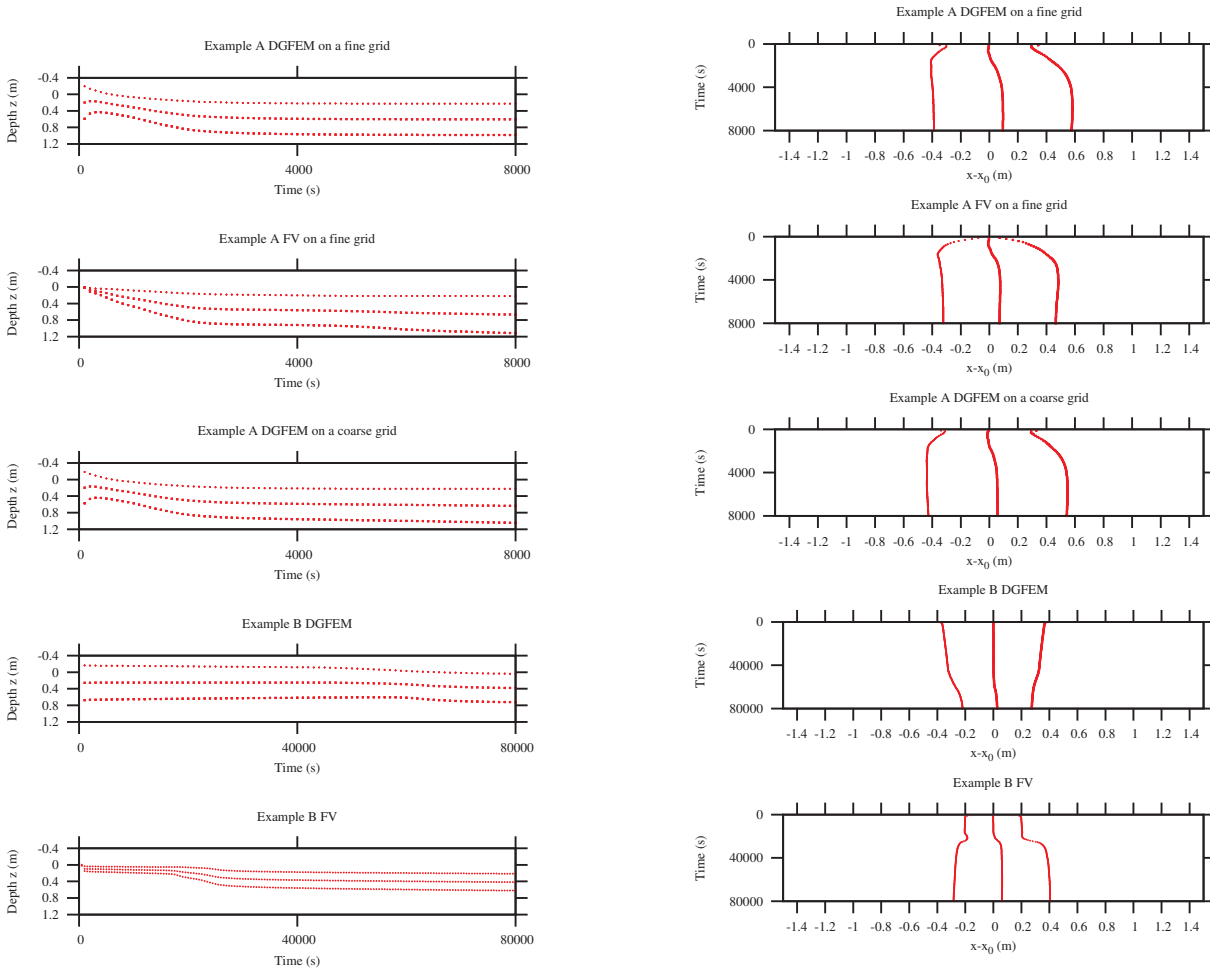


FIGURE 3.31 – Spatial moments as function of time. On the left : vertical position of the mass centre (middle-line) and its deviations in z -direction (upper line $\bar{z} - \sigma_{zz}$, lower line $\bar{z} + \sigma_{zz}$). On the right : horizontal position of the mass centre and its deviations in x -direction (left line $\bar{x} - \sigma_{xx}$, right line $\bar{x} + \sigma_{xx}$).

Conclusion

This paper analyses the impact of a significant density difference on the evolution of the saturation front in a two-phase water-NAPL flow without capillary effects.

An analytical study allowed the evaluation of an entry saturation less than or equal to a boundary condition at the top of the domain. A similar approach to multi-dimensional two-phase flow with an analysis of the speed of the waves could be used to quantify the NAPL entry saturation, which is important in field-scale applications.

We used a fractional flow approach with the global pressure formulation. The vanishing capillarity hypothesis led us to a hyperbolic equation with a non-monotonic flux function in the saturation equation; therefore the classical DGFEM scheme required the addition of a generalised Godunov scheme for the proper evaluation of the fractional flows and mobilities of the water and NAPL. Our work demonstrated that a significant variation in the density differences affects the overall behaviour of the flow, and we confirmed that this behaviour is directly related to the gravity number.

In dimension two, we illustrated that the Discontinuous Galerkin Finite-Element Method scheme can more precisely capture heterogeneities for both high and low injection rates than can the finite-volume scheme. In addition, our modelling of the displacement of NAPL in a water-saturated porous medium on a continuum scale is in agreement with similar displacements observed in column studies in laboratory [Nsir and Schäfer, 2010].

In our test cases, we imposed a Dirichlet saturation condition at the upper boundary of the domain, and we reproduced one end of the rarefaction wave and the front shock wave using the countercurrent flow described by [Riaz and Tchelepi, 2006]. The well-known fingering phenomenon caused by gravity and viscosity effects at the pore scale is not discussed here because our study focuses on macroscopic flow conditions without any perturbations in the initial saturation field. However, studies by [Riaz and Tchelepi, 2006] based on matched-asymptotic-expansion analysis accounting for perturbations in the initial saturation distribution have provided an interesting approach to the study of instabilities in a two-phase flow.

In future, a generalised Godunov scheme could be applied with the entire flux function \mathbf{F} taken into account, and the results could be compared with those of our split approach in terms of computational effort and the numerical efficiency of the calculated saturation field. Preliminary tests pointed out the equivalence of the presented scheme and a similar scheme based on the entire flux function.

Appendix A : Evolution of the entry and front saturations as a function of M .

Appendix B : The Discontinuous Galerkin Finite-Element Method

Let E be a reference triangle $((0,0);(1,0);(0,1))$.

We consider basis functions in

$V_h = \{\phi \in L^\infty(\Omega) | \phi|_E \in \mathbb{P}^1(E)\}$ as follows :

$$\begin{aligned} \varphi_1^E(x, y) &= 1 - x - y, \quad \varphi_2^E(x, y) = x, \quad \varphi_3^E(x, y) = y, \\ \varphi_i^E(x_j, y_j) &= \delta_{ij}. \end{aligned}$$

We also define vectorial basis functions using $H(\text{div}, \Omega)$:

$$\begin{aligned} \Phi_1^E(x, y) &= (x, y - 1), \quad \Phi_2^E(x, y) = (x - 1, y) \\ \Phi_3^E(x, y) &= (x, y). \end{aligned} \tag{3.60}$$

Let SN_j^E be the oil saturation of the node (x_j, y_j) of cell E .

The saturation is expressed over E in the V_h basis :

$$S_2(\mathbf{x}, t)^E = S_2^E = \sum_{j=1}^3 SN_j^E(t) \varphi_j^E(\mathbf{x}).$$

In the same manner, we approximate the fractional flows to first order :

- $f_1(S_2) = \sum_j f_1(SN_j) \varphi_j^E$
- $f_2(S_2) = \sum_j f_2(SN_j) \varphi_j^E$
- $d(S_2) = \sum_j d(SN_j) \varphi_j^E$.

The fluxes \mathbf{v} can be approximated using the **trace values** on the edges :

$$\mathbf{v} = \sum_l \mathbf{v}_l \Phi_l(\mathbf{x}), \quad \mathbf{g} = \sum_l \mathbf{g}_l \Phi_l(\mathbf{x})$$

where

$$\mathbf{g} = (\rho_2 - \rho_1)g\mathbf{K} \cdot \nabla z.$$

Acknowledgements Financial support for this research from the Ministère de l'Enseignement supérieur et de la Recherche and from the Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Energie (ADEME) is gratefully acknowledged. The authors would also like to thank Prof. Frederick Delay and Prof. Philippe Ackerer for their valuable comments and suggestions.

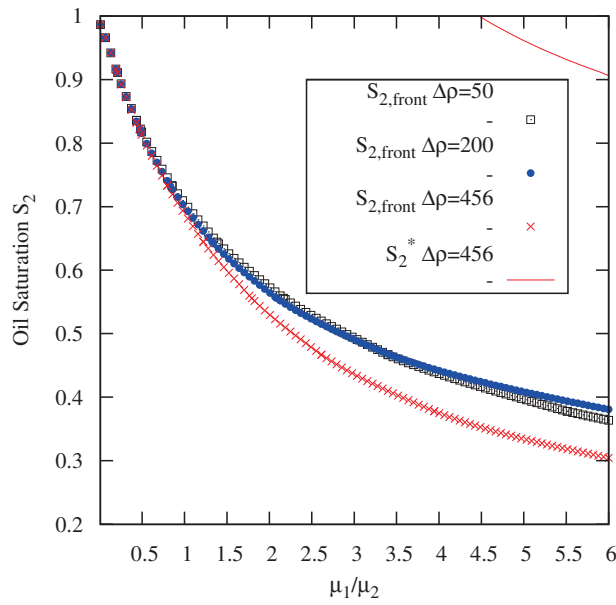


FIGURE 3.32 – Entry and front saturation as function of the density difference $\Delta\rho$ for $v_t = 10^{-3}m \cdot s^{-1}$

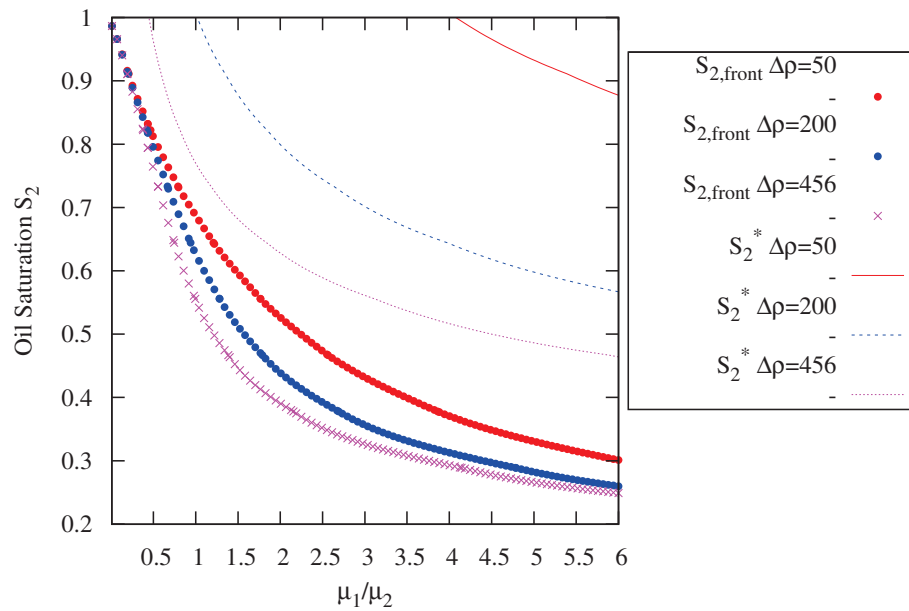


FIGURE 3.33 – Entry and front saturation as function of the density difference $\Delta\rho$ for $v_t = 10^{-4}m \cdot s^{-1}$

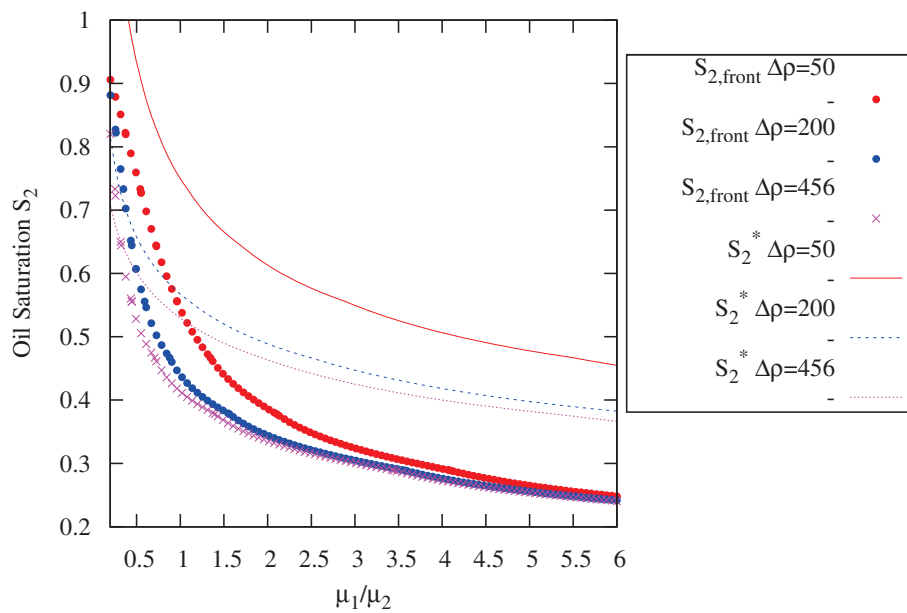


FIGURE 3.34 – Entry and front saturation as function of the density difference $\Delta\rho$ for $v_t = 10^{-5}m \cdot s^{-1}$

4

Déplacement de fluides non miscibles induit par la diffusion

Après avoir implémenté les effets gravitaires dans le code d'écoulement diphasique incompressible, nous nous focalisons sur la validation de l'opérateur de diffusion de l'équation de saturation. Son principal inconvénient est d'être très fortement non linéaire, justifiant dès lors l'usage du schéma IMPES introduit au chapitre 2. Nous testons ses réponses dans une série de cas-tests, sur la base de l'écoulement diphasique incompressible à contre-courant (à vitesse totale nulle) de Mc Worther et Sunada. Ces derniers ont démontré l'existence d'une solution analytique de l'écoulement non gravitaire de deux fluides incompressibles [McWhorther and Sunada, 1990].

La deuxième partie du chapitre aborde la simulation d'un drainage sur le modèle 2D d'un milieu poreux saturé inspiré du bassin d'expérimentation SCERES (Site Contrôlé Expérimental de Recherche pour la réhabilitation des Eaux et des Sols) du Laboratoire d'Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg, situé sur le campus CNRS de Strasbourg.

Nous travaillerons dans tout ce chapitre avec un système d'équations d'écoulement diphasique incompressible fluide mouillant-fluide non mouillant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \frac{\partial S_{n\omega}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}_{n\omega} = 0 \\ \mathbf{v}_{n\omega} = \nu_{n\omega} \mathbf{v} + \nu_{\omega} \nu_{n\omega} d(\rho_{n\omega} - \rho_{\omega}) \mathbf{K} \cdot \nabla z - \nu_{\omega} \nu_{n\omega} d \frac{dP_c}{dS_{n\omega}}(S_{n\omega}) \mathbf{K} \cdot \nabla S_{n\omega} \\ S_{\omega} + S_{n\omega} = 1 \end{array} \right. \quad (4.1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \\ \mathbf{v} = -d\mathbf{K} \cdot [\nabla P - \bar{\rho}g\nabla Z] \\ P = P_{n\omega} + P_c^g \\ P_c^g(S_{\omega}) = - \int_0^{S_{n\omega}} \nu_{\omega} \frac{\partial P_c}{\partial S_{n\omega}} dS_{n\omega} \\ P_c = P_{n\omega} - P_{\omega} \end{array} \right. \quad (4.2)$$

4.1 Le problème de Mc Worther Sunada

A la température de 20°C , la viscosité de l'eau est près de 60 fois supérieure à celle de l'air. De plus, il est raisonnable de considérer que lors d'un drainage sur le bassin, les variations temporelles de la pression de l'air sont relativement lentes, et que la pression de l'air reste proche de la pression atmosphérique. Nous supposons dans toute la suite du chapitre que les fluides du système sont incompressibles (la vitesse totale est constante au sein du domaine, mais pas nécessairement dans le temps). Le problème de Mc Whorther Sunada est utilisé pour décrire le déplacement unidirectionnel de deux phases, en particulier dans une configuration purement diffusive. Mc Whorther et Sunada ont proposé une solution semi-analytique associée au problème d'écoulement à contre-courant (vitesse totale nulle en tout point et à tout instant) que nous examinons dans cette section. Nous négligerons les effets gravitaires pour cet écoulement horizontal. Pour plus de détails concernant la solution semi-analytique utilisée dans les comparaisons numériques, on pourra se référer à l'annexe B.

Remarque : Compte tenu du problème posé, il n'y a pas de résolution de la partie convective de l'équation de saturation.

4.1.1 Evaluation du terme diffusif en fonction des traces de saturation

Le cas-test reproduit l'écoulement à contre-courant de Mc Whorther-Sunada sur un domaine à maillage triangulaire représenté dans la figure 4.1 ci-dessous. On compte alors 8 mailles en entrée. Dans l'exemple qui vient, les deux phases en présence sont l'eau (phase mouillante ω) et une huile (phase non mouillante $n\omega$) dont la viscosité est égale à celle de l'eau.

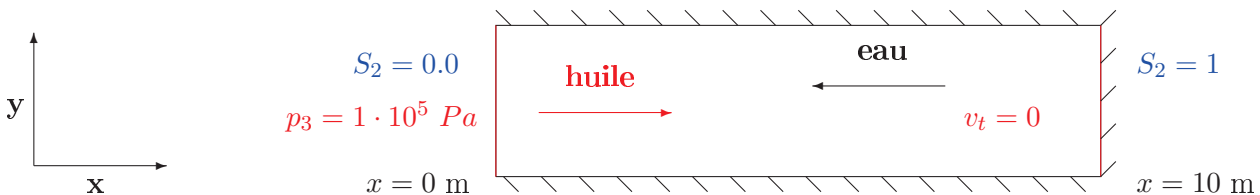


FIGURE 4.1 – *Écoulement à contre-courant d'eau dans un domaine initialement saturé en huile : conditions aux limites*

La partie diffusive de l'équation de saturation d'un fluide non mouillant déplaçant un fluide mouillant en formulation flux fractionnaire diphasique incompressible s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \frac{\partial S_{n\omega}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{D}(S_{n\omega}) = 0, \\ S_{n\omega}(x, t) \in L_{LOC}^{\infty}(\mathbb{R} \times]0; +\infty[) \\ S_{n\omega}(x, 0) = S_{i,n\omega} \\ \mathbf{D}(S_{n\omega}) = -f_{n\omega} f_{\omega} d \frac{dP_c}{dS_{n\omega}}(S_{n\omega}) \mathbf{K} \cdot \nabla S_{n\omega} \\ \mathbf{D}(S_{n\omega}) \in C^1(]0; 1]) \end{array} \right. \quad (4.3)$$

Dans cette configuration, nous avons testé le code avec les méthodes de discrétisation A (2.58) et B (2.59) décrites dans le chapitre 2. Les caractéristiques du milieu poreux ainsi que celles du fluides utilisés pour le problème de Mc Worther Sunada à contre-courant ($\mathbf{v} = 0$) sont consignées dans le tableau 4.1 :

Paramètres du milieu	symbole	valeur	unité
Porosité	ϕ	0.3	$[-]$
Permeabilité intrinsèque	K	1 $\times 10^{-7}$	$[m^2]$
Paramètres du fluide	symbole	valeur	unité
Masse volumique de l'air	ρ_3	1.29	$[kg/m^3]$
Masse volumique de l'eau	ρ_1	1000	$[kg/m^3]$
Masse volumique de l'huile	ρ_2	1000	$[kg/m^3]$
Modèle de perméabilité relative	BC	-	
Pression d'entrée	P_d	1 $\times 10^3$	$[Pa]$
Paramètre de forme	λ	2	$[-]$
Saturation résiduelle en eau	S_{1r}	0.1	$[-]$
Saturation résiduelle en huile	S_{2r}	0.01	$[-]$
Saturation résiduelle en air	S_{3r}	0.01	$[-]$
Viscosité dynamique de l'eau	μ_1	1 $\times 10^{-3}$	$[Pa \cdot s]$
Viscosité dynamique de l'air	μ_3	1 $\times 10^{-5}$	$[Pa \cdot s]$
Viscosité dynamique de l'huile	μ_2	1 $\times 10^{-3}$	$[Pa \cdot s]$
Constante de gravité	g_z	0	$[m/s^2]$
Paramètres liés au modèle numérique	symbole	valeur	unité
Pas de temps	Δt	0.1/0.5/1	$[s]$

TABLE 4.1 – Paramètres utilisés pour le problème de Mc Whorther Sunada

Les courbes d'évolution de la saturation en eau dans chaque maille pour un écoulement à contre-courante eau-huile à viscosités égales sont représentés dans la figure 4.2. La formulation A donnée dans le chapitre 2 conduit à sous-estimer l'avancée du front de saturation, et donne lieu à une solution non physique, tandis que la formulation B donne des courbes qui reproduisent fidèlement le front de saturation. Bien que la discrétisation utilise des mailles triangulaires et non rectangulaires, nous observons un phénomène similaire à celui décrit dans [Nayagum, 2001]. Les valeurs de saturation sur une ligne de maille de même ordonnée y sont globalement confondues, mais on constate tout de même une légère diffusion au niveau du front.

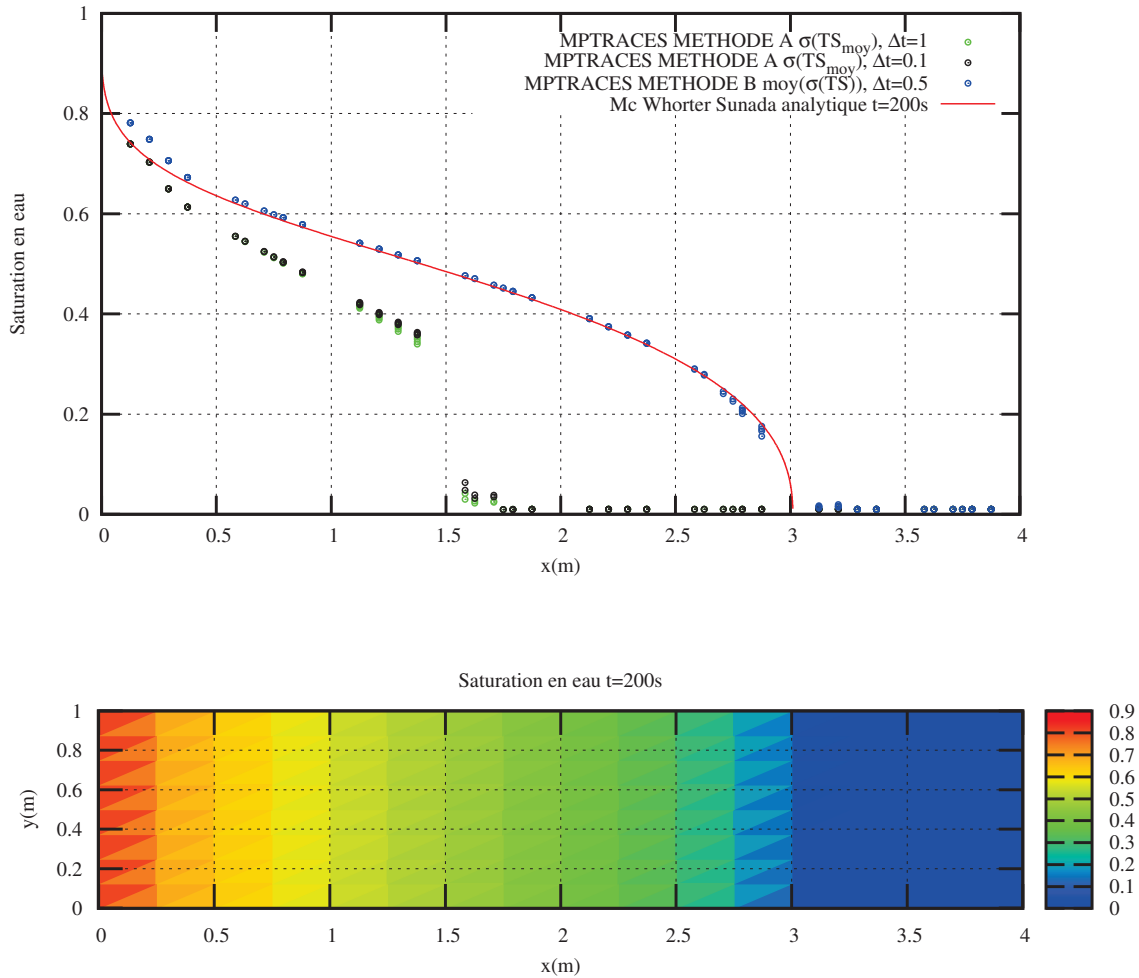


FIGURE 4.2 – Simulation d'un écoulement eau-huile. Comparaison des profils de saturation numériques et analytiques pour les méthodes A et B (en haut); distribution de saturation numérique de la méthode B (en bas).

4.1.2 Écoulement diphasique à contre-courant : effet du contraste de viscosité

Le deuxième cas-test consiste en un écoulement horizontal eau-air, ce qui implique un fort contraste de viscosités. Cette fois-ci, le fluide mouillant est l'eau et le fluide non mouillant est l'air.

Nous traitons deux exemples : un écoulement d'air dans un milieu initialement saturé en eau (exemple 1), ainsi qu'un écoulement à contre-courant d'eau dans un milieu initialement saturé en air (exemple 2). Le pas de temps initial des simulations est de 0.5s. Les équations différentielles et conditions aux limites sont rappelées ci-dessous (équations 4.4 et figures 4.3 et 4.4) :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \phi \frac{\partial S_3}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{D}(S_3) = 0, \\
 \text{Exemple 1 : } S_3(x, 0) = \begin{cases} 1 & \text{si } x < 0 \\ 0 & \text{si } x > 0 \end{cases} \\
 \text{Exemple 2 : } S_1(x, 0) = \begin{cases} 1 & \text{si } x < 0 \\ 0 & \text{si } x > 0 \end{cases} \\
 \mathbf{D}(S_3) = f_1 f_3 d \frac{dP_c}{dS_1} \mathbf{K} \cdot \nabla S_3 \\
 \mathbf{v} = \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_3 = 0 \\
 P(\mathbf{x}, t) = P_1(\mathbf{x}, t) = P_3(\mathbf{x}, t)
 \end{array} \right. \quad (4.4)$$

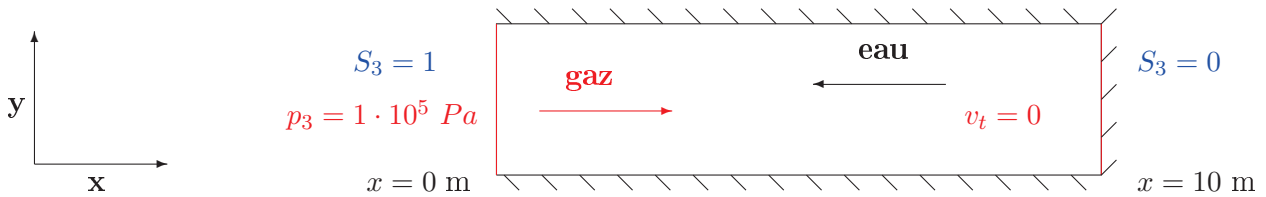


FIGURE 4.3 – Conditions aux limites de l'exemple 1.

Dans les figures 4.5 et 4.6 relatives respectivement au premier exemple et au second, nous avons représenté la solution semi-analytique ainsi que la solution numérique générée par notre code de l'évolution du front de saturation en gaz à \$t=50s/t=100s\$ puis à \$t=100s/t=200s\$. Pour ces deux cas, la distance parcourue par le front diminue entre le premier et le second intervalle de temps, car le flux diffusif diminue fortement en fonction du temps.

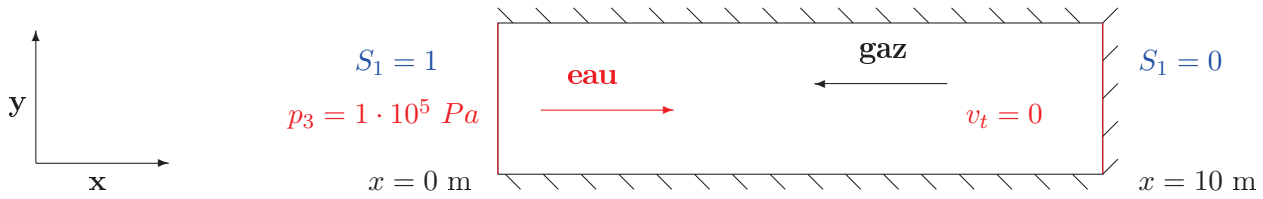


FIGURE 4.4 – Conditions aux limites de l'exemple 2.

En comparant les deux figures, il apparaît que le contraste de viscosité induit dans le premier exemple un front beaucoup plus avancé et ramassé que dans le deuxième exemple. Ce dernier cas montre une capacité de l'eau à saturer le milieu plus importante, tandis que le flux diffusif en eau est plus faible. Cette tendance correspond aux observations expérimentales qui ont pu être réalisées en colonne horizontale ([Lenormand and Zarcone, 1989]).

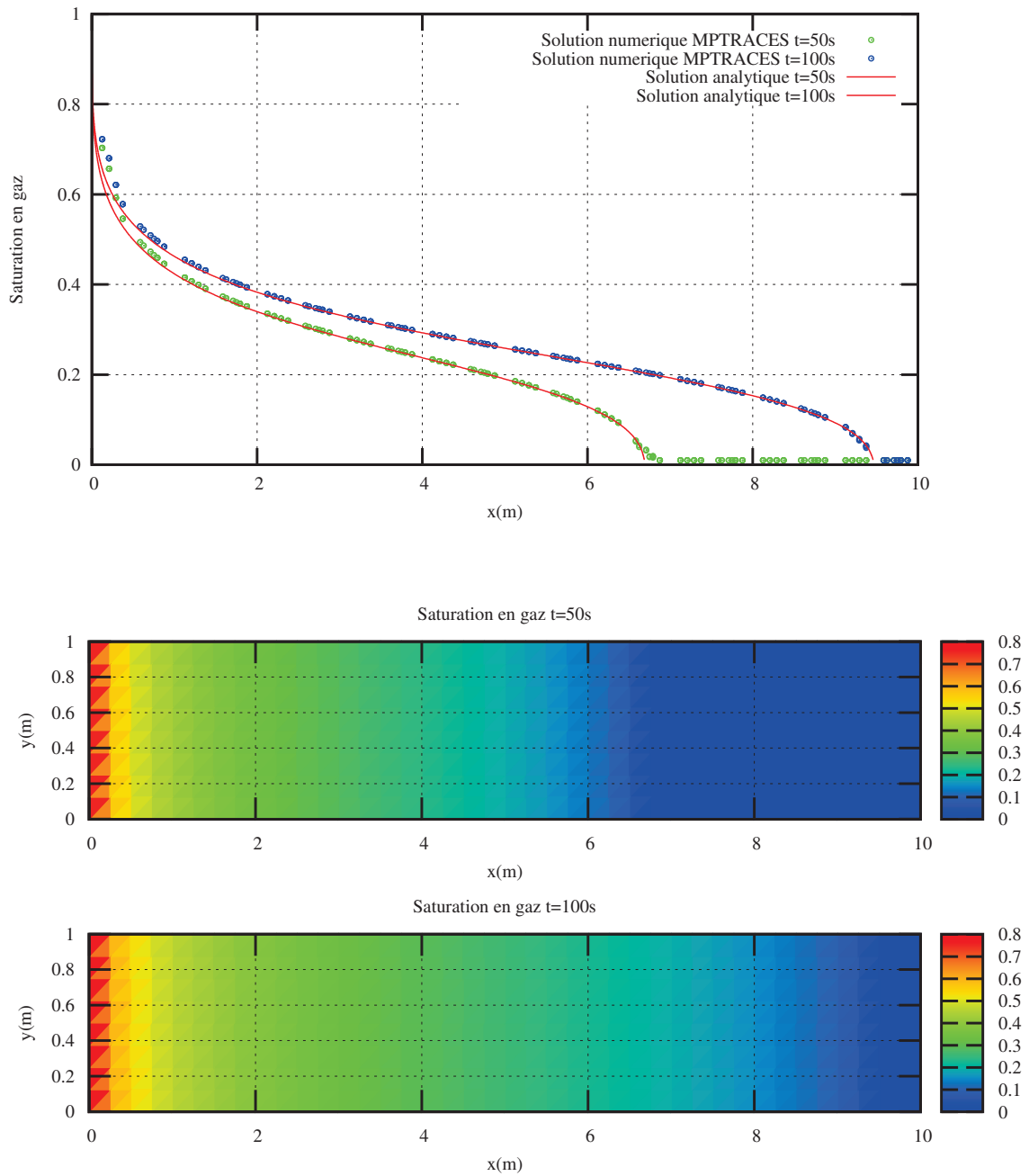


FIGURE 4.5 – *Exemple 1 : simulation d'un écoulement eau-gaz. Profils de saturation numériques et analytiques (en haut) ; distribution de saturation numérique (en bas).*

4.2 Etude d'un drainage gravitaire à grande échelle : test des opérateurs de diffusion et de convection

4.2.1 Cas d'étude

Le cas d'étude est inspiré de la configuration de la plate-forme expérimentale SCERES située sur le campus CNRS de Strasbourg (figure 4.7), qui a servi de support d'expérimentation pour de nombreux projets d'étude et de suivi de pollution par des composés organo halogénés

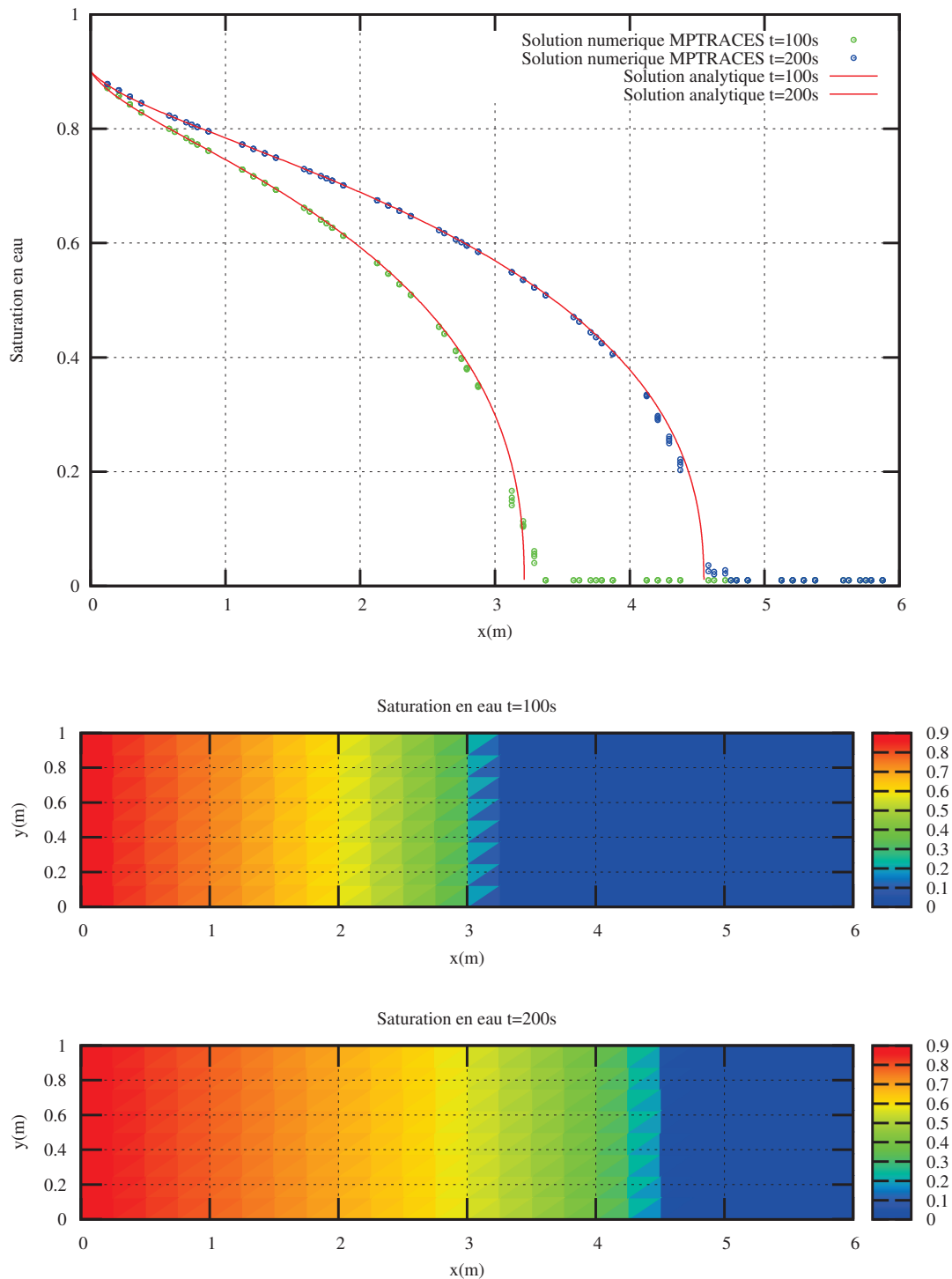


FIGURE 4.6 – Exemple 2 : simulation d'un écoulement eau-gaz. Profils de saturation numériques et analytiques (en haut) ; distribution de saturation numérique (en bas).

volatils (projet R&D Modélisation Atténuation Caractérisation dans les Aquifères des Organo Halogénés 2001-2006, projet FLUXOBAT 2009-2013, projet ADEME préleveur d'eau multini-vaux du 1/10/2011 au 30/06/2015).



FIGURE 4.7 – Photo du bassin expérimental SCERES en 2009 ([Marzougui, 2013])



FIGURE 4.8 – Photo de la fosse amont sur le bassin SCERES

Le site expérimental SCERES représente un modèle d'un aquifère alluvial, reconstruit dans un bassin étanche en béton armé de 25 m de long sur 12 m de large et de 3m de profondeur, équipé de divers appareils de mesure (piézomètres, capteurs d'eau multi-niveaux,...). Il est composé de sables différents, ce qui le rapproche d'un milieu hétérogène. La hauteur d'eau dans le milieu

poreux est susceptible de varier (les réglages se font via les fosses amont et aval 4.8), distinguant ainsi une zone saturée et une zone non saturée. De plus, il est possible de maintenir un gradient en hauteur d'eau dans la zone saturée lors des expérimentations comme indiqué dans la figure 4.9. Ce bassin présente l'intérêt de pouvoir réaliser des études à une échelle intermédiaire entre le laboratoire et le site réel, permettant ainsi l'acquisition de données en situation quasi-réelle.

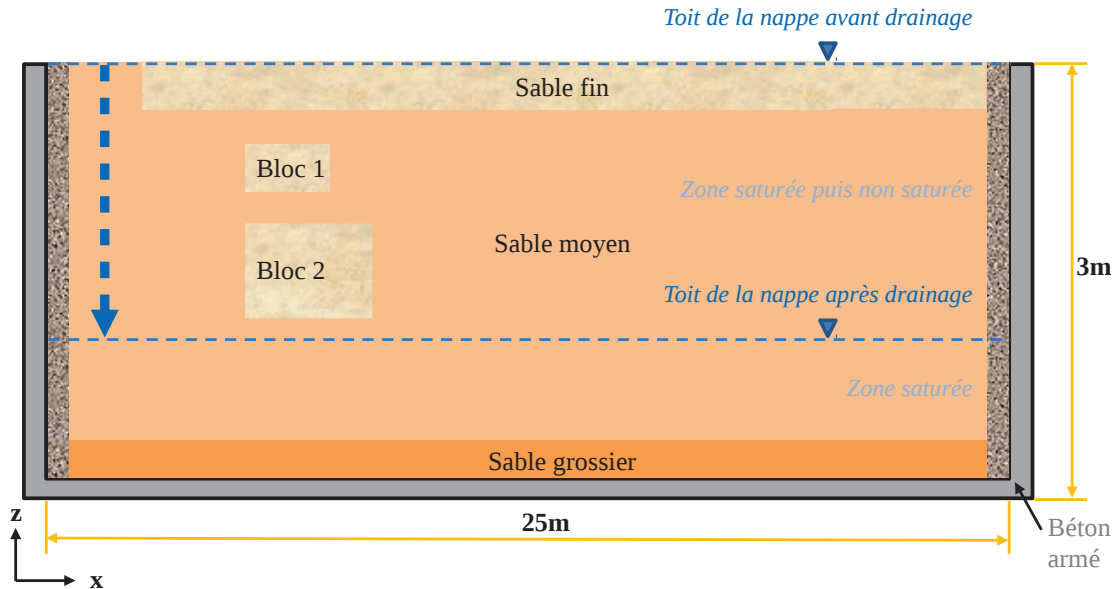


FIGURE 4.9 – Schéma simplifié du bassin SCERES : coupe transversale

En nous inspirant de la configuration du bassin SCERES, le domaine modélisé consiste en un milieu homogène initialement saturé en eau. Le toit de la nappe est rabaissé de 2 mètres, entraînant un drainage par les côtés inférieurs. Les conditions aux limites physiques correspondent à la pression atmosphérique, ainsi qu'une saturation en gaz pleine en haut du domaine (figure 4.10). Dans les bacs amont et aval, le niveau de l'eau est abaissé de 2 mètres. Sur le côté inférieur du domaine, nous traduisons l'écoulement de l'eau par une saturation en air quasiment nulle. Les surfaces de suintement au niveau des bacs amont et aval ont été supposés imperméables, matérialisées par un flux nul à la frontière. Pour les simulations, un maillage fin de 200×24 mailles a été choisi. Tous les graphiques sont issus de simulations sur ce maillage, sauf noté contraire. Les paramètres choisis sont référencés dans le tableau 4.2.

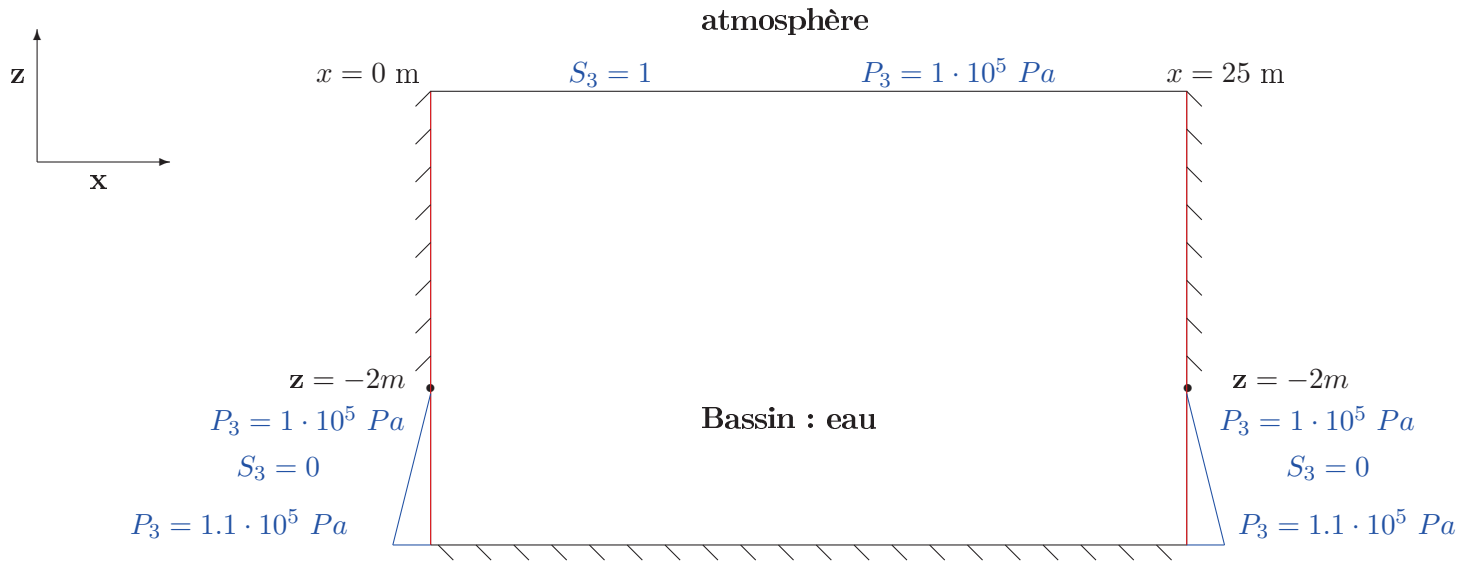


FIGURE 4.10 – Conditions aux limites

Paramètres du milieu	symbole	valeur	unité
Porosité	ϕ	0.4	[-]
Permeabilité intrinsèque	K	8 $\times 10^{-11}$	$[m^2]$
Paramètres du fluide	symbole	valeur	unité
Masse volumique de l'air	ρ_{nw}	1.29	$[kg/m^3]$
Masse volumique de l'eau	ρ_1	1000	$[kg/m^3]$
Différence de densité	$\Delta\rho$	-998	$[kg/m^3]$
Modèle de perméabilité relative	BC	-	
Pression d'entrée	P_d	2 $\times 10^3$	$[Pa]$
Paramètre de forme	λ	2 $\times 10^0$	[-]
Saturation résiduelle en eau	S_{1r}	0.13	[-]
Saturation résiduelle en air	S_{3r}	0.01	[-]
Viscosité dynamique de l'eau	μ_1	1 $\times 10^{-3}$	$[Pa \cdot s]$
Viscosité dynamique de l'air	μ_3	1 $\times 10^{-5}$	$[Pa \cdot s]$
Constante de gravité	g_z	9.81	$[m/s^2]$
Paramètres liés au modèle numérique	symbole	valeur	unité
Nombre d'itérations	N_{fin}	1 $\times 10^5$	[-]
Pas de temps	Δt	0.1	[s]
Temps final	T_f	10000	[s]
Nombre de mailles Maillage fin	N_{mf}	200 \times 24	[-]
Nombre de mailles Maillage Moyen	N_{mm}	100 \times 12	[-]

TABLE 4.2 – Paramètres utilisés pour la simulation du drainage

Les équations 4.5 résument les équations constitutives du système couplé. Notons que les variables primaires sont la pression globale et la saturation en air. Le couplage des équations a nécessité une linéarisation de PICARD.

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \phi \frac{\partial S_3}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{D}(S_3) = 0 \\
 \mathbf{D}(S_3) = f_3 \mathbf{v} - f_3 f_1 d \frac{dP_c^{31}}{dS_3}(S_3) \mathbf{K} \cdot \nabla S_3 + f_3 f_1 d \Delta \rho \mathbf{K} \cdot \nabla z \\
 \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \\
 \mathbf{v} = -d \mathbf{K} \cdot [\nabla P - \bar{\rho} g \nabla Z] \\
 P(\mathbf{x}, t) = P_3(\mathbf{x}, t) + P_c^g \\
 P_c^g = - \int_0^{S_3} f_1 \frac{dP_c^{31}}{dS_3} dS_3
 \end{array} \right. \quad (4.5)$$

Les valeurs limites de la pression globale en haut et sur les côtés du domaine sont déduits des valeurs de pression en air. De même, les valeurs initiales de pression globale sont déduits des conditions initiales de pression en air.

4.2.2 Simulation numérique du cas de drainage 2D

Distribution des saturations en air

La figure 4.11 correspond aux valeurs de saturation en air dans le domaine au début de la simulation ($t=0.2s$), au bout d'une heure, de trois heures puis de dix heures de simulation. Après une heure de drainage, on observe que le toit de la nappe est descendu depuis les bords du domaine, et que la désaturation en eau s'est répercutée au centre au fur et à mesure du temps. La forme caractéristique de dôme du profil de saturation en air est due à la direction de l'écoulement. Au bout de six heures de simulation, la distribution de saturation est quasiment uniforme, à l'exception de la région proche du toit de la nappe, et concorde avec la position du toit de la nappe à 2m de profondeur.

On peut constater une légère disymétrie des distributions de saturation entre les deux fronts de saturation sur les côtés du bassin. Cette différence pourrait être un effet du maillage.

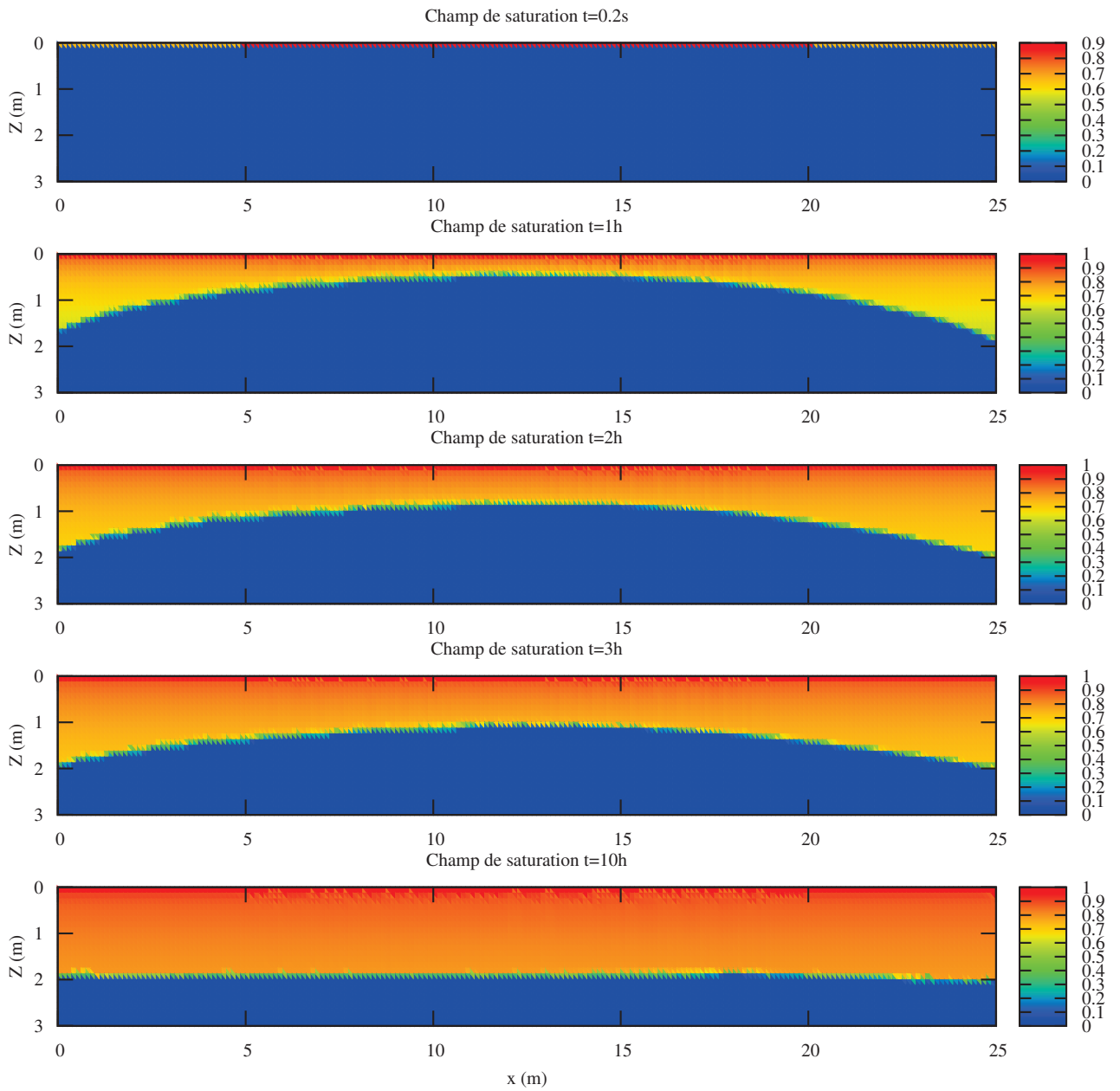


FIGURE 4.11 – Evolution des valeurs de saturation dans le domaine

Distribution de la pression globale

La figure 4.12 illustre les valeurs de pressions globales calculées dans le domaine. Elles sont fonction des hauteurs d'eau liées aux saturations en eau du domaine. Le premier graphique correspond ainsi aux valeurs de pressions globales hydrostatiques puisque le milieu est rempli d'eau. Nous retrouvons ensuite dans la distribution des pressions globales un dôme "hydraulique" caractéristique des distributions de saturation en eau. Au bout de 10h de simulation, comme attendu, les valeurs de pression correspondent aux valeurs limites imposées sur le modèle.

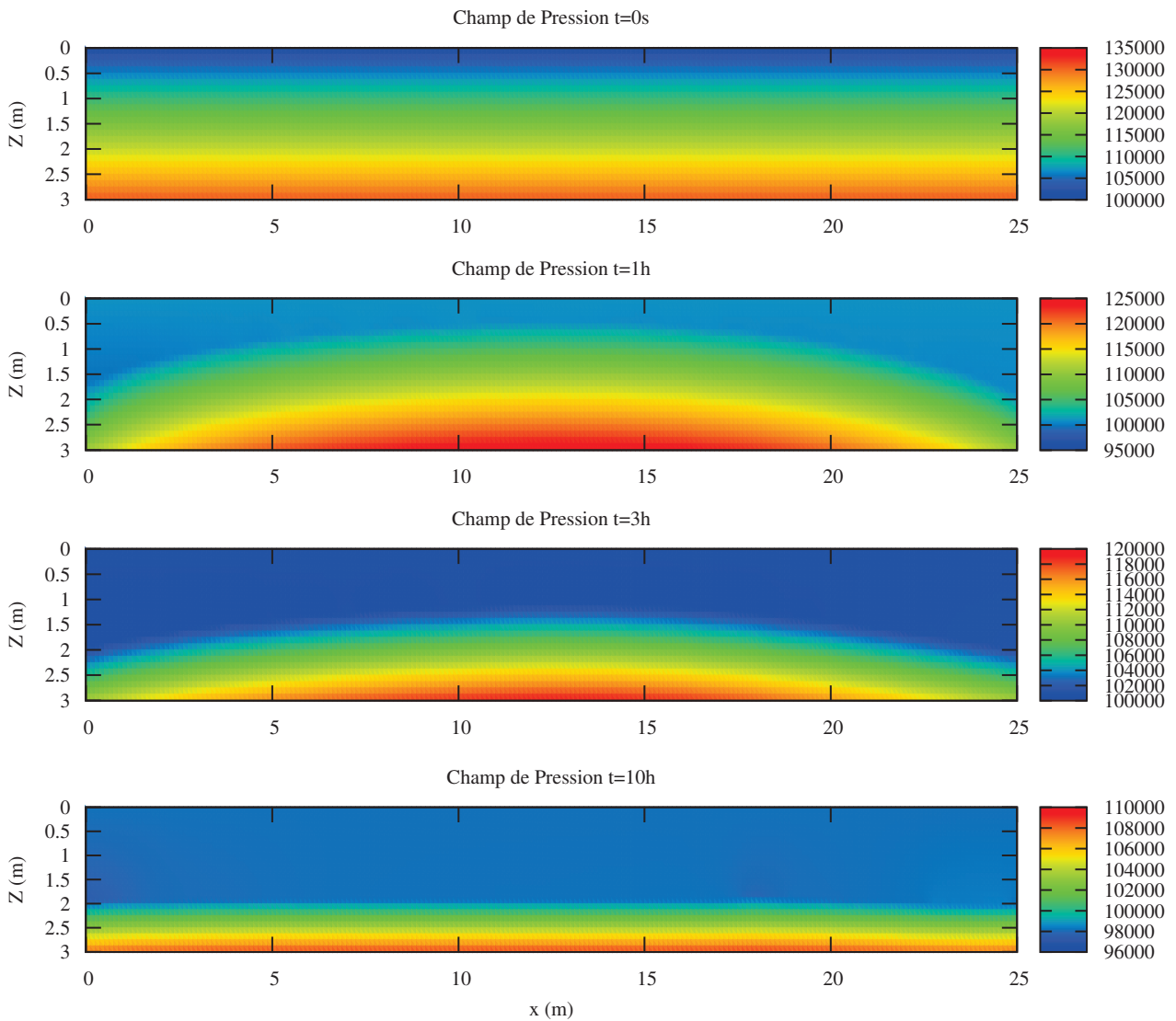


FIGURE 4.12 – Valeurs de pression dans le domaine (Pa)

La figure 4.13 reprend l'évolution des pressions globales au centre du domaine.

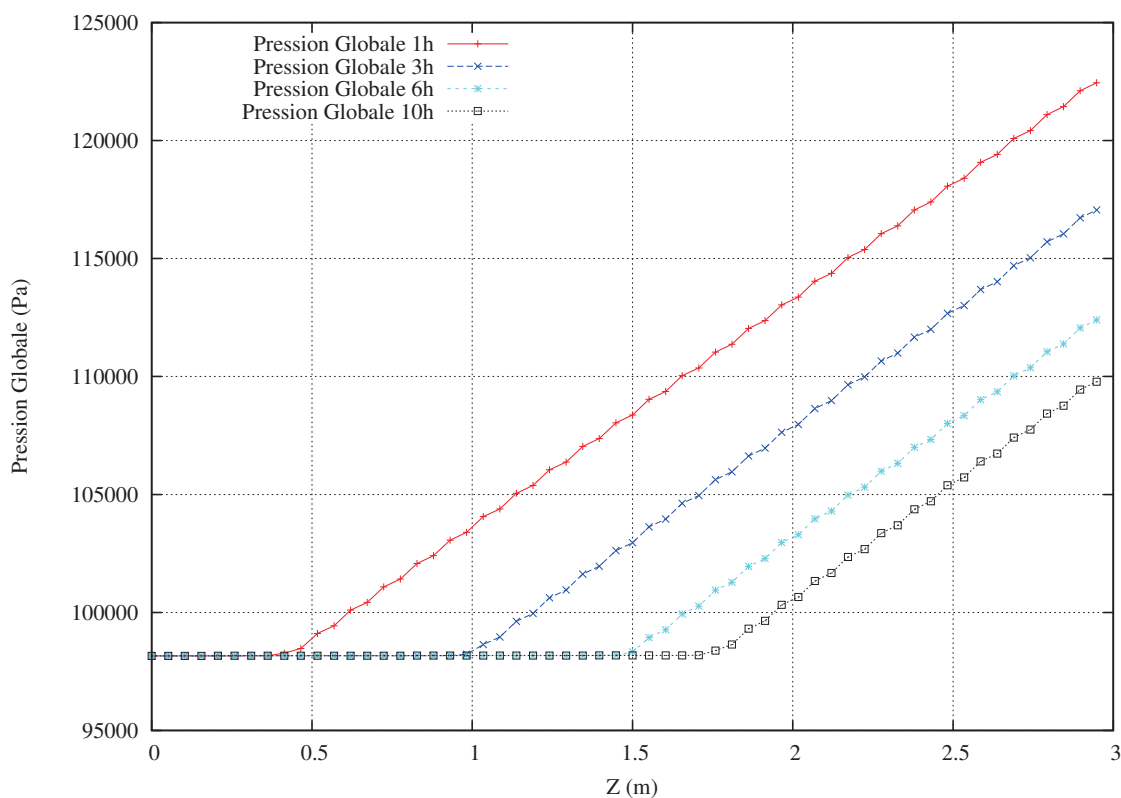
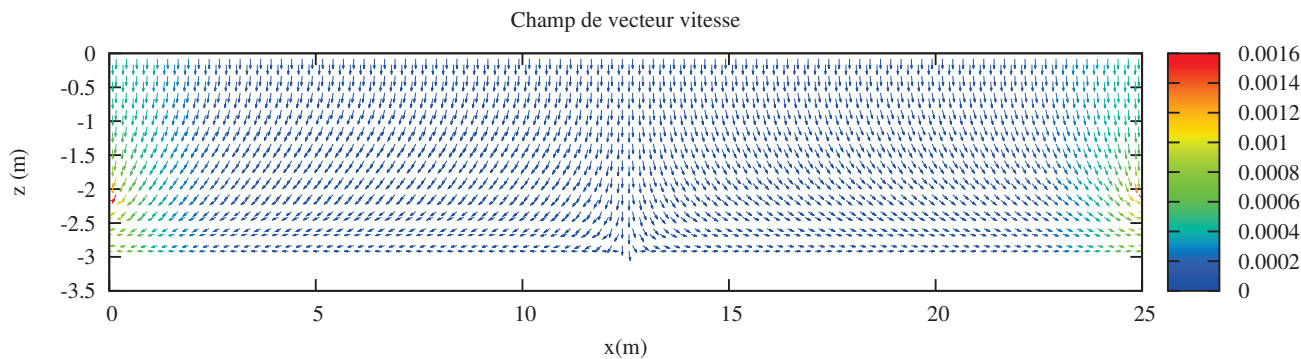
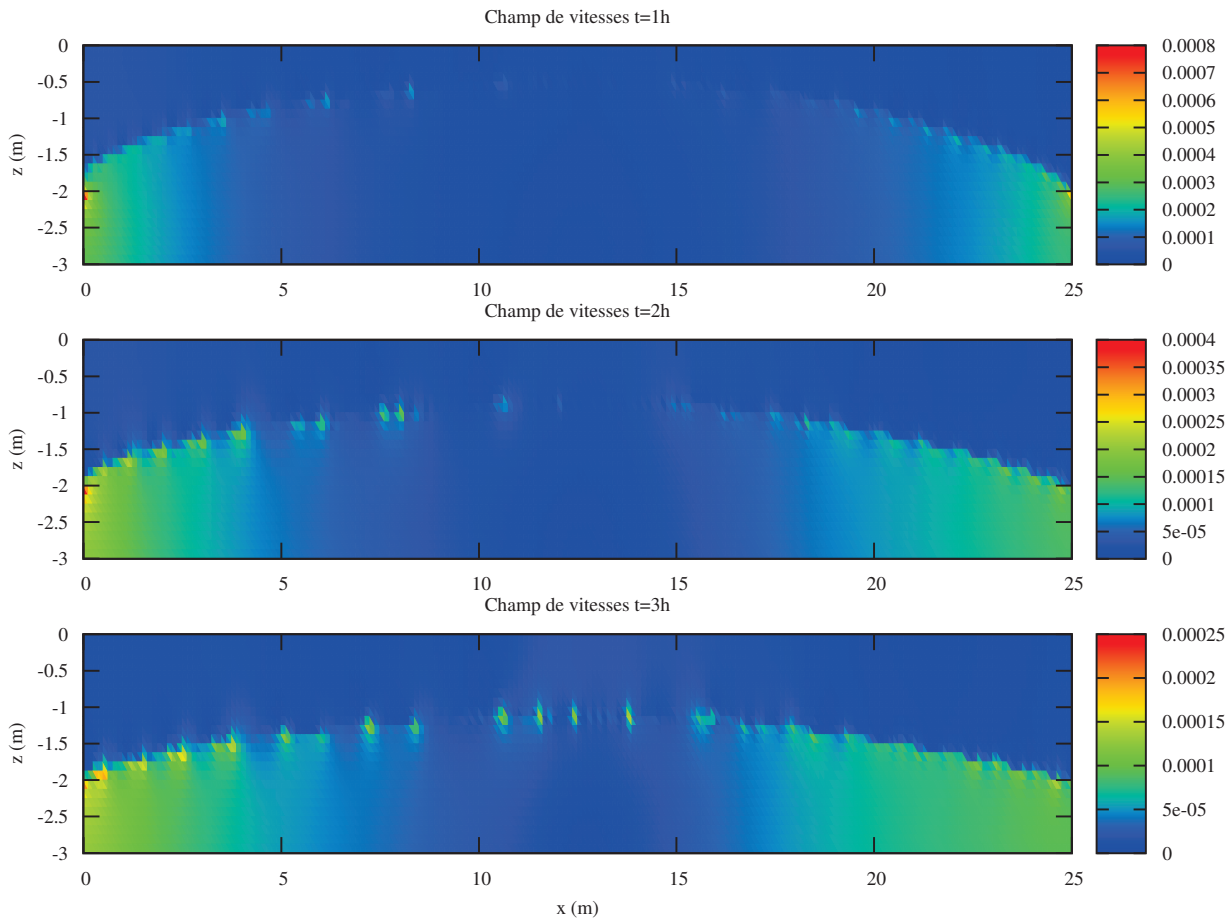


FIGURE 4.13 – Evolution de la pression globale au centre du domaine

Distribution des vitesses totales

Les directions et les valeurs de vitesses totales dans le domaine obtenues au tout début de la simulation ($t=0.2s$) sont présentées dans la figure 4.14. Elles sont calculées avec un maillage moyen pour des raisons de clareté. Le champs de vitesse totale reflète quasi-instantanément le drainage d'eau induit par les conditions aux limites en pression globale. On trouve par exemple des valeurs en norme de la vitesse très élevées sur les côtés du bassin, tandis qu'elles sont quasiment nulles au centre du domaine. Les profils de vitesse sont parfaitement symétriques. De plus, les vitesses sont dirigées vers les bords inférieurs du domaine, traduisant un écoulement dans ces directions.

FIGURE 4.14 – Valeurs de vitesse totale en $[m/s]$ sur le domaine

FIGURE 4.15 – Distribution du vecteur vitesse totale en $[m/s]$

La figure 4.15 représente le champ de vitesses totales calculé au sein du domaine au bout d'une heure, de trois heures, puis de dix heures. Les valeurs de flux appuient l'observation selon laquelle l'écoulement de l'eau se produit préférentiellement sur les côtés au début de la simulation. De plus, le flux correspondant à la fin de la simulation est bien nul en tout point du domaine.

4.2.3 Comparaisons des profils de saturations obtenus avec ceux du logiciel SIMUSCOPP

Les expériences de drainages sur SCERES ont été secondées par quelques simulations réalisées à l'aide du logiciel SIMUSCOPP. Il s'agit d'un logiciel de simulation d'écoulement triphasique et de transport en milieux poreux élaboré par l'Institut Français de Pétrole Energies nouvelles (IFP Energies nouvelles) basé sur des méthodes de résolution par Volumes Finis ([Ducreux and le Thiez, 1994]). À l'inverse de nos modèles qui correspondent aux profils analytiques de Brooks-Corey, mais qui donnent une saturation exacte théorique en tout point, les perméabilités relatives de l'air et de l'eau sont obtenues à priori par interpolation d'un tableau de valeurs. Enfin, précisons que la modélisation de l'écoulement diphasique de SIMUSCOPP est réalisée à partir d'un système pression de l'air-saturation en eau.

Nous avons relevé les valeurs de saturation en gaz calculées par notre code et par le logiciel SIMUSCOPP au centre ($x=12.5\text{m}$) ainsi que sur le côté ($x=0.1\text{m}$) du domaine. Trois relevés ont été effectués : au bout d'une heure, de deux heures, de trois heures et de six heures.

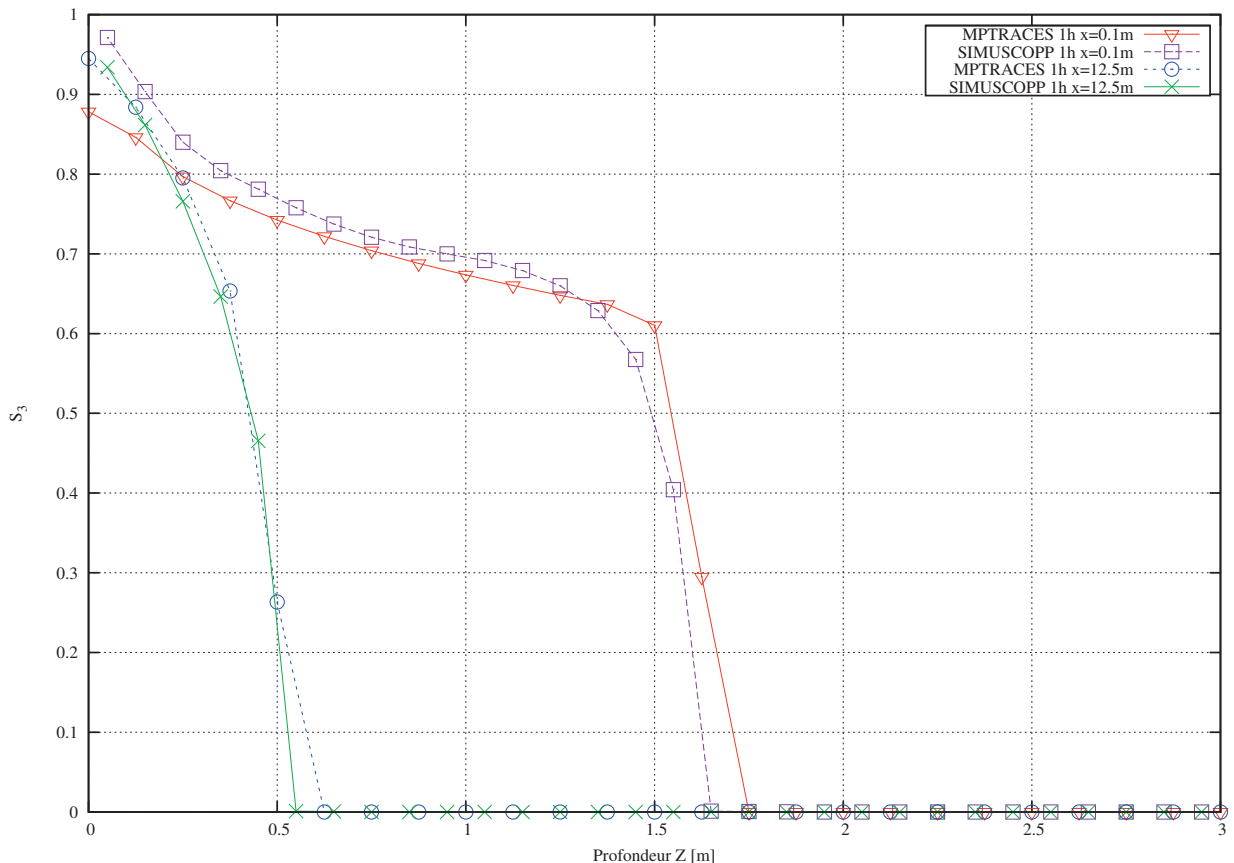


FIGURE 4.16 – Valeurs de saturation au bout de 1h de drainage

Globalement, nous avons obtenu des résultats comparables avec les résultats du code basé sur un calcul des pressions en air. Cependant, bien que nous obtenions des profils très proches de ceux de SIMUSCOPP au bout d'une heure de simulation, nous constatons que nos fronts de saturations présentent une légère avance au bout de deux heures et de trois heures de simulation.

Ceci peut s'expliquer par une différence dans le traitement du problème. En effet, alors que la pression en gaz n'est pas imposée en haut du domaine pour le logiciel SIMUSCOPP, elle l'est dans notre cas. Ce qui pourrait expliquer cette avancée.

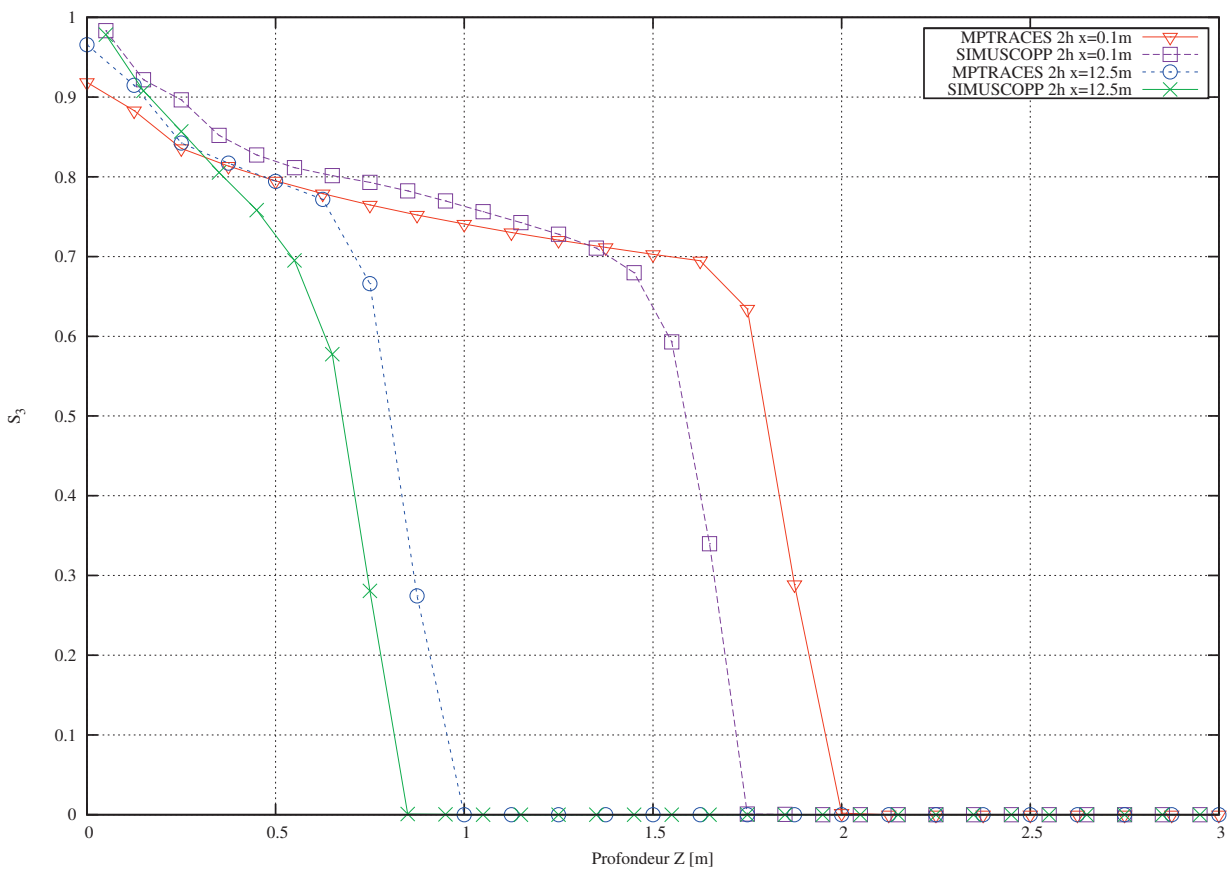


FIGURE 4.17 – Valeurs de saturation au bout de 2h de drainage

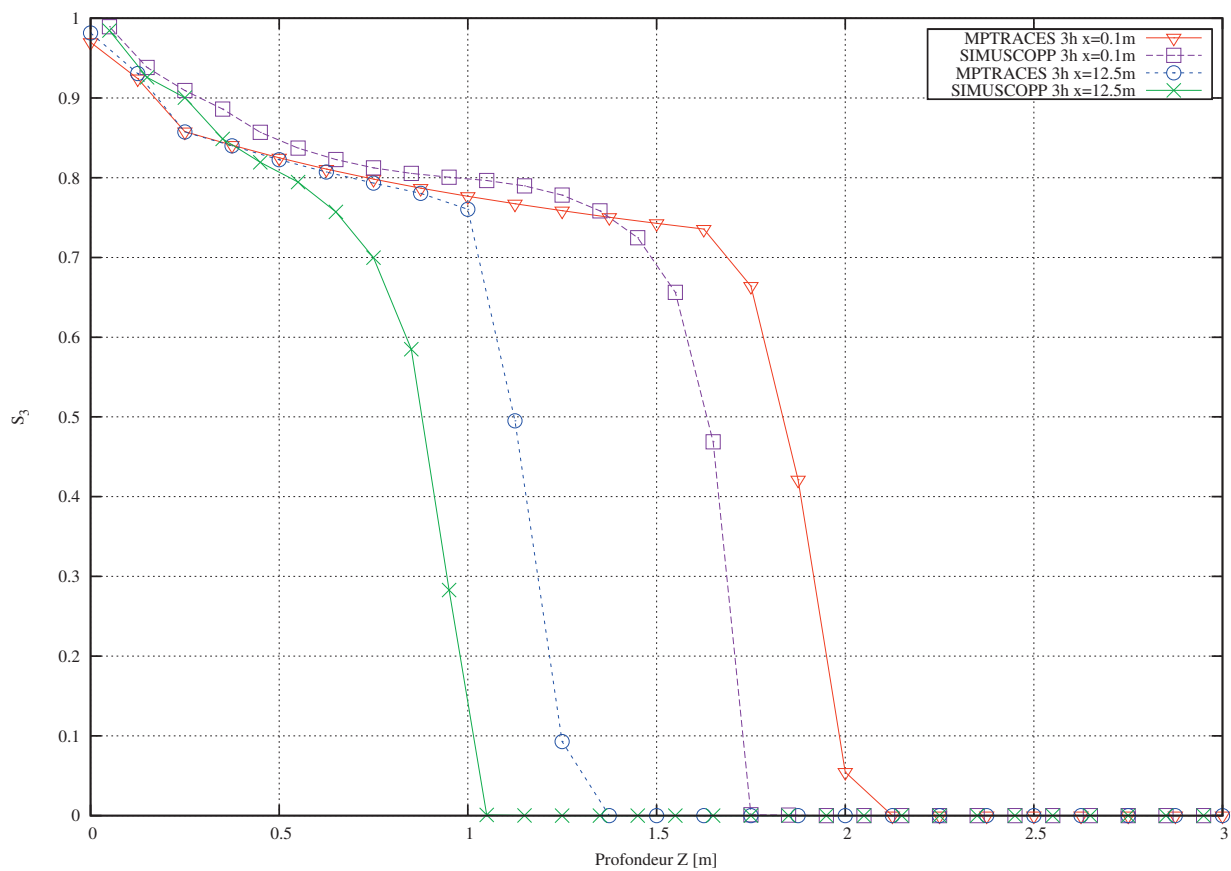


FIGURE 4.18 – Valeurs de saturation au bout de 3h de drainage

4.2.4 Formulation en pression du gaz

Nous avons effectué les mêmes simulations que précédemment en remplaçant l'équation de pression globale par l'équation de pression en gaz, et en prenant exactement les conditions aux limites pour la pression en air décrites dans la figure 4.10. Nous avons obtenu des résultats très proches pour les deux formulations pression en gaz- pression globale. Les profils de saturation au milieu et sur les côtés du domaine ne présentent pas de différence significative. De même pour les flux comme illustré dans la figure 4.19.

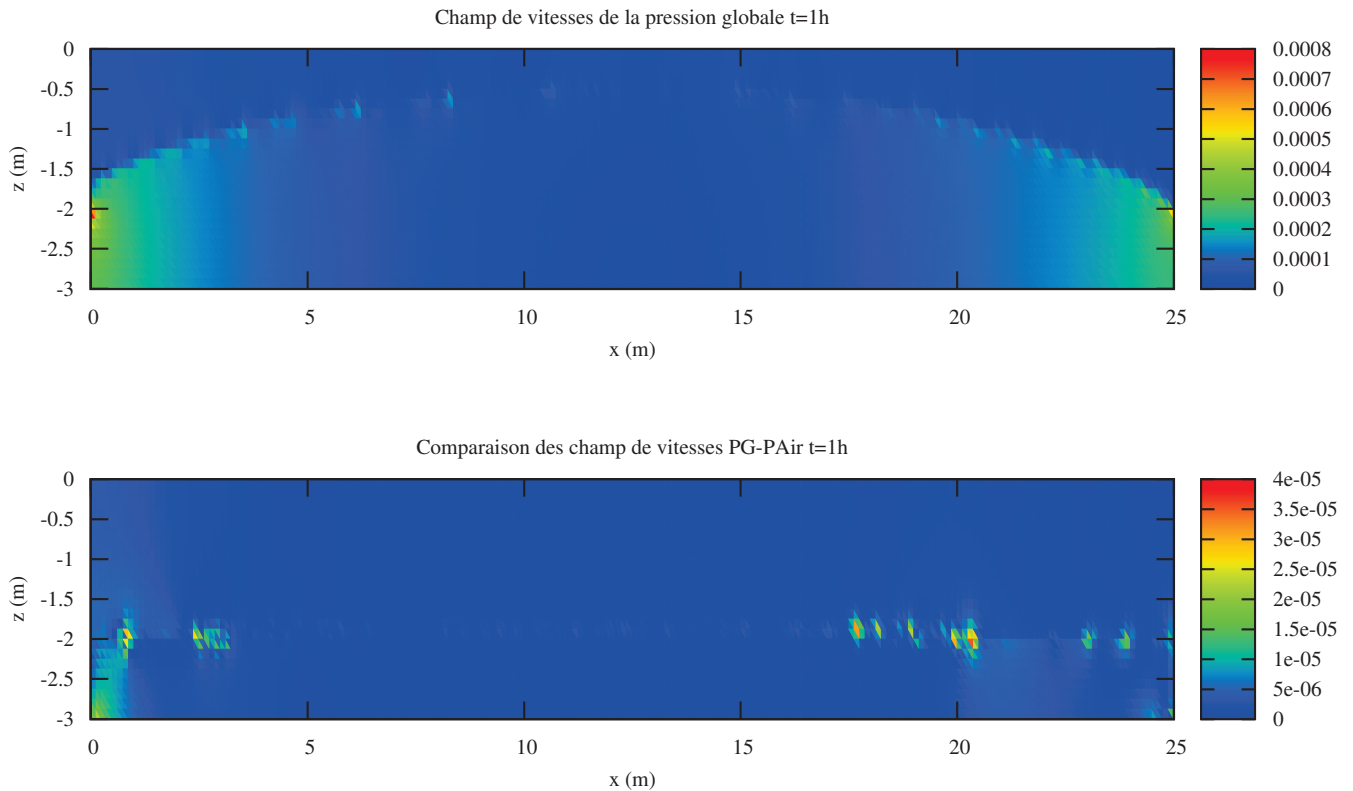


FIGURE 4.19 – Distribution du vecteur vitesse totale en $[m/s]$; Comparaison des valeurs de vitesse PG-Pgaz

Conclusion

Suite à la validation du terme de diffusion développé, nous avons réalisé une simulation d'un problème incluant un couplage pression-saturation. Les résultats de l'expérience de drainage obtenus avec notre modèle numérique donnent une bonne estimation du niveau de la nappe d'eau dans l'ensemble du domaine.

Il serait envisageable de reproduire les conditions de drainage sur le bassin SCERES en introduisant des hétérogénéités dans le maillage. Cependant, il faudrait tenir compte des discontinuités de saturation entre certaines facettes du maillage, comme étudié dans [Nayagum, 2001]. A terme, il serait intéressant de pouvoir modéliser un écoulement triphasique d'huile dans le milieu saturé en eau et en air. La modélisation triphasique implique une approche plus complexe de calcul préalable des perméabilités triphasiques de fluides.

Analyse des instabilités relatives aux écoulements triphasiques hyperboliques

The relative permeability models are only as good as theories behind the displacement experiments from which these models have been obtained. If the theory is flawed, so are the relative permeabilities [Juanes and Patzek, 2004b].

Pour simuler de nombreux procédés, comme la récupération secondaire ou assistée de pétrole ou la décontamination de sols, les modèles d'écoulements diphasiques sont trop imprécis. Des modèles de perméabilités triphasiques fondés sur des observations expérimentales ont été élaborés ([Bell et al., 1986]). Généralement, ils sont une combinaison des modèles diphasiques existants (comme schématisé sur la figure 5.1). Cependant, il a été établi que certains modèles de perméabilités révèlent des "zones d'instabilités". Ce chapitre constitue une ouverture vers la problématique des instabilités relatives aux modèles de perméabilités triphasiques. Nous chercherons des éléments de réponses dans les modèles dynamiques et dans la construction même des modèles. Nous ferons également le lien avec la condition de différentielle totale de la pression globale.

5.1 Analyse des zones elliptiques

5.1.1 Problème de Riemann

Toujours d'après le premier chapitre, les équations de saturation en formulation flux fractionnaire en eau et gaz sans capillarité forment un système :

$$\partial_t \begin{pmatrix} S_1 \\ S_3 \end{pmatrix} = -\nabla \cdot \begin{pmatrix} \hat{f}_1 \\ \hat{f}_3 \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

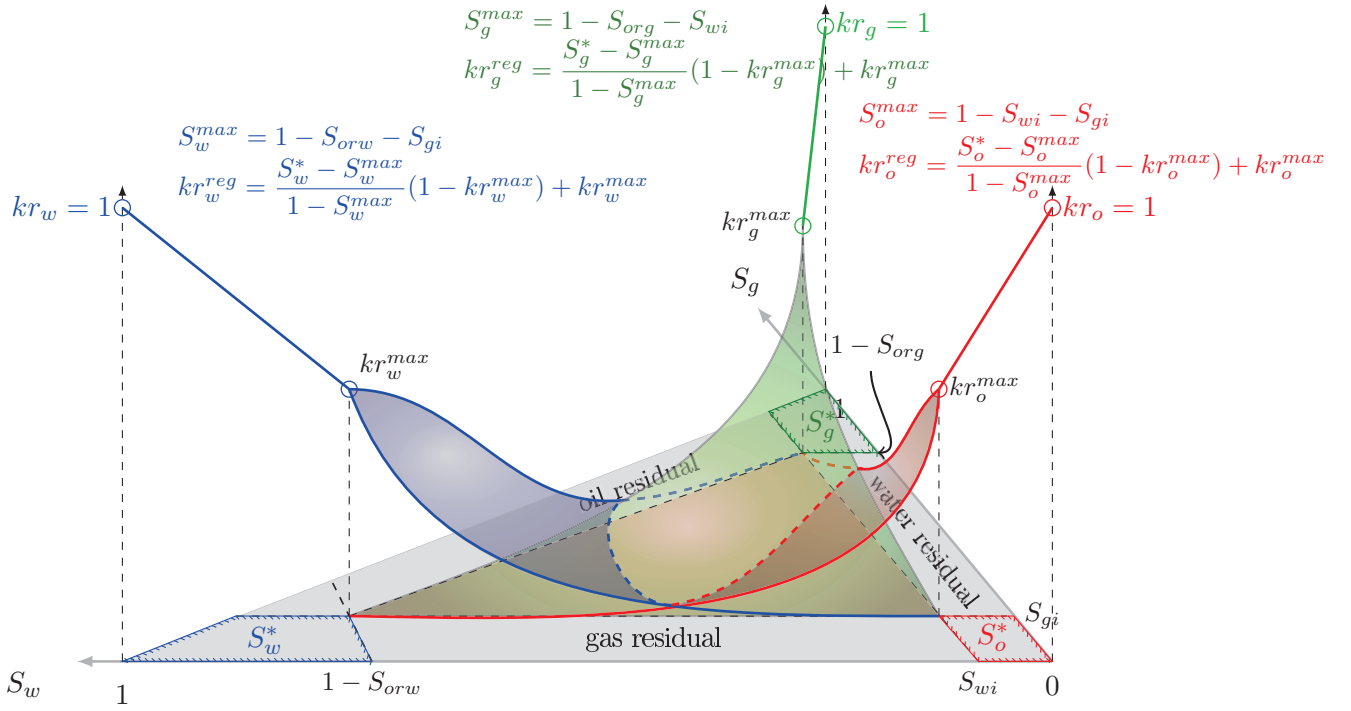


FIGURE 5.1 – Schéma de construction des perméabilités triphasiques

avec

$$\hat{f}_1 = \frac{\lambda_1}{\lambda_t} \left(1 - \mathcal{N}_3 \left((\rho_d - 1)kr_2 + \rho_d \frac{\mu_2}{\mu_3} kr_3 \right) \right) \quad (5.2)$$

$$\hat{f}_3 = \frac{\lambda_3}{\lambda_t} \left(1 - \mathcal{N}_3 \left(\rho_d \frac{\mu_2}{\mu_1} kr_1 + kr_2 \right) \right) \quad (5.3)$$

$$\rho_d = \frac{\rho_1 - \rho_3}{\rho_2 - \rho_3} \quad (5.4)$$

$$\mathcal{N}_3 = \frac{(\rho_2 - \rho_3)K}{\mu_2 v \phi} g. \quad (5.5)$$

C'est un problème de Riemann : il consiste à trouver une solution au système :

$$\begin{cases} \partial_t \begin{pmatrix} S_1 \\ S_3 \end{pmatrix} = -\nabla \cdot \begin{pmatrix} \hat{f}_1 \\ \hat{f}_3 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} S_1 \\ S_3 \end{pmatrix} = \begin{cases} S_L = \begin{pmatrix} S_1 \\ S_3 \end{pmatrix}_L & \text{si } x < 0 \\ S_R = \begin{pmatrix} S_1 \\ S_3 \end{pmatrix}_R & \text{si } x > 0 \end{cases} \end{cases} \quad (5.6)$$

Ecrit sous cette forme, le problème est très similaire à l'équation de saturation en formulation diphasique sans terme capillaire. Les concepts de solution faible, d'entropie, et d'onde de choc et

de rarefaction introduits au chapitre 3 se généralisent aux systèmes. Le caractère auto-similaire des ces solutions est en effet bien adapté à certains problèmes d'écoulements.

La Jacobienne du système est par définition [Toro, 2009] :

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \hat{f}_1}{\partial S_1} & \frac{\partial \hat{f}_1}{\partial S_3} \\ \frac{\partial \hat{f}_3}{\partial S_1} & \frac{\partial \hat{f}_3}{\partial S_3} \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

et les valeurs propres sont données par :

$$\lambda_j = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \hat{f}_1}{\partial S_1} + \frac{\partial \hat{f}_3}{\partial S_3} \pm \sqrt{\left(\frac{\partial \hat{f}_1}{\partial S_1} - \frac{\partial \hat{f}_3}{\partial S_3} \right)^2 + 4 \frac{\partial \hat{f}_1}{\partial S_3} \frac{\partial \hat{f}_3}{\partial S_1}} \right) \quad (5.8)$$

Définition 17. On dit que le système d'équations 5.6 est **hyperbolique** lorsque la matrice Jacobienne 5.7 est diagonalisable à valeurs propres réelles distinctes. On dit qu'il est **elliptique** lorsque ces valeurs propres sont complexes conjuguées.

Les vecteurs propres associés aux valeurs propres permettent de caractériser la forme des solutions (Juanes 2004). Celles-ci sont représentées dans un diagramme ternaire $\mathbb{T} = \{(S_1, S_3) ; S_1 \leq 1 ; S_3 \leq 1\}$ (figure 5.2 par exemple).

5.1.2 Construction des modèles de perméabilités relatives triphasiques

Il a été montré expérimentalement que les perméabilités relatives du gaz et de l'eau peuvent être considérées comme uniquement dépendantes de la saturation du gaz et de l'eau. La perméabilité relative du gaz est généralement interpolée à partir du système huile/gaz. Celle de l'eau est généralement interpolée à partir du système eau/huile. En revanche, la perméabilité de l'huile est construite à partir des deux précédentes.

Considérons par exemple la perméabilité relative en huile du modèle de Stone I combiné au modèle de Van Genuchten [Helmig, 1997], [Aziz and Settari, 1979] :

$$kr_{23}(S_{re,3}) = S_2^{\frac{1}{2}} \left[1 - (1 - S_2^{\frac{n}{n-1}})^{\frac{n-1}{n}} \right]^2 \quad (5.9)$$

$$kr_{21}(S_{re,1}) = \left(\frac{1 - S_{re,1} - S_{3r}}{1 - S_{1r} - S_{3r}} \right)^{\frac{1}{2}} \left[1 - S_1^{\frac{n}{n-1}} \right]^{\frac{2(n-1)}{n}} \quad (5.10)$$

$$kr_{21}^{max} = kr_{21}(S_{2r}) \quad (5.11)$$

$$kr_2 = \frac{S_2 kr_{21}(S_{re,1}) kr_{23}(S_{re,3})}{kr_{21}^{max} \cdot (1 - S_2) \cdot (1 - S_3)} \quad (5.12)$$

où $S_{re,j}$ désigne la saturation réelle de la phase j .

Et celui de Stone II combiné au modèle de Brooks-Corey :

$$kr_1(S_1) = S_1^{3+\frac{2}{\lambda}} \quad (5.13)$$

$$kr_3(S_2) = (1 - S_2)^2(1 - S_2^{2+\frac{2}{\lambda}}) \quad (5.14)$$

$$kr_{23}(S_2) = S_2^{3+\frac{2}{\lambda}} \quad (5.15)$$

$$kr_{21}(S_1) = (1 - S_1)^2(1 - S_1^{2+\frac{2}{\lambda}}) \quad (5.16)$$

$$kr_2 = kr_{21}^{max} \left[\left(\frac{kr_{21}}{kr_{21}^{max}} + kr_1 \right) \left(\frac{kr_{23}}{kr_{23}^{max}} + kr_3 \right) - (kr_1 + kr_3) \right] \quad (5.17)$$

$$kr_{21}^{max} = kr_{21}(S_{2r}) \quad (5.18)$$

Des études de Lenhard et Parker [Parker and Lenhard, 1987] confortent expérimentalement ce modèle.

Alors que l'on pensait il y a quelques années que les modèles de perméabilités triphasiques n'engendraient que des systèmes hyperboliques, Charny et Bell [Bell et al., 1986] ont montré que le système d'équations n'est pas hyperbolique en tout point, et qu'il existe en réalité des "zones elliptiques" (dans les cas généraux, avec capillarité et gravité également, d'après [Jahanbakhshi et al., 2013]). Bell et Jahabanski ([Bell et al., 1986], [Jahanbakhshi et al., 2013]) ont montré par linéarisation que le système est instable dans les régions elliptiques, à savoir pour des valeurs propres complexes conjuguées. Les solutions présentent alors des oscillations. Les effets capillaires sont dominants pour les hautes fréquences, ce qui ne permet pas de stabiliser le système. Ce n'est pas le cas pour des fréquences basses, bien que les solutions restent bornées.

5.1.3 Quelques exemples de zones elliptiques pour le modèle de Stone I

Le modèle de Stone I avec des perméabilités issues de [Bell et al., 1986] est utilisé dans ce paragraphe pour représenter quelques exemples de répartitions de zones elliptiques dans le diagramme ternaire ($g_z = 0$) :

$$\begin{aligned} kr_1 &= 1.09S_1^{1.516687} - 0.09S_1^{4.51668} \\ kr_{21} &= 1.95(1 - S_1)^{8.28} - 0.95(1 - S_1)^{11.284} \\ kr_3 &= 0.525S_3^{1.02} + 0.475S_3^{3.62} \\ kr_{23} &= 1.19(1 - S_3)^{2.006} - 0.19(1 - S_3)^{2.024} \\ kr_2(S_1, S_3) &= \frac{(1 - S_1 - S_3)}{(1 - S_1)(1 - S_3)} kr_{21} kr_{23} \end{aligned} \quad (5.19)$$

Les figures 5.2, 5.3, 5.4 et 5.5 représentent des formes très différentes de zones elliptiques selon les viscosités des fluides.

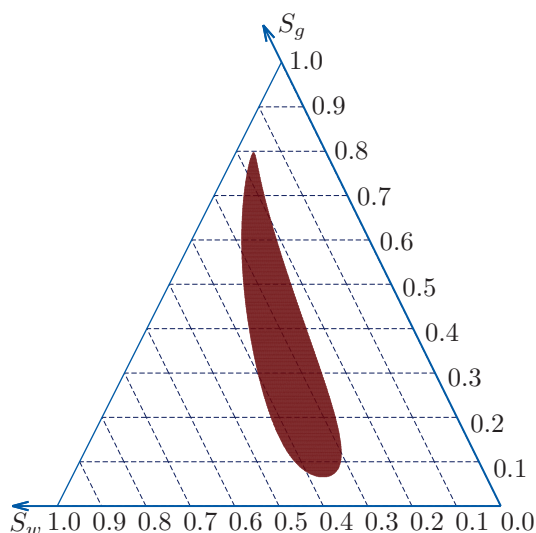


FIGURE 5.2 – Stone I : régions elliptiques du diagramme ternaire avec $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 0,1 \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$

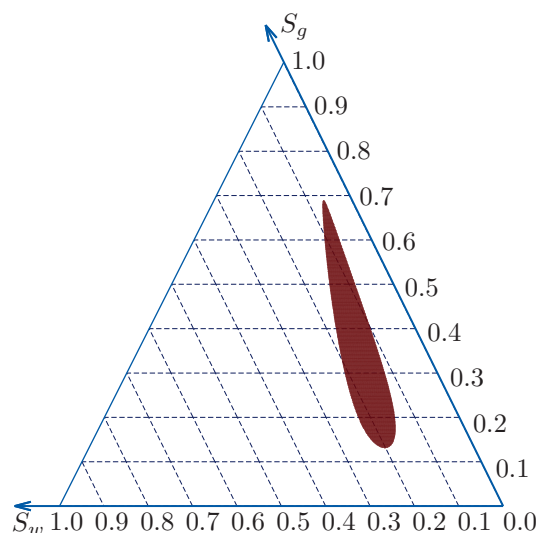


FIGURE 5.3 – Stone I : régions elliptiques du diagramme ternaire avec $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1 \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$

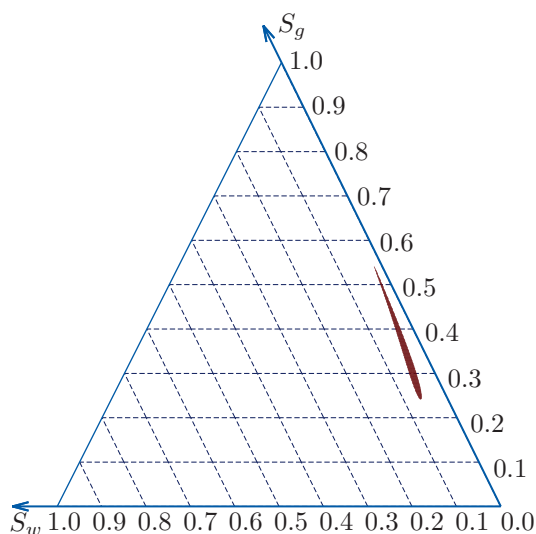


FIGURE 5.4 – Stone I : régions elliptiques du diagramme ternaire avec $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 5 \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$

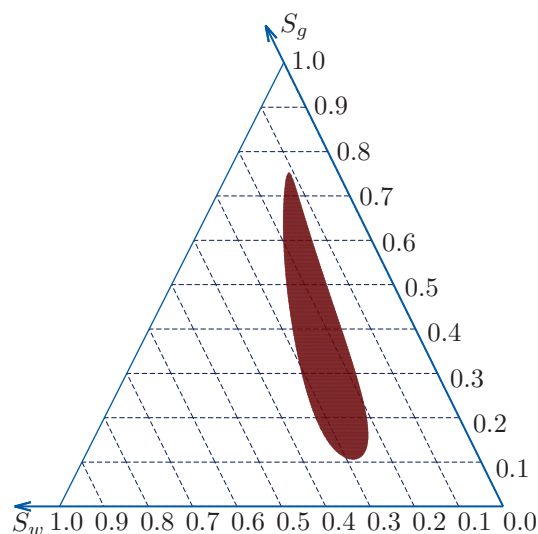


FIGURE 5.5 – Stone I : régions elliptiques du diagramme ternaire avec $\mu_w = 1,2 \text{ cp}$, $\mu_o = 0,5 \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$

5.2 Cas numérique d'écoulement triphasique (P_3, S_1, S_3)

Quelques exemples d'écoulements triphasiques compressibles eau-huile-gaz sans gravité ni capillarité ont été simulés à l'aide d'un solveur Méthode des Lignes (MOL) et Volumes finis dans le cadre du projet "code complet", sur la base des résultats issus de [Juanes and Patzek, 2004b].

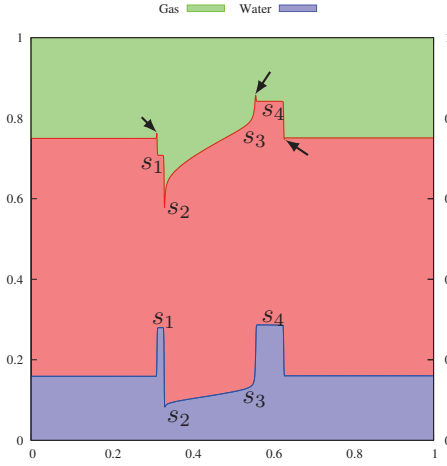


FIGURE 5.6 – Profils de saturation au bout de 400 jours pour la formulation classique compressible; l'état initial est dans la région elliptique et la condition aux limite en dehors de la région elliptique avec $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1. \text{ cp}$ and $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$

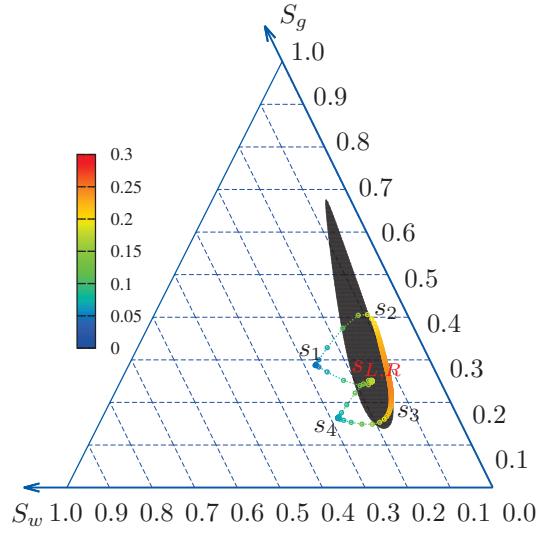


FIGURE 5.7 – Région elliptique du diagramme ternaire avec $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1. \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$; évolution de kr_2 le long des chemins de saturation à 400 jours

Une première simulation a été réalisée avec les conditions initiales suivantes :

$$S = \begin{cases} S_L = \begin{pmatrix} 0.159 \\ 0.25 \end{pmatrix}_L & \text{si } x \leq 0 \\ S_R = \begin{pmatrix} 0.16 \\ 0.249 \end{pmatrix}_R & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad (5.20)$$

Partant de conditions initiales dans la zone elliptique (figure 5.7), on observe l'apparition d'oscillations aux interfaces eau/huile et huile/gaz dans l'écoulement régulier (figure 5.6). Ces oscillations sont visiblement synchronisées entre les deux interfaces. En outre, les front huile/gaz et sont découpés en quatre "étapes" :

- Un "1-choc" de S_L à S_1
- Un "2-choc" de S_1 à S_2
- Une onde de raréfaction de S_2 à S_3
- Un "1-choc" non entropique de S_3 à S_4
- Un "2-choc" de S_4 à S_R

Il apparaît cependant par raffinement que les oscillations restent stables.

En réitérant cette simulation avec des conditions initiales plus rapprochées :

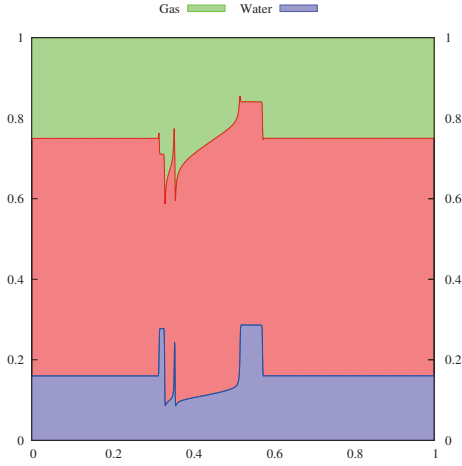


FIGURE 5.8 – Profils de saturation au bout de 400 jours pour la formulation classique compressible; l'état initial est dans la région elliptique et la condition aux limite en dehors; $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1. \text{ cp}$ and $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$

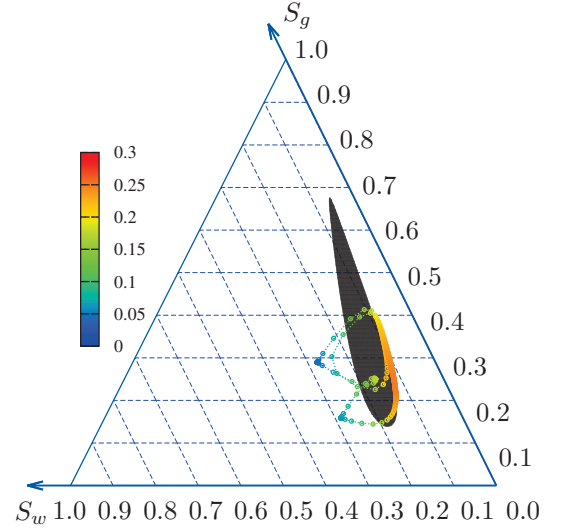


FIGURE 5.9 – Région elliptique du diagramme ternaire avec $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1. \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$; évolution de kr_2 le long des chemins de saturation au bout de 400 jours.

$$S = \begin{cases} S_L = \begin{pmatrix} 0.1599 \\ 0.25 \end{pmatrix}_L & \text{si } x \leq 0 \\ S_R = \begin{pmatrix} 0.16 \\ 0.2499 \end{pmatrix}_R & \text{si } x > 0, \end{cases} \quad (5.21)$$

On observe que les fronts sont de la même forme que précédemment, mais il apparaît une oscillation supplémentaire (figures 5.8 et 5.9), instable cette fois.

Juanes a démontré ([Juanes and Patzek, 2004a], [Juanes and Patzek, 2004b]) qu'en l'absence de capillarité et de gravité, les zones elliptiques constituent un artefact. Il conclut que la perte d'hyperbolicité n'est pas physique. Certains auteurs comme [Chavent and Jaffré, 1986] ou [Lenormand et al., 1988] ont en conséquence choisi de construire des modèles de perméabilité qui ne présentent pas de zones elliptiques. D'autres auteurs affirment que ces zones elliptiques sont propres à la physique des problèmes ([Jackson and Blunt, 2002]). Nous voyons dans la section suivante le principe des modèles de relaxation développés pour réduire les instabilités.

5.3 Modèle d'écoulement avec non-équilibre local.

5.3.1 Modèle de relaxation

Des simulations et des expérimentations à l'échelle du pore ont montré que les modèles de perméabilités relatives ne sont pas toujours dépendants de la seule saturation, c'est le cas pour

des processus "rapides" comme l'imbibition capillaire. De plus, les lois de Darcy ne prennent pas en compte les effets visqueux entre les phases en mouvement, ni de la dépendance au régime d'écoulement.

Barenblatt [Barenblatt et al., 2003] a affirmé la nécessité de relaxer le modèle en introduisant une saturation dynamique :

$$\sigma_1 - S_1 = \tau_B(S_1) \frac{\partial S_1}{\partial t} \quad (5.22)$$

avec un coefficient phénoménologique $\tau_B(S_1)$, déterminé à l'aide d'arguments thermodynamiques, et d'analyse microscopique de l'écoulement.

Les effets de non-équilibres sont pris en compte en évaluant la perméabilité relative et la pression capillaire à la saturation dynamique : σ_1 .

$$kr^{dyn}(S_1) = kr^{stat}(\sigma_1) \quad \text{et} \quad P_c^{dyn}(S_1) = P_c^{stat}(\sigma_1)$$

La saturation dynamique peut être interprétée comme une saturation future : $\sigma_1 = S_1(t + \tau_B)$, en considérant τ_B comme un temps de relaxation.

Remarque : D'autres approches ([Hassanizadeh and Gray, 2010]) consistent à relaxer le modèle en introduisant une pression capillaire dynamique.

5.3.2 Quelques simulations numériques

Nous avons souhaité reproduire des simulations numériques d'écoulement triphasiques compressible sans gravité ni capillarité avec le solveur MOL et Volumes Finis du projet CubicM. Un modèle de Barenblatt étendu à l'écoulement triphasique a été appliqué :

$$\partial_t \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_3 \end{pmatrix} = \partial_t \begin{pmatrix} S_1 \\ S_3 \end{pmatrix} + \partial_t \left(\underbrace{\begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{31} & \tau_{33} \end{pmatrix}}_{\tau_{\mathbf{B}}(S_1, S_3)} \partial_t \begin{pmatrix} S_1 \\ S_3 \end{pmatrix} \right) \quad (5.23)$$

$$\approx (\tau_{\mathbf{B}})^{-1} \begin{pmatrix} \sigma_1 - S_1 \\ \sigma_3 - S_3 \end{pmatrix} + \tau_{\mathbf{B}} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \begin{pmatrix} S_1 \\ S_3 \end{pmatrix} \quad (5.25)$$

Les variables secondaires sont évaluées à la saturation dynamique, et on néglige les dérivées secondes de la saturation $\partial_t^2 S_j \simeq 0$. Les conditions initiales sont prises dans la zone elliptiques, tandis que les conditions aux limites sont à l'extérieur.

Cas-test 1

On réitère la simulation précédente avec des conditions initiales :

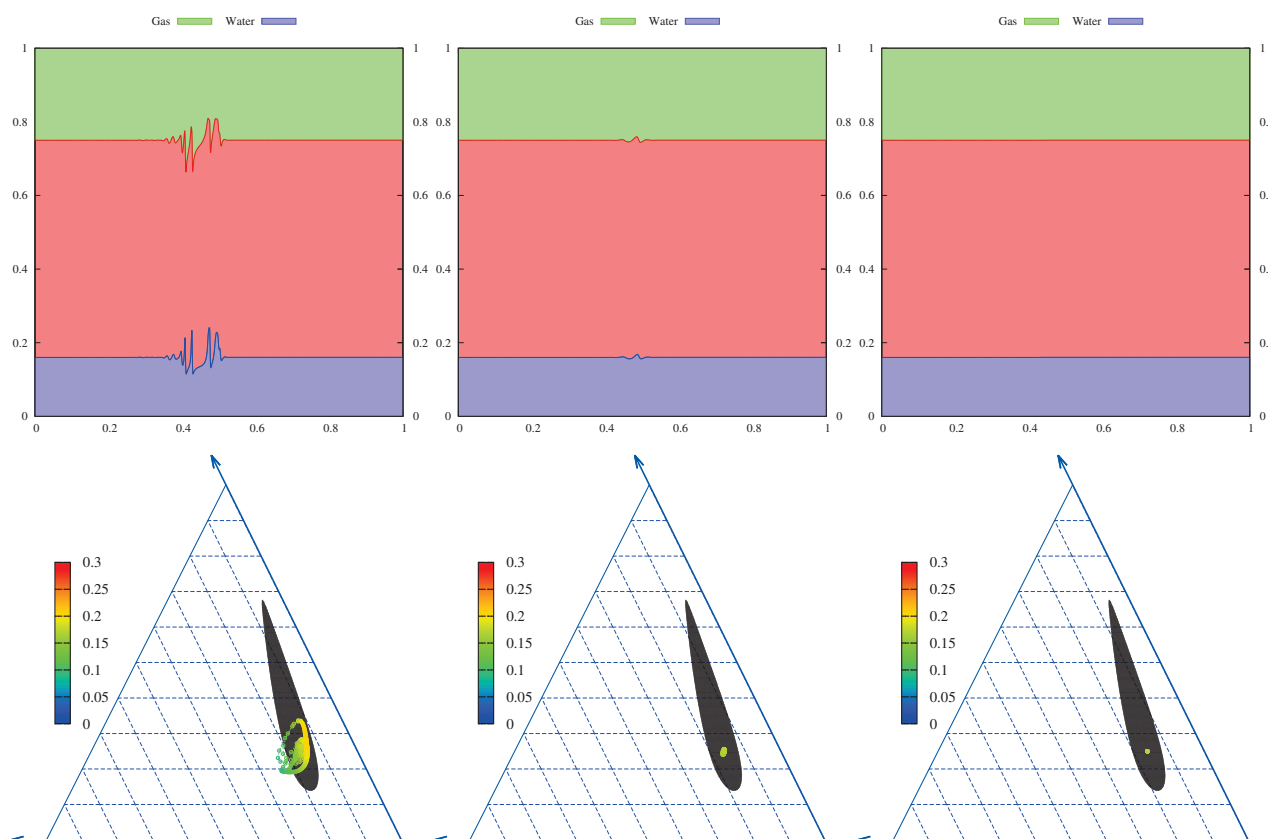


FIGURE 5.10 – Profils de saturation au bout de 400 jours pour la formulation dynamique ; l'état initial est dans la région elliptique et la condition aux limite en dehors ; $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1,2 \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$, $\tau = 0,22$ (à gauche), $\tau = 0,25$ (au centre) and $\tau = 0,3$ (à droite)

$$S = \begin{cases} S_L = \begin{pmatrix} 0,159 \\ 0,25 \end{pmatrix}_L & \text{si } x \leq 0 \\ S_R = \begin{pmatrix} 0,16 \\ 0,249 \end{pmatrix}_R & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad (5.26)$$

Il apparaît dans la figure 5.10 que le modèle de relaxation de Barenblatt permet de réduire les instabilités.

Cas-test 2

Dans ces simulations, les conditions initiales sont données par :

$$S = \begin{cases} S_L = \begin{pmatrix} 0,01 \\ 0,8 \end{pmatrix}_L & \text{si } x \leq 0 \\ S_R = \begin{pmatrix} 0,2 \\ 0,2 \end{pmatrix}_R & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad (5.27)$$

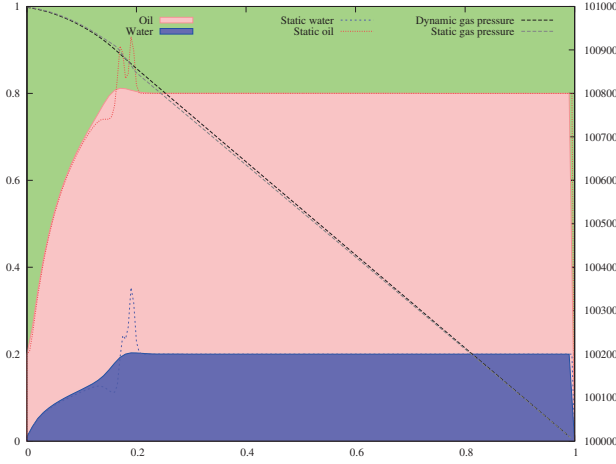


FIGURE 5.11 – Comparaison entre les profils de saturation au bout de 400 jours entre la formulation statique et la formulation dynamique compressible (modèle de Barenblatt) $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1. \text{ cp}$ and $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$

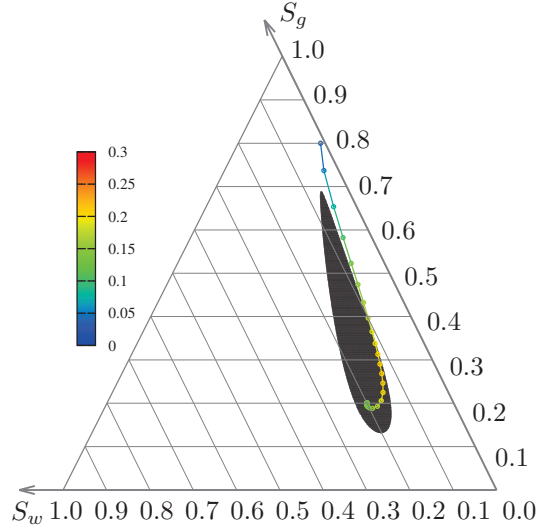


FIGURE 5.12 – Zones elliptiques du diagramme ternaire \mathbb{T} , avec $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1. \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$ et évolution de kr_2 avec le modèle de Barenblatt et $\tau = 1$ au bout de 400 jours

$$P_3(x, t) = \begin{cases} P_{3,L} = 1.01 \times 10^5 \text{ Pa} & \text{si } x \leq 0 \\ P_{3,R} = 1 \times 10^5 \text{ Pa} & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad (5.28)$$

Les résultats sont présentés dans les figures 5.11 et 5.12.

Cas-test 3

Dans ces simulations, les conditions initiales sont données par :

$$S = \begin{cases} S_L = \begin{pmatrix} 0.85 \\ 0.15 \end{pmatrix}_L & \text{si } x \leq 0 \\ S_R = \begin{pmatrix} 0.05 \\ 0.4 \end{pmatrix}_R & \text{si } x > 0, \end{cases} \quad (5.29)$$

$$P_3(x, t) = \begin{cases} P_{3,L} = 1.01 \times 10^5 \text{ Pa} & \text{si } x \leq 0 \\ P_{3,R} = 1 \times 10^5 \text{ Pa} & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad (5.30)$$

Les résultats sont présentés dans les figures 5.13 et 5.14.

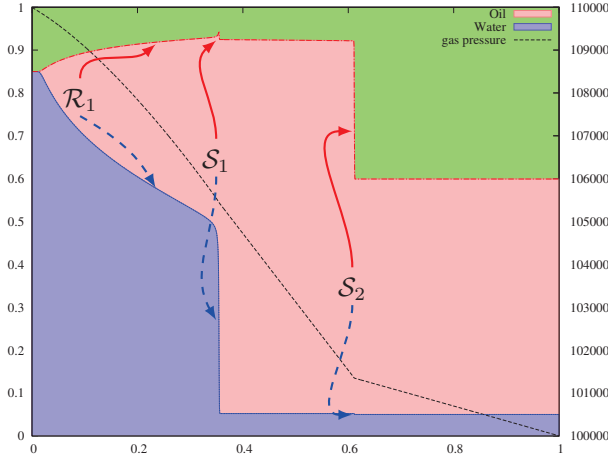


FIGURE 5.13 – Profils de saturation au bout de 64 jours pour une injection d'eau et de gaz, avec $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1.7 \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,02 \text{ cp}$, $g_z = 0$

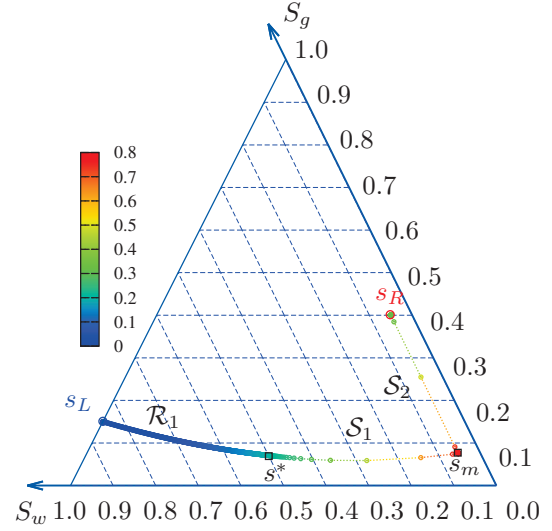


FIGURE 5.14 – Evolution du chemin des saturations dans le diagramme ternaire. La vague lente est un choc-onde de raréfaction, et la vague rapide est un vrai choc; $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1.7 \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,02 \text{ cp}$, $g_z = 0$; évolution des kr_2 au bout de 10 jours

5.4 Pistes de réflexion

Durant les premiers test d'écoulement mettant en jeu des zones elliptiques avec le solveur MOL, nous avons constaté que le fait de réduire significativement le pas de temps engendrait des résultats semblables aux effets de relaxation. L'avantage supplémentaire d'une réduction du pas de temps par rapport à l'approche de relaxation serait de pouvoir induire moins de diffusion, et de mieux pouvoir approcher les fronts abrupts.

Une autre condition d'hyperbolicité est donnée dans [Chavent and Jaffré, 1986] :

$$\frac{\partial v_1}{\partial S_3} \frac{\partial v_3}{\partial S_1} \geq \text{Min} \left(0, \frac{\partial v_1}{\partial S_1} \frac{\partial v_3}{\partial S_3} \right) \quad (5.31)$$

en tout point du diagramme ternaire.

Moyennant quelques hypothèses sur les pressions capillaires, Chavent et Jaffré montrent que le modèle de perméabilités triphasiques respectant la condition de Différentielle Totale 1.49 est également un modèle strictement hyperbolique en tout point. Ce qui n'est pas le cas du modèle de Stone. Dans [di Chiara R. et al., 2010], les auteurs proposent un algorithme d'interpolation de données triphasiques à partir du problème biharmonique $\Delta^2 P_c^g = 0$ sur \mathbb{T} .

Nous envisageons dans la suite d'optimiser ce modèle de perméabilités triphasiques respectant la condition de différentielle totale et ne présentant pas de zones elliptiques, vers un modèle

compatible avec les données de laboratoire (éventuellement de nous rapprocher du modèle de Stone).

Conclusion

Dans ce dernier chapitre nous avons introduit quelques problématiques actuelles liées aux modèles d'écoulements triphasiques. Plusieurs études affirment que les instabilités des simulations numériques sont inhérentes aux modèles de perméabilités triphasiques : elles apparaissent en effet au niveau des zones "elliptiques" du diagramme ternaire, qui dépendent de la matrice jacobienne des équations de saturation eau et gaz. Pour remédier à ces instabilités, il est possible de travailler sur le modèle lui-même. Cette démarche a été plusieurs fois remise en cause, les détracteurs de cette théorie avancent que les zones elliptiques sont souvent inhérentes aux modèles plus réalistes physiquement. Une alternative consiste alors à utiliser une approche de non-équilibre local. Nous prospecterons plutôt du côté de la construction de modèles de perméabilités respectant la condition de Différentielle Totale.

Conclusion générale

Dans le cadre de cette thèse, un modèle numérique d'écoulement diphasique de fluides incompressibles en milieux poreux avec effets gravitaires a été développé. Il a été construit sur la base des équations d'écoulement triphasiques en formulation pression globale-saturation en eau et en gaz ([Chavent and Jaffré, 1986]). L'analyse du problème de Buckley-Leverett a mis en évidence une forte influence du nombre gravitaire sur la forme des fronts de saturation. Afin d'intégrer les effets gravitaires dans les équations de pression et de saturation, un nouveau schéma numérique fut élaboré. Le schéma numérique fut intégré au code d'écoulement MPTRACES du projet CubicM ([di Chiara R., 2009]). Le module de convection a ensuite été testé sur le problème de Buckley-Leverett. L'implémentation du terme diffusif a également été revue et testée sur le problème de Mc-Worther-Sunada et un essai de drainage gravitaire a été effectué. Enfin, des perspectives de recherches pour la construction de perméabilités triphasiques de fluides ont été dégagées.

De l'importance de la formulation flux fractionnaire en pression globale

Nous avons choisi durant cette thèse de nous inscrire dans la suite des travaux de Chavent et Jaffré [Chavent and Jaffré, 1986], et plus récemment des co-auteurs de [Amaziane et al., 2012] sur la formulation en pression globale pour la construction de notre modèle numérique. Elle offre en effet l'avantage de pouvoir découpler partiellement les équation de pression globale et les deux équations de saturation. De plus, nous nous sommes appuyés sur une approche en flux fractionnaire, distinguant deux parties de l'équation de saturation : un opérateur de convection et un opérateur de diffusion. En écoulement diphasique, la disparition de la capillarité conduit à une équation purement hyperbolique. Le schéma numérique, détaillé dans le chapitre 2, est fondé sur une approche IMPES, avec une méthode de résolution EFMH pour l'équation de pression et la partie diffusif de l'équation de saturation.

Rappelons les trois lignes conductrices de notre réflexion :

- La question des effets gravitaires dominants relatifs aux écoulements diphasiques incompressibles.
- La simulation d'un drainage gravitaire, et une comparaison avec un modèle numérique de type pétrolier.
- La question de l'influence du choix de modèle de perméabilités triphasiques sur la stabilité numérique du système d'équations.

Validation du module convectif incluant les effets gravitaires

Nos travaux ont permis d'évaluer les effets d'une différence de densité importante par rapport à la vitesse totale dans l'écoulement diphasique de fluides incompressibles. Nous avons mis en évidence dans le chapitre 3 l'existence de la saturation d'entrée de la phase dans le domaine, liée au nombre gravitaire G , qui peut être inférieure ou égale à la condition de saturation imposée. Nous avons fourni un algorithme efficace basé sur des éléments finis discontinus de Galerkin incluant un schéma de Godounov généralisé. Le schéma numérique est bien adapté pour reproduire les discontinuités dans l'évolution du front de saturation en écoulement monodimensionnel dans un milieu homogène, et plus précis qu'un schéma volumes finis. Ces constats sont réitérés en dimension deux. Il apparaît également que le schéma est capable de mieux cerner les hétérogénéités du milieu qu'un schéma volumes finis. Globalement, la forme de l'écoulement eau-NAPL concorde avec les observations expérimentales.

Validation du module diffusif

Le chapitre 4 se place dans la configuration d'une vitesse totale dynamique, et non statique. Nous avons dans un premier temps validé l'implémentation du module de diffusion à travers le cas-test de Mc Whorther-Sunada (vitesse nulle). Puis nous nous sommes intéressés au couplage pression-saturation. C'est pourquoi nous avons réalisé une simulation d'un drainage gravitaire à grande échelle en deux dimensions. Les résultats obtenus donnent une bonne estimation de la forme du toit de la nappe, même si la vitesse d'écoulement semble légèrement surestimée par rapport aux simulations semblables réalisées à partir d'un code de type pétrolier (SIMUSCOPP).

Perspectives

Durant cette thèse, plusieurs questions furent soulevées :

- Généraliser l'étude des effets gravitaires importants à l'écoulement triphasique suppose d'étudier le système hyperbolique composé des deux équations de saturation en eau et en gaz, avec toute la complexité liée à la présence de plusieurs maximaux locaux potentiels.
- Poursuivre les simulations de drainage en milieu hétérogène, et déterminer le nombre de points de mesure de perméabilités nécessaires pour une estimation satisfaisante (approche inverse?).
- Proposer un modèle réaliste de perméabilités triphasiques respectant la condition de Différentielle Totale, donc ne présentant pas d'instabilités liées aux zones elliptiques du système triphasique. Cette problématique est actuellement très en vogue, comme en témoigne l'émergence de plusieurs méthodes de relaxation.

Table des figures

1.1	<i>Schéma de la migration d'un polluant dans les différents niveaux du sol.</i>	5
1.2	<i>Mécanismes en jeu dans le devenir d'une pollution de type organo-chlorés aliphatiques dans le milieu souterrain [Côme et al., 2008]</i>	7
1.3	<i>Milieu poreux rempli par de l'eau et de l'huile (système diphasique)</i>	8
1.4	<i>Écoulement de phases dans un milieu poreux - Détails de l'interface entre deux phases.</i>	9
1.5	<i>Tension de surface et angle de contact à l'équilibre</i>	9
1.6	<i>Repère</i>	10
1.7	<i>Évolution de la porosité ϕ en fonction du diamètre moyen r [Helmig, 1997]</i>	14
1.8	<i>Courbes capillaires sur le modèle de Brooks-Corey (gauche) et de Van Genuchten (droite) dans le cas d'un drainage et d'un imbibition. Pour le drainage : $\lambda = 2.89$, $P_d = 873 Pa$, $n = 5.5$, $j = 0.00077 Pa^{-1}$. Pour l'imbibition : $\lambda = 2.29$, $P_d = 667 Pa$, $n = 4$, $j = 0.0011 Pa^{-1}$ [Turner, 2004]</i>	17
1.9	<i>Perméabilités relatives associées au drainage et à l'imbibition. Paramètres pour le drainage : $\lambda = 2.89$, $P_d = 873 Pa$, $n = 5.5$, $\alpha = 0.00077 Pa^{-1}$. Paramètres pour l'imbibition : $\lambda = 2.29$, $P_d = 667 Pa$, $n = 4$, $\alpha = 0.0011 Pa^{-1}$ [Turner, 2004]</i>	18
1.10	<i>Modèle de Todd diphasique eau-huile</i>	19
1.11	<i>Diagramme ternaire \mathbb{T} de la Pression capillaire globale en fonction des saturation en eau ($j = 1$) et en gaz ($j = 3$). Deux chemins d'intégration $C \sim C^1 \cup C^3$ [di Chiara R. et al., 2010].</i>	25
2.1	<i>Conditions aux limites</i>	32
2.2	<i>Schéma IMPES</i>	39
2.3	<i>Espace de Raviart-Thomas</i>	41
2.4	<i>Répartition des noeuds dans les triangles</i>	54
2.5	<i>Évaluation des saturations aux noeuds par rapport à S_2^* pour un écoulement diphasique incompressible</i>	55
2.6	<i>Évaluation de la saturation S_1^* pour un écoulement diphasique incompressible eau-huile</i>	57
2.7	<i>Évaluation de la saturation S_1^* pour un écoulement diphasique incompressible eau-gaz</i>	58
3.1	<i>Caractéristiques qui ne se croisent pas</i>	62
3.2	<i>Caractéristiques qui se croisent</i>	63
3.3	<i>Caractéristiques pour l'équation de Burgers</i>	63
3.4	<i>Fonction flux F et valeur de saturation en huile au front (tangente de Welge)</i>	67

3.5	<i>Injection d'huile à vitesse constante dans une colonne saturée en eau : conditions aux limites et valeurs de pression</i>	68
3.6	Flux function F for the Buckley-Leverett equation in Case 1 ($v_t = 10^{-3}m \cdot s^{-1}$, $\Delta\rho = 400kg \cdot m^{-3}$ and $M = 1$)	77
3.7	Riemann solution for the Buckley-Leverett equation in Case 1, with $M = 1$	78
3.8	Flux function F for the Buckley-Leverett equation in Case 2 ($v_t = 10^{-5}m \cdot s^{-1}$, $\Delta\rho = 400 kg \cdot m^{-3}$ and $M = 1$)	79
3.9	Riemann solution for the Buckley-Leverett equation in Case 2, with $M = 1$	79
3.10	Entry and front saturation as function of the density difference $\Delta\rho$ for $v_t = 10^{-3}m \cdot s^{-1}$	81
3.11	Entry and front saturation as function of the density difference $\Delta\rho$ for $v_t = 10^{-4}m \cdot s^{-1}$	81
3.12	Entry and front saturation as function of the density difference $\Delta\rho$ for $v_t = 10^{-5}m \cdot s^{-1}$	81
3.13	<i>Nodes repartition in the triangles</i>	83
3.14	<i>Evaluation of the nodal saturation according to S^*</i>	85
3.15	<i>Scheme of an NAPL injection into a water-saturated porous medium</i>	86
3.16	<i>Comparison of the numerical solution calculated using DGFEM with the quasi-analytical Buckley-Leverett solution, for $v_t = 10^{-3}m \cdot s^{-1}$ at 1000 s and for three different mesh sizes.</i>	87
3.17	<i>Example 1.a; comparison of the numerical solution calculated using DGFEM with the quasi-analytical Buckley-Leverett solution, for $v_t = 10^{-3}m \cdot s^{-1}$ at 1000 s for three NAPL densities and $M = 1$.</i>	88
3.18	<i>Example 1b; comparison of the numerical solution calculated using DGFEM and FV with the quasi-analytical Buckley-Leverett solution, for $v_t = 10^{-3}m \cdot s^{-1}$ at 1000 s and $M = 1$.</i>	88
3.19	<i>Example 2; comparison of the numerical solution calculated using DGFEM and FV with the quasi-analytical Buckley-Leverett solution, for $v_t = 10^{-3}m \cdot s^{-1}$ at 1000 s for NAPL characteristics and $M = 0.05$.</i>	89
3.20	<i>Example 3; comparison of the numerical solution calculated using DGFEM and FV with the quasi-analytical Buckley-Leverett solution, for $v_t = 10^{-4}m \cdot s^{-1}$ at 5000 sec. for NAPL characteristics and $M = 0.5$.</i>	89
3.21	<i>Example 4; comparison of the numerical solution calculated using DGFEM and FV with the quasi-analytical Buckley-Leverett solution, for $v_t = 10^{-5}m \cdot s^{-1}$ at 10000 sec. for NAPL characteristics and $M = 1$.</i>	90
3.22	<i>Mass cumulated error with parameters from Example 1, $\Delta\rho = +600 kg \cdot m^{-3}$ and $M = 1$</i>	91
3.23	<i>Error analysis with parameters from Example 1, $\Delta\rho = +600 kg \cdot m^{-3}$, and $M = 1$ and growing mesh size</i>	91
3.24	<i>Error analysis with parameters from Example 4, with $\Delta\rho = +600 kg \cdot m^{-3}$, and $M = 1$ and growing mesh size</i>	92
3.25	<i>2D simulation domain and boundary conditions.</i>	93
3.26	Example A; final distribution of NAPL saturation calculated with DGFEM on a fine grid.	94
3.27	Example A; final distribution of NAPL saturation calculated with FV on a fine grid.	95
3.28	Example A; final distribution of NAPL saturation calculated with DGFEM on a coarse grid.	95

3.29	Example B ; final distribution of NAPL saturation calculated with DGFEM on a fine grid.	96
3.30	Example B ; final distribution of NAPL saturation calculated with FV on a fine grid.	97
3.31	Spatial moments as function of time. On the left : vertical position of the mass centre (middle-line) and its deviations in z -direction (upper line $\bar{z} - \sigma_{zz}$, lower line $\bar{x} + \sigma_{xx}$). On the right : horizontal position of the mass centre and its deviations in x -direction (left line $\bar{x} - \sigma_{xx}$, right line $\bar{x} + \sigma_{xx}$).	98
3.32	Entry and front saturation as function of the density difference $\Delta\rho$ for $v_t = 10^{-3}m \cdot s^{-1}$	101
3.33	Entry and front saturation as function of the density difference $\Delta\rho$ for $v_t = 10^{-4}m \cdot s^{-1}$	101
3.34	Entry and front saturation as function of the density difference $\Delta\rho$ for $v_t = 10^{-5}m \cdot s^{-1}$	102
4.1	<i>Ecoulement à contre-courant d'eau dans un domaine initialement saturé en huile : conditions aux limites</i>	104
4.2	<i>Simulation d'un écoulement eau-huile. Comparaison des profils de saturation numériques et analytiques pour les méthodes A et B (en haut); distribution de saturation numérique de la méthode B (en bas).</i>	106
4.3	<i>Conditions aux limites de l'exemple 1.</i>	107
4.4	<i>Conditions aux limites de l'exemple 2.</i>	108
4.5	<i>Exemple 1 : simulation d'un écoulement eau-gaz. Profils de saturation numériques et analytiques (en haut); distribution de saturation numérique (en bas).</i>	109
4.6	<i>Exemple 2 : simulation d'un écoulement eau-gaz. Profils de saturation numériques et analytiques (en haut); distribution de saturation numérique (en bas).</i>	110
4.7	<i>Photo du bassin expérimental SCERES en 2009 ([Marzougui, 2013])</i>	111
4.8	<i>Photo de la fosse amont sur le bassin SCERES</i>	111
4.9	<i>Schéma simplifié du bassin SCERES : coupe transversale</i>	112
4.10	<i>Conditions aux limites</i>	113
4.11	<i>Evolution des valeurs de saturation dans le domaine</i>	115
4.12	<i>Valeurs de pression dans le domaine (Pa)</i>	116
4.13	<i>Evolution de la pression globale au centre du domaine</i>	117
4.14	<i>Valeurs de vitesse totale en [m/s] sur le domaine</i>	117
4.15	<i>Distribution du vecteur vitesse totale en [m/s]</i>	118
4.16	<i>Valeurs de saturation au bout de 1h de drainage</i>	119
4.17	<i>Valeurs de saturation au bout de 2h de drainage</i>	120
4.18	<i>Valeurs de saturation au bout de 3h de drainage</i>	121
4.19	<i>Distribution du vecteur vitesse totale en [m/s]; Comparaison des valeurs de vitesse PG-Pgaz</i>	122
5.1	<i>Schéma de construction des perméabilités triphasiques</i>	126
5.2	<i>Stone I : régions elliptiques du diagramme ternaire avec $\mu_w = 0,8 cp$, $\mu_o = 0,1 cp$ et $\mu_g = 0,05 cp$, $g_z = 0$</i>	129
5.3	<i>Stone I : régions elliptiques du diagramme ternaire avec $\mu_w = 0,8 cp$, $\mu_o = 1 cp$ et $\mu_g = 0,05 cp$, $g_z = 0$</i>	129
5.4	<i>Stone I : régions elliptiques du diagramme ternaire avec $\mu_w = 0,8 cp$, $\mu_o = 5 cp$ et $\mu_g = 0,05 cp$, $g_z = 0$</i>	129

5.5	<i>Stone I : régions elliptiques du diagramme ternaire avec $\mu_w = 1,2 \text{ cp}$, $\mu_o = 0,5 \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$</i>	129
5.6	<i>Profils de saturation au bout de 400 jours pour la formulation classique compressible ; l'état initial est dans la région elliptique et la condition aux limite en dehors de la région elliptique avec $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1. \text{ cp}$ and $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$</i> . . .	130
5.7	<i>Region elliptique du diagramme ternaire avec $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1. \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$; évolution de kr_2 le long des chemins de saturation à 400 jours</i> .	130
5.8	<i>Profils de saturation au bout de 400 jours pour la formulation classique compressible ; l'état initial est dans la région elliptique et la condition aux limite en dehors ; $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1. \text{ cp}$ and $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$</i>	131
5.9	<i>Region elliptique du diagramme ternaire avec $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1. \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$; évolution de kr_2 le long des chemins de saturation au bout de 400 jours.</i>	131
5.10	<i>Profils de saturation au bout de 400 jours pour la formulation dynamique ; l'état initial est dans la région elliptique et la condition aux limite en dehors ; $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1.2 \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$, $\tau = 0.22$ (à gauche), $\tau = 0.25$ (au centre) and $\tau = 0.3$ (à droite)</i>	133
5.11	<i>Comparaison entre les profils de saturation au bout de 400 jours entre la formulation statique et la formulation dynamique compressible (modèle de Barenblatt) $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1. \text{ cp}$ and $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$</i>	134
5.12	<i>Zones elliptiques du diagramme ternaire \mathbb{T}, avec $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1. \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,05 \text{ cp}$, $g_z = 0$ et évolution de kr_2 avec le modèle de Barenblatt et $\tau = 1$ au bout de 400 jours</i>	134
5.13	<i>Profils de saturation au bout de 64 jours pour une injection d'eau et de gaz, avec $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1.7 \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,02 \text{ cp}$, $g_z = 0$</i>	135
5.14	<i>Evolution du chemin des saturations dans le diagramme ternaire. La vague lente est un choc-onde de raréfaction, et la vague rapide est un vrai choc ; $\mu_w = 0,8 \text{ cp}$, $\mu_o = 1.7 \text{ cp}$ et $\mu_g = 0,02 \text{ cp}$, $g_z = 0$; évolution des kr_2 au bout de 10 jours</i>	135
B.1	<i>Triangle de référence</i>	155

Bibliographie

- [Amaziane et al., 2010] Amaziane, B., Jurak, M., and Žgaljić Keko, A. (2010). Modeling and numerical simulations of immiscible compressible two-phase flow in porous media by the concept of global pressure. *Transp. Porous Media*, 84(1) :133–152.
- [Amaziane et al., 2011a] Amaziane, B., Jurak, M., and Žgaljić Keko, A. (2011a). An existence result for a coupled system modeling a fully equivalent global pressure formulation for immiscible compressible two-phase flow in porous media. *J. Differential Equations*, 250(3) :1685–1718.
- [Amaziane et al., 2011b] Amaziane, B., Jurak, M., and Žgaljić Keko, A. (2011b). An existence result for a coupled system modeling a fully equivalent global pressure formulation for immiscible compressible two-phase flow in porous media. *J. Differential Equations*, 250(3) :1685–1718.
- [Amaziane et al., 2012] Amaziane, B., Jurak, M., and Žgaljić Keko, A. (2012). Numerical simulations of water-gas flow in heterogeneous porous media with discontinuous capillary pressures by the concept of global pressure. *J. Comput. Appl. Math.*, 236(17) :4227–4244.
- [Andreianov and Cancès, 2013] Andreianov, B. and Cancès, C. (2013). Vanishing capillarity solutions of Buckley-Leverett equation with gravity in two-rocks’ medium. *Comput. Geosci.*, 17(3) :551–572.
- [Arbogast, 1992] Arbogast, T. (1992). The existence of weak solutions to single porosity and simple dual-porosity models of two-phase incompressible flow. *J. Nonlinear Anal.*, 19(11) :1009–1031.
- [Aris, 1956] Aris, R. (1956). On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube. *Proceedings of The Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 235.
- [Aziz and Settari, 1979] Aziz, K. and Settari, A. (1979). *Petroleum Reservoir Simulation*. Applied Science Publishers, London.
- [Barenblatt et al., 2003] Barenblatt, G., Patzek, T., and Silin, D. (2003). The mathematical model of non-equilibrium effects in water-oil displacement. *SPE Journal*, 8 :409–416.
- [Bear, 1972] Bear, J. (1972). *Dynamics of fluids in porous media*. Am. Elsevier Publishing Company, Inc.
- [Belfort, 2006] Belfort, B. (2006). *Modélisation des écoulements en milieux poreux non saturés par la méthode des éléments finis mixtes hybrides*. PhD thesis, Université Louis Pasteur-CNRS.
- [Bell et al., 1986] Bell, J. B., Trangenstein, J. A., and Shubin, G. R. (1986). Conservation laws of mixed type describing three-phase flow in porous media. *SIAM J. Appl. Math.*, 46(6) :1000–1017.

- [Betounes, 2010] Betounes, D. (2010). *Differential equations : theory and applications*. Springer, New York, second edition.
- [Binning and Celia, 1999] Binning, P. J. and Celia, M. A. (1999). Practical implementation of the fractional flow approach to multi-phase flow simulation. *Advances in Water Resources*, 22(5) :461–478.
- [Blum, 2004] Blum, A. (2004). L'état des eaux souterraines en France, aspects quantitatifs et qualitatifs. Technical Report 43, AFEN.
- [Brezis, 1983] Brezis, H. (1983). *Analyse fonctionnelle*. Collection Mathématiques Appliquées pour la Maîtrise. [Collection of Applied Mathematics for the Master's Degree]. Masson, Paris. Théorie et applications. [Theory and applications].
- [Brooks and Corey, 1964] Brooks, R. and Corey, A. (1964). Hydraulic properties of porous media.
- [Buckley and Leverett., 1942] Buckley, S. E. and Leverett., M. C. (1942). Mechanism of fluid displacement in sands. *Am. Inst. Min. Metall. Pet. Eng.*, 146 :107–116.
- [Cancès and Pierre, 2012] Cancès, C. and Pierre, M. (2012). An existence result for multidimensional immiscible two-phase flows with discontinuous capillary pressure field. *SIAM J. Math. Anal.*, 44(2) :966–992.
- [Celia and Binning, 1992] Celia, M. A. and Binning, P. J. (1992). A mass conservative numerical solution for two-phase flow in porous media with application to unsaturated flow. *Water Resources Research*, 28(10) :2819–2828.
- [Chavent, 2009] Chavent, G. (2009). A fully equivalent global pressure formulation for three-phases compressible flows. *Appl. Anal.*, 88(10-11) :1527–1541.
- [Chavent and Jaffré, 1986] Chavent, G. and Jaffré, J. (1986). *Mathematical models and finite elements for reservoir simulation*. Elsevier Science publishers B.V.
- [Chen, 2005] Chen, Z. (2005). *Finite element methods and their applications*. Scientific Computation. Springer-Verlag, Berlin.
- [Chen et al., 1994] Chen, Z., Ewing, R., and Espedal, M. (1994). Multiphase flow simulation with various boundary conditions. *X International Conference on Computational Methods in Water Resources, Heidelberg*.
- [Chen and Ewing, 1997] Chen, Z. and Ewing, R. E. (1997). Comparison of various formulations of three-phase flow in porous media. *J. Comput. Phys.*, 132(2) :362–373.
- [Côme et al., 2008] Côme, J., Quintard, M., Schäfer, G., Mosé, R., Delaplace, P., Haeseler, F., and Mouton, C. (2008). Modélisation du devenir des composés organochlorés aliphatiques dans les aquifères guide méthodologique. Technical Report 43, ADEME.
- [di Chiara R., 2009] di Chiara R., R. (2009). *Développement d'un code de calcul multiphasique multiconstituants*. PhD thesis, Université de Strasbourg.
- [di Chiara R. et al., 2010] di Chiara R., R., Chavent, G., and Schäfer, G. (2010). Three-phase compressible flow in porous media : total differential compatible interpolation of relative permeabilities. *J. Comput. Phys.*, 229(12) :4762–4780.

-
- [Ducreux and le Thiez, 1994] Ducreux, J. and le Thiez, P. (1994). A 3-d numerical model for analysing hydrocarbon migration into soils and aquifers. *Computer Methods and Advances in Geomechanics*.
- [Durlafsky, 1993] Durlafsky, L. (1993). A triangle based mixed finite element-finite volume technique for modelling two phase flow through porous media. *Journal of Computational Physics*, 105 :252–266.
- [El Soueidy et al., 2009] El Soueidy, C. P., Younes, A., and Ackerer, P. (2009). Solving the advection-diffusion equation on unstructured meshes with discontinuous/mixed finite elements and a local time stepping procedure. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 79(9) :1068–1093.
- [Ern and Schuh, 2010] Ern, A., M. I. and Schuh, L. (2010). Discontinuous galerkin approximation of two-phase flows in heterogeneous porous media with discontinuous capillary pressures. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 199(9) :1491–1501.
- [Ewing, 2001] Ewing, R. (2001). Mathematical modeling and simulation for fluid flow in porous media. 13(2) :117–127.
- [Ewing and Berkowitz, 1998] Ewing, R. and Berkowitz, B. (1998). A generalized growth model for simulating initial migration of dense non-aqueous phase liquids. *Water Resources Research*, (34) :611–622.
- [Eymard et al., 1998] Eymard, R., Gallouët, T., Ghilani, M., and Herbin, R. (1998). Error estimates for the approximate solutions of a nonlinear hyperbolic equation given by finite volume schemes. *IMA J. Numer. Anal.*, 18(4) :563–594.
- [Frette et al., 1997] Frette, O., Måløy, K., Schmittbuhl, J., and Hansen, J. (1997). Immiscible displacement of viscosity-matched fluids in two-dimensional porous media. *Phys. Rev.*, 3 :2969–2975.
- [Galusinski and Saad, 2008] Galusinski, C. and Saad, M. (2008). Two compressible immiscible fluids in porous media. *J. Differential Equations*, 244(7) :1741–1783.
- [Godlewski and Raviart, 1991a] Godlewski, E. and Raviart, P.-A. (1991a). *Hyperbolic systems of conservation laws*, volume 3/4 of *Mathématiques & Applications (Paris) [Mathematics and Applications]*. Ellipses, Paris.
- [Godlewski and Raviart, 1991b] Godlewski, E. and Raviart, P.-A. (1991b). *Hyperbolic systems of conservation laws*, volume 3/4 of *Mathématiques & Applications (Paris) [Mathematics and Applications]*. Ellipses, Paris.
- [Harten, 1983] Harten, A. (1983). High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 49(3) :357–393.
- [Hassanizadeh and Gray, 2010] Hassanizadeh, S. M. and Gray, W. (2010). Thermodynamic basis of capillary pressure in porous media. *Water Resour. Res.*, 29 :3389–3405.
- [Helmig, 1997] Helmig, R. (1997). *Multiphase Flow and transport Processes in the subsurface*. Springer.
- [Hoteit and Firoozabadi, 2005] Hoteit, H. and Firoozabadi, A. (2005). Multicomponent fluid flow by discontinuous galerkin and mixed methods in unfractured and fractured media. *Water Resources Research*, 41(3).

- [Hoteit and Firoozabadi, 2008] Hoteit, H. and Firoozabadi, A. (2008). Numerical modeling of two-phase flow in heterogeneous permeable media with different capillarity pressures. *Advances in Water Resources*, 31.
- [Huber and Helmig, 1999] Huber, R. and Helmig, R. (1999). Multiphase flow in heterogeneous porous media : a classical finite element method versus an implicit pressure–explicit saturation-based mixed finite element–finite volume approach. *Internat. J. Numer. Methods Fluids*, 29(8) :899–920.
- [Jackson and Blunt, 2002] Jackson, M. D. and Blunt, M. J. (2002). Elliptic regions and stable solutions for three-phase flow in porous media. *Transp. Porous Media*, 48 :249–269.
- [Jahanbakhshi et al., 2013] Jahanbakhshi, S., Ghazanfari, M. H., and Masih, M. (2013). Non-equilibrium model of three-phase flow in porous media in presence of capillary and gravity forces. *Journal of Hydrology*, 478 :119–131.
- [Joekar-Niasar et al., 2010] Joekar-Niasar, V., Hassanizadeh, S. M., and Dahle, H. K. (2010). Non-equilibrium effects in capillarity and interfacial area in two-phase flow : dynamic pore-network modelling. *J. Fluid Mech.*, 655 :38–71.
- [Juanes and Patzek, 2004a] Juanes, R. and Patzek, T. W. (2004a). Relative permeabilities for strictly hyperbolic models of three-phase flow in porous media. *Transp. Porous Media*, 57(2) :125–152.
- [Juanes and Patzek, 2004b] Juanes, R. and Patzek, T. W. (2004b). Three-phase displacement theory : An improved description of relative permeabilities. *SPE Journal*.
- [Kaasschieter, 1999] Kaasschieter, E. F. (1999). Solving the Buckley-Leverett equation with gravity in a heterogeneous porous medium. *Comput. Geosci.*, 3(1) :23–48.
- [Khalil and Saad, 2010] Khalil, Z. and Saad, M. (2010). Solutions to a model for compressible immiscible two phase flow in porous media. *Electron. J. Differential Equations*, pages No. 122, 33.
- [Khalil and Saad, 2011] Khalil, Z. and Saad, M. (2011). On a fully nonlinear degenerate parabolic system modeling immiscible gas-water displacement in porous media. *Nonlinear Anal. Real World Appl.*, 12(3) :1591–1615.
- [Kružkov, 1970] Kružkov, S. N. (1970). First order quasilinear equations with several independent variables. *Mat. Sb. (N.S.)*, 81 (123) :228–255.
- [Lagoutière, 2011] Lagoutière, F. (2011). Equations aux dérivées partielles et leurs approximations. Paris-Sud University.
- [Langtangen and Tveiko, 1992] Langtangen, H. P. and Tveiko, A. (1992). Instability of buckley-leverett flow in a hetegogeneous medium. *Transport in Porous Media*, 9(2) :165–185.
- [Lenormand et al., 1988] Lenormand, R., Touboul, E., and Zarcone., C. (1988). Numerical model and experiments on immiscible displacements in porous media. *J. Fluid Mechanics*, 198 :165–187.
- [Lenormand and Zarcone, 1989] Lenormand, R. and Zarcone, C. (1989). Capillary fingering : percolation and fractal dimension. *J. Porous Media*, 4 :599–612.

-
- [LeVeque, 2002] LeVeque, R. J. (2002). *Finite volume methods for hyperbolic problems*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, Cambridge.
- [Løvoll et al., 2011] Løvoll, G., Jankov, M., Måløy, K. J., Toussaint, R., Schmittbuhl, J., Schäfer, G., and Méheust, Y. (2011). Influence of viscous fingering on dynamic saturation-pressure curves in porous media. *Transport in porous Media*, 86 :305–324.
- [Marzougui, 2013] Marzougui, S. J. (2013). *Transfert d'un composé organo-chloré depuis une zone source localisée en zone non saturée d'un aquifère poreux vers l'interface sol-air : expérimentations et modélisations associées*. PhD thesis, Université de Strasbourg.
- [McWhorther and Sunada, 1990] McWhorther, D. and Sunada, D. (1990). Exact integral solutions for two-phase flow. (26) :399–413.
- [Morel-Seytoux et al., 1996] Morel-Seytoux, H., Meyer, P., Nachabe, M., Touma, M., and Van Genuchten, M. (1996). Parameter equivalence for the brooks-corey and van genuchten soil characteristics : Preserving the effective capillary drive. *Water Resources Research*, 32(5) :1251–1258.
- [Muskat, 1937] Muskat, M. (1937). *The Flow of Homogeneous Fluids Through Porous Media*. McGraw-Hill Book Company.
- [Nayagum, 2001] Nayagum, D. (2001). *Simulation numérique de la pollution du sous-sol par les produits pétroliers et dérivés : application au cas d'un écoulement diphasique monodimensionnel*. PhD thesis, Université de Strasbourg.
- [Nayagum et al., 2004] Nayagum, D., Schäfer, G., and Mosé, R. (2004). Modelling two-phase incompressible flow in porous media using mixed hybrid and discontinuous finite elements. *Comput. Geosci.*, 8(1) :49–73.
- [Nsir and Schäfer, 2010] Nsir, K. and Schäfer, G. (2010). A pore-throat model based on grain-size distribution to quantify gravity-dominated dnapl instabilities in a water-saturated homogeneous porous medium. *Comptes Rendus Geoscience*, (342) :881–891.
- [Nsir et al., 2011] Nsir, K., Schäfer, G., di Chiara R., R., Razakarisoa, O., and Toussaint, R. (2011). Laboratory experiment on dnapl gravity fingering in water-saturated porous media. *International Journal of Multiphase flow*.
- [Ounaies et al., 2013] Ounaies, S., Schäfer, G., and Trémoilières, M. (2013). Quantification of vertical water fluxes in the vadose zone using particle-size distribution and pedology-based approaches to model soil heterogeneities. *Hydrological processes*, 27 :2306–2324.
- [Parker and Lenhard, 1987] Parker, J. and Lenhard, R. (1987). A model for constitutive relations governing multiphase flow in porous media 1. saturation-pressure relations. *Water resources research*, 23(4) :618–624.
- [Proskurowski, 1981] Proskurowski, W. (1981). A note on solving the buckley-leverett equation in the presence of gravity. *J. Comput. Phys.*, 41(1) :136–141.
- [Raouf et al., 2012] Raouf, A., Hassanizadeh, S. M., and Dahle, H. K. (2012). A new formulation for pore-network modeling of two-phase flow. *Water Resources Research*, 48.

- [Raviart, 1984] Raviart, P.-A. (1984). Mixed finite element methods. In *The mathematical basis of finite element methods (London, 1983)*, volume 2 of *Inst. Math. Appl. Conf. Ser. New Ser.*, pages 123–156. Oxford Univ. Press, New York.
- [Riaz and Tchelepi, 2004] Riaz, A. and Tchelepi, H. A. (2004). Linear stability analysis of immiscible two-phase flow in porous media with capillary dispersion and density variation. *Phys. Fluids*, 16(12) :4727–4737.
- [Riaz and Tchelepi, 2006] Riaz, A. and Tchelepi, H. A. (2006). Influence of relative permeability on the stability characteristics of immiscible flow in porous media. *Transp. Porous Media*, 64(1) :315–338.
- [Riaz and Tchelepi, 2007] Riaz, A. and Tchelepi, H. A. (2007). Stability of two-phase vertical flow in homogeneous porous media. *Physics of Fluids*, 19.
- [Sposito, 1998] Sposito, G. (1998). *Scale dependance and scale invariance in hydrology*. Cambridge University Press.
- [Toro, 2009] Toro, E. F. (2009). *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics, A practical introduction*. Springer.
- [Toussaint et al., 2005] Toussaint, R., Løvoll, G., Méheust, Y., Måløy, K., and Schmittbuhl, J. (2005). Influence of pore-scale disorder on viscous fingering during drainage. *Europhys. Lett.*, 71 :583–589.
- [Turner, 2004] Turner, A. (2004). *Behavior of dense non-aqueous phase liquids at soil interfaces of heterogeneous formations : Experimental methods and physical model testing. Numerical Computation of Multiphase Flows in Porous Media*. PhD thesis, Colorado School of Mines, Golden, Colorado.
- [Van Duijn et al., 2007] Van Duijn, C. J., Peletier, L. A., and Pop, I. S. (2007). A new class of entropy solutions of the Buckley-Leverett equation. *SIAM J. Math. Anal.*, 39(2) :507–536 (electronic).
- [Van Genuchten, 1980] Van Genuchten, M. (1980). A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, (44) :892–898.
- [Van Leer, 1979] Van Leer, B. (1979). Towards the ultimate conservative difference scheme v. a second-order sequel to godunov’s method. *Journal of Computational Physics*, 32(1) :101–136.
- [Yeh et al., 2005] Yeh, T.-C. J., Ye, M., and Khaleel, R. (2005). Estimation of effective unsaturated hydrolic conductivity tensor using spatial moments of observed moisture plume. *Water Resources Research*, 41(3).
- [Younes et al., 2010] Younes, A., Fahs, M., and Ackerer, P. (2010). An efficient geometric approach to solve the slope limiting problem with the discontinuous Galerkin method on unstructured triangles. *Int. J. Numer. Methods Biomed. Eng.*, 26(12) :1824–1835.

A

Propriétés de la Formulation en Pression Globale

A.1 Formulation flux fractionnaire

Proposition 9. *En formulation pression globale, on peut réécrire les équations de saturation en fonction des flux fractionnaires ainsi que du flux total en distinguant une partie diffusive et une partie convective. Par exemple, pour l'équation de saturation en eau ou en gaz, on a :*

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \phi\sigma \frac{\partial(B_j(P_j)S_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma \mathbf{v}_j) = 0 \quad j = 1, 3 \\
 \mathbf{v}_j = \underbrace{\frac{\nu_j}{\omega} \mathbf{v} - \nu_j d\mathbf{K} \cdot \left[\frac{1-\omega}{\omega} \bar{\rho} - \Delta\rho_j \right] g \nabla Z}_{\text{Partie convective}} - \underbrace{\nu_j d\mathbf{K} \cdot [\nabla(P_c^{j2} - P_c^g)]}_{\text{Partie diffusive}} \\
 \Delta\rho_1 = (\nu_2(\rho_2 - \rho_1) + \nu_3(\rho_3 - \rho_2)) \\
 \Delta\rho_3 = (\nu_2(\rho_2 - \rho_3) + \nu_1(\rho_3 - \rho_1)) \\
 \sum_{j=1}^3 S_j = 1 \\
 \omega = \left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \right)
 \end{array} \right. \quad (\text{A.1})$$

Démonstration : Par exemple, pour la phase eau, à partir des équations de pression globale-saturations, on exprime la vitesse de la phase en fonction de la vitesse totale et des flux fractionnaire :

$$\mathbf{v}_1 = \nu_1 \mathbf{v} + (\nu_2 + \nu_3) \mathbf{v}_1 - \nu_1 \mathbf{v}_2 - \nu_1 \mathbf{v}_3 \quad (\text{A.2})$$

Dans un second temps, on exprime les vitesses des phases en fonction des gradients de pressions :

$$\mathbf{v}_1 = \nu_1 \mathbf{v} + d\mathbf{K} \cdot [\nu_1 \nu_2 (\nabla P_2 - \rho_2 g \nabla z) + \nu_1 \nu_3 (\nabla P_3 - \rho_3 g \nabla z) - (\nu_2 + \nu_3) \nu_1 (\nabla P_1 - \rho_1 g \nabla z)]$$

$$\mathbf{v}_1 = \nu_1 \mathbf{v} + d\mathbf{K} \cdot \left[\underbrace{\nu_1 \nu_2 \nabla (P_2 - P_1)}_{=-P_c^{12}} + \underbrace{\nu_1 \nu_3 \nabla (P_3 - P_2)}_{=P_c^{32} - P_c^{12}} + (\nu_1 \nu_2 (\rho_1 - \rho_2) + \nu_1 \nu_3 (\rho_1 - \rho_3)) g \nabla z \right]$$

Or

$$\nu_1 \nu_2 = \nu_1 (1 - \nu_1 - \nu_3) \quad (\text{A.3})$$

ce qui donne :

$$\mathbf{v}_1 = \nu_1 \mathbf{v} - d\mathbf{K} \cdot \left[\nu_1 (1 - \nu_1 - \nu_3) \nabla P_c^{12} - \nu_1 \nu_3 \nabla (P_c^{32} - P_c^{12}) + \underbrace{\nu_1 (\nu_2 (\rho_2 - \rho_1) + \nu_3 (\rho_3 - \rho_1))}_{\Delta \rho_1} g \nabla z \right]$$

$$\mathbf{v}_1 = \nu_1 \mathbf{v} - \nu_1 d\mathbf{K} \cdot \left[\nabla P_c^{12} - \underbrace{(\nu_1 \nabla P_c^{12} + \nu_3 \nabla P_c^{32})}_{=\nabla P_c^g - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \nabla p} - \Delta \rho_1 g \nabla z \right]$$

$$\mathbf{v}_1 = \nu_1 \mathbf{v} - \nu_1 d\mathbf{K} \cdot \left[\nabla (P_c^{12} - P_c^g) + \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \nabla p - \Delta \rho_1 g \nabla z \right]$$

$$\text{Or } \nabla p = \left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \right)^{-1} [\bar{\rho} g \nabla z - (d\mathbf{K})^{-1} \cdot \mathbf{v}]$$

d'où :

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1 &= \nu_1 \mathbf{v} \left(1 + \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \right)^{-1} \right) \\ &- \nu_1 d\mathbf{K} \cdot \left[\nabla (P_c^{12} - P_c^g) + \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \right)^{-1} [\bar{\rho} g \nabla z - (d\mathbf{K})^{-1} \cdot \mathbf{v}] - \Delta \rho_1 g \nabla z \right] \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

En posant $\varpi = \left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p}\right)$, il vient finalement :

$$\mathbf{v}_1 = \frac{\nu_1}{\varpi} \mathbf{v} - \nu_1 d\mathbf{K} \cdot \left[\nabla(P_c^{12} - P_c^g) + \left[\frac{1 - \varpi}{\varpi} \bar{\rho} - \Delta\rho_1 \right] g \nabla z \right]. \quad \square$$

A.2 Formulation Pression Globale en écoulement diphasique

Proposition 10. :

Il existe une fonction P , la pression globale, définie implicitement et une fonction $P_c^g(S_{n\omega}, p)$, telle qu'on puisse déterminer $\omega(S_{n\omega}, p)$ vérifiant :

$$\nabla P_{n\omega} + \nu_\omega(S_{n\omega}, p) \frac{\partial P_c}{\partial S_{n\omega}} \nabla S_{n\omega} = \omega(S_{n\omega}, p) \nabla P \quad (\text{A.5})$$

il en résulte :

$$\left\{ \begin{array}{l} P = P_{n\omega} + P_c^g(S_{n\omega}, p) \quad \forall (S_{n\omega}, p) \in [0, 1] \times [p_\omega, p_{n\omega}] \\ \omega(S_{n\omega}, p) = 1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p}(S_{n\omega}, p) \quad \forall (S_{n\omega}, p) \in [0, 1] \times [p_\omega, p_{n\omega}] \\ P_c^g(S_{n\omega}, p) = - \int_0^{S_{n\omega}} \nu_\omega \frac{\partial P_c}{\partial S_{n\omega}} dS_{n\omega} \quad \forall (S_{n\omega}, p) \in [0, 1] \times [p_\omega, p_{n\omega}] \\ P_c = P_{n\omega} - P_\omega \end{array} \right.$$

Démonstration (d'après [Amaziane et al., 2011a]) :

Soit une fonction $\pi(S_{n\omega}, p), C^1([0, 1] \times [p_\omega, p_{n\omega}])$ telle que $\pi(S_{n\omega}, p) = P_{n\omega} \forall (S_{n\omega}, p)$.

En différenciant cette dernière selon les deux variables primaires saturation non mouillante et pression, indépendantes, on obtient :

$$\nabla \pi = \frac{\partial \pi}{\partial S_{n\omega}} \nabla S_{n\omega} + \frac{\partial \pi}{\partial p} \nabla P = \nabla P_{n\omega} \quad (\text{A.6})$$

$$= -\nu_\omega(S_{n\omega}, p) \frac{\partial P_c}{\partial S_{n\omega}} \nabla S_{n\omega} + \omega(S_{n\omega}, p) \nabla P \quad (\text{A.7})$$

Il en résulte :

$$\begin{cases} \frac{\partial \pi}{\partial S_{n\omega}} = -\nu_\omega(S_{n\omega}, p) \frac{\partial P_c}{\partial S_{n\omega}} \\ \frac{\partial \pi}{\partial p} = \omega(S_{n\omega}, p) \end{cases}$$

Une intégration du premier terme (en prolongeant si besoin au voisinage de 0) permet d'expliciter la fonction π :

$$\pi(S_{n\omega}, p) = - \int_0^{S_{n\omega}} \nu_\omega \frac{\partial P_c}{\partial S_{n\omega}} dS_{n\omega} + C_1 \quad (\text{A.8})$$

$$\pi(0, p) = C_1 = P_{n\omega} \quad (\text{A.9})$$

On par suite :

$$\pi(S_{n\omega}, p) = P_{n\omega} - \int_0^{S_{n\omega}} \nu_\omega \frac{\partial P_c}{\partial S_{n\omega}} dS_{n\omega} \quad (\text{A.10})$$

et on définit :

$$P = P_{n\omega} - \int_0^{S_{n\omega}} \nu_\omega \frac{\partial P_c}{\partial S_{n\omega}} dS_{n\omega} = P_{n\omega} + P_c^g(S_{n\omega}, p) \quad (\text{A.11})$$

et

$$\omega(S_{n\omega}, p) = 1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \quad (\text{A.12})$$

Proposition 11. *On peut également exprimer ces équations à l'aide de la formulation flux fractionnaire en pression globale pour un système diphasique compressible :*

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \frac{\partial S_{n\omega}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}_{n\omega} = 0, \\ \mathbf{v}_{n\omega} = \nu_{n\omega} \mathbf{V} + \nu_\omega \nu_{n\omega} d(\rho_{n\omega} - \rho_\omega) \mathbf{K} \cdot \nabla z - \nu_\omega \nu_{n\omega} d \frac{dP_c}{dS_{n\omega}}(S_{n\omega}) \mathbf{K} \cdot \nabla S_{n\omega} \\ S_\omega + S_{n\omega} = 1 \\ \phi \frac{\partial}{\partial t} (B_{n\omega}(\rho_{n\omega}) S_{n\omega}) + (B_\omega(\rho_\omega) S_{n\omega}) + \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \\ \mathbf{v} = -d\mathbf{K} \cdot [\omega \nabla P - \bar{\rho} g \nabla Z] \\ P = P_{n\omega} + P_c^g \\ P_c^g(S_\omega) = - \int_0^{S_{n\omega}} \nu_\omega \frac{\partial P_c}{\partial S_{n\omega}} dS_{n\omega} \\ P_c = P_{n\omega} - P_\omega \end{array} \right. \quad (\text{A.13})$$

A partir des relations 1.54, 1.55 et sachant que :

$$\mathbf{v}_\omega = \nu_{n\omega} \mathbf{v} + \nu_\omega \mathbf{v}_\omega - \mathbf{v}_\omega \quad (\text{A.14})$$

De même que précédemment, on exprime les vitesses des phases en fonction des gradients de pressions :

$$\mathbf{v}_{n\omega} = \nu_{n\omega} \mathbf{v} + d\mathbf{K} \cdot \left[\nu_\omega \nu_{n\omega} \nabla \underbrace{(P_2 - P_1)}_{=-P_c^{12}} + \nu_\omega \nu_{n\omega} (\rho_{n\omega} - \rho_\omega) g \nabla z \right]$$

$$\mathbf{v}_{n\omega} = \nu_{n\omega} \mathbf{v} + d\mathbf{K} \cdot [\nu_\omega \nu_{n\omega} \nabla P_c^{12} + \nu_\omega \nu_{n\omega} (\rho_{n\omega} - \rho_\omega) g \nabla z] \quad \square$$

B

Discrétisation pour les éléments finis discontinus

Soit $V_h = \{\varphi \in L^\infty(\Omega) \mid \varphi|_E \in \mathbb{P}^1(E)\}$, et le triangle de référence B.1 :

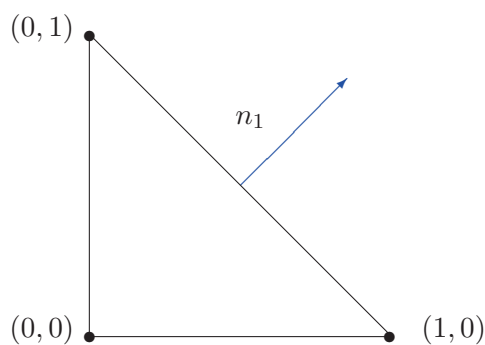


FIGURE B.1 – *Triangle de référence*

Sur chaque élément, les fonctions de base sont exprimées selon les coordonnées barycentriques sur le triangle de référence $((x_1, z_1) = (0,0), (x_2, z_2) = (1,0), (x_3, z_3) = (0,1))$:

- $\varphi_1^E(x, z) = 1 - x - z$
- $\varphi_2^E(x, z) = x$
- $\varphi_3^E(x, z) = z$

tel que :

$$\varphi_i^E(x_j, z_j) = \delta_{ij}$$

On a par suite :

- $\Phi_1^E(x, z) = (x, z - 1)$
- $\Phi_2^E(x, z) = (x - 1, z)$

- $\Phi_3^E(x, z) = (x, z)$

et :

- $\nabla \cdot \varphi_1^E(x, z) = (-1, -1)$

- $\nabla \cdot \varphi_2^E(x, z) = (1, 0)$

- $\nabla \cdot \varphi_3^E(x, z) = (0, 1)$

On définit aussi la normale aux facettes ∂E_j :

- $n_1^E(x, z) = (0, -1)$

- $n_2^E(x, z) = (-1, 0)$

- $n_3^E(x, z) = (1, 1)$

C

Le problème de Mc Whorther Sunada

Le problème de Mc Whorther Sunada est utilisé pour décrire le déplacement unidirectionnel de deux phases, en particulier dans une configuration purement diffusive. Mc Whorther et Sunada ont proposé une solution semi-analytique associée. D'après Mc Whorther et Sunada, il a été prouvé que le ratio $\frac{v_\omega}{v_t}$ ne dépend que de $S_{n\omega}$ seulement si $v_t = At^{-1/2}$, avec A une constante à définir.

L'équation de saturation du fluide mouillant pour un écoulement diphasique non miscible incompressible horizontal s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \frac{\partial S_\omega}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(f_\omega v - D \frac{\partial S_\omega}{\partial x} \right) = 0, \\ D(S_\omega) = -f_\omega f_{n\omega} d \frac{dp_c}{dS_\omega} \\ v = v_\omega + v_{n\omega} \\ S_\omega + S_{n\omega} = 1 \end{array} \right. \quad (C.1)$$

On se place dans la configuration d'une injection de phase mouillante dans un milieu semi-infini initialement saturé en eau. On pose les conditions initiales et aux limites suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} v_0 = v_\omega(0, t) = At^{-\frac{1}{2}} \\ S_\omega(\infty, t) = S_i \\ S_\omega(x, 0) = S_0 \\ f_\omega(S_i) = f_i \\ R = \frac{v}{v_0} \end{array} \right. \quad (C.2)$$

Posons $F(x, t) = \frac{v_\omega/v_0 - f_i R}{1 - f_i R}$

On remarque que

$$F = 1 \Leftrightarrow S_\omega = S_0 \quad (\text{C.3})$$

$$F = 0 \Leftrightarrow S_\omega = S_i \quad (\text{C.4})$$

$$(\text{C.5})$$

D'après l'équation C :

$$\frac{\partial}{\partial x} (v_0(1 - f_i R)F) = \frac{\partial}{\partial x} (v_\omega - f_i v_0 R) = \frac{\partial v_\omega}{\partial x} = -\phi \frac{\partial S_\omega}{\partial t} \quad (\text{C.6})$$

Et en résumé :

$$At^{-1/2}(1 - f_i R) \frac{\partial F}{\partial x} = -\phi \frac{\partial S_\omega}{\partial t} \quad (\text{C.7})$$

On effectue ensuite un changement de variable $\lambda = xt^{-1/2}$:

Sachant que $\frac{dx}{dt} = \frac{1}{2}\lambda t^{-1/2}$, on a :

$$At^{-1/2}(1 - f_i R) \frac{dF}{dS_\omega} = -\frac{\phi}{2}\lambda t^{-1/2} \quad (\text{C.8})$$

$$\frac{2A(1 - f_i R)}{\phi} \frac{dF}{dS_\omega} = -\lambda \quad (\text{C.9})$$

Il résulte de C.5 et C.9 que $F = F(S_\omega)$.

En dérivant la relation C.9, on obtient une expression de la dérivée seconde de F :

$$\frac{2A(1 - f_i R)}{\phi} \frac{d^2 F}{dS_\omega^2} = -\frac{d\lambda}{dS_\omega} \quad (\text{C.10})$$

Une reformulation de en fonction de F nous donne également :

$$\frac{d\lambda}{dS_\omega} = -\frac{1}{A(1 - f_i R)} \frac{D}{F - f_n} \quad (\text{C.11})$$

avec

$$f_n = \frac{(f - f_i R)}{1 - f_i R} \quad (\text{C.12})$$

On obtient un équation :

$$\frac{d^2 F}{dS_\omega^2} = -\frac{\phi}{2A^2(1 - f_i R)^2} \frac{D}{F - f_n} \quad (\text{C.13})$$

En intégrant cette équation à deux reprises, on parvient à déterminer F :

$$F(S_\omega) = \frac{S_\omega - S_i}{S_0 - S_i} + \frac{\phi}{2A^2(1 - f_i R)^2} \left(1 - \frac{S_\omega - S_i}{S_0 - S_i}\right) \int_{S_i}^{S_0} \frac{(S_\omega - S_i)D}{F - f_n} dS_\omega \quad (\text{C.14})$$

(C.15)

$$- \frac{\phi}{2A^2(1 - f_i R)^2} \int_{S_\omega}^{S_0} \frac{(\beta - S_\omega)D}{F - f_n} d\beta \quad (\text{C.16})$$

D'après C.8 et C.11, il vient :

$$A^2 = \frac{\phi}{2(1 - f_i R)^2} \int_{S_i}^{S_0} \frac{(S_\omega - S_i)D}{F - f_n} dS_\omega \quad (\text{C.17})$$

D'où

$$\boxed{F(S_\omega) = 1 - \left(\int_{S_\omega}^{S_0} \frac{(\beta - S_\omega)D}{F - f_n} d\beta \right) \cdot \left(\int_{S_i}^{S_0} \frac{(S_\omega - S_i)D}{F - f_n} dS_\omega \right)} \quad (\text{C.18})$$

Et on détermine finalement F par itération.