

Développement d'un code de calcul multiphasique multiconstituants

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 8 décembre 2009

pour l'obtention du

Doctorat de l'université de Strasbourg

spécialité Mécanique des Fluides

par

Raphaël di CHIARA ROUPERT

Composition du jury

<i>Présidents :</i>	Guy CHAVENT,	<i>Professeur émérite, Université Paris-Dauphine</i>
<i>Rapporteurs :</i>	Brahim AMAZIANE	<i>Maître de Conférences, Université de Pau et des Pays de l'Adour</i>
	Rainer HELMIG	<i>Professeur Université de Stuttgart</i>
	Robert MOSE,	<i>Professeur Ecole Nationale du Génie de l'Eau et de l'Environnement de Strasbourg (ENGEES)</i>
<i>Examineurs :</i>	Jean-Marie CÔME,	<i>Directeur Recherche & Développement Agence BURGEAP de Lyon</i>
	Benoit NOETINGER,	<i>Professeur Institut Français du Pétrole (IFP)</i>
<i>Invités :</i>	Philippe ACKERER,	<i>Directeur de Recherches CNRS, Laboratoire d'Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg (LHyGeS)</i>
	Yves DUCLOS,	<i>Ingénieur ADEME Service Programmation de la Recherche à l'ADEME</i>
<i>Directeurs de Thèse :</i>	Gerhard SCHÄFER,	<i>Professeur des universités, Université de Strasbourg</i>
	Michel QUINTARD,	<i>Directeur de Recherches CNRS, Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT)</i>

Mis en page avec la classe thloria.

Avant Propos

Cette thèse a été réalisée au sein du Laboratoire d'Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg (LHyGeS) sous la direction de M. Gerhard Schäfer, professeur des universités et M. Michel Quintard, Directeur de Recherches CNRS à l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse.

Je leur adresse toute ma reconnaissance pour avoir dirigé ce travail de thèse et avoir su m'éclairer sur les voies de la recherche. Leur disponibilité, leur jugement scientifique, leur enthousiasme et leur nombreuses idées m'ont permis de progresser.

Je tiens à remercier vivement les membres du jury pour leur disponibilité et pour avoir accepté de juger le contenu de ce mémoire de doctorat.

Je remercie également M. Philippe Ackerer, directeur de recherche au CNRS et directeur du Laboratoire d'Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg (LHyGeS) pour m'avoir accueilli aussi chaleureusement dans son équipe.

J'exprime toute ma gratitude à l'égard de M. Jean-Marie Côme, directeur Recherche et Développement à l'agence BURGEAP de Lyon ainsi qu'à M. Yves Duclos, ingénieur à l'ADEME (Service Programmation de la Recherche) pour le co-financement de ce travail de thèse dans le cadre du projet R&D « Code Complet ». Je tiens également à remercier toute l'équipe de l'agence BURGEAP de Strasbourg pour les expériences de terrains partagées ainsi que Mlle Juliette Chastanet, ingénieur à l'agence BURGEAP de Lyon pour son travail dans le cadre d'un post-doctorat (IMFT).

Je tiens à remercier tout particulièrement M. Guy Chavent, professeur émérite à l'université Paris-Dauphine qui m'a fait l'honneur de présider ce jury. Il a été le maître à penser, celui qui a su orienter la thèse dans le bon sens et qui a su remotiver l'étudiant que j'étais dans ses moments de doute. Je le remercie également d'avoir relu attentivement l'ensemble de ce manuscrit. Merci du temps qu'il a consacré à redonner un peu de rigueur à ma plume qui a tendance quelques fois à dérapier.

J'adresse ma reconnaissance aux enseignants de l'IUT Louis Pasteur et notamment ceux du département mesures physiques, pour la compréhension dont ils ont fait preuve et le soutien qu'ils m'ont apporté ainsi qu'à MM. Olivier Razakarisoa, Pascal Friedmann Lotfi Dridi et Mme Francine Cerni, Mme Muriel Eichornn, Mme Ingrid Pollet et Mlle Martine Bohy pour leur disponibilité et leur conseils.

Enfin, une pensée émue pour toutes les personnes et les doctorants avec qui j'ai partagé une salle, un café, un repas, une console d'ordinateur, un coin de tableau à parler schémas numériques pendant ces trois années notamment MM. Philippe Ackerer, Anis Younes, François Lehmann, Jérôme Carrayrou, Benjamin Belfort ainsi que Mme Stéphanie et M. Fabrice Lawniczak et plus largement toute l'équipe du LHyGeS et ceux qui m'ont entourés durant cette thèse.

*Je dédie cette thèse
à ma femme Valérie pour m'avoir soutenue et supporté
et à mon fils Alexandre.*

Table des matières

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

Chapitre 1

Modèle d'écoulement multiphasique en milieu poreux

1.1	Espace poral	5
1.1.1	Définition du milieu poreux	5
1.1.2	Définition d'une phase	6
1.1.3	Approche continue du milieu poreux	6
1.2	Écoulement diphasique	8
1.2.1	Notion de saturation	8
1.2.2	Conservation de la masse	9
1.2.3	Loi de Darcy généralisée	9
1.2.4	Notion de capillarité	10
1.2.5	Pression capillaire	11
1.2.6	Phénomène d'hystérisis	12
1.2.7	Perméabilité relative	13
1.3	Comportement d'un fluide à l'interface de deux matériaux	14
1.4	Différentes formulations pour les écoulements diphasiques	15
1.4.1	Formulation <i>pression-pression</i>	16
1.4.2	Formulation <i>pression-saturation</i>	16
1.5	Conclusion	22

Chapitre 2

Formulation approchée de la pression globale en système triphasique

2.1	Equations liées à la physique et conventions	25
2.2	Notion de « différentielle totale »	27
2.3	Construction des données triphasiques satisfaisant la condition de « différentielle totale »	29
2.4	Discrétisation du domaine triphasique et paramètres d'entrée	29

2.4.1	Discrétisation du domaine triphasique	29
2.5	Méthode de résolution par optimisation	30
2.5.1	Le problème pénalisé	31
2.5.2	La méthode BFGS	32
2.6	Initialisation de l'algorithme d'interpolation	34
2.7	Résolution des flux fractionnaires respectant la condition de différentielle totale (DT)	35
2.8	Résolution du champ de perméabilité triphasique construit sur la condition de différentielle totale (DT)	36
2.9	Conclusion	42

Chapitre 3

Nouvelle formulation exacte de la pression globale en système triphasique

3.1	Flow model	48
3.1.1	Conservation laws	48
3.1.2	Muskat law	49
3.1.3	Capillary pressure equation	49
3.1.4	Pressure equation	50
3.1.5	Definition of global pressure field and global capillary pressure function	50
3.2	Existence of a global pressure formulation	51
3.2.1	Satisfying (3.11) : Total differential condition	51
3.2.2	Satisfying the stability condition given by (3.14)	52
3.2.3	Remark on a single compressible phase case (gas)	53
3.3	<i>TD</i> –Interpolation of two-phase data over \mathbb{T}	53
3.3.1	A Total Differential Compatible (TDC) interpolation algorithm for two-phase data	54
3.3.2	Two-phase data settings	55
3.4	Determination of $P_c^g(s, p)$ on $\partial\mathbb{T}$ (<i>step 1</i>)	56
3.4.1	Determination of β^{12} along the <i>water-oil</i> side $\partial\mathbb{T}_{12}$	56
3.4.2	Determination of β^{32} along the <i>gas-oil</i> side $\partial\mathbb{T}_{23}$	56
3.4.3	Determination of β^{13} along the <i>water-gas</i> side $\partial\mathbb{T}_{13}$	57
3.4.4	Computing $\beta = P_c^g$ on $\partial\mathbb{T}$ with a predictor-corrector scheme $P(EC)_\mu^m E$	57
3.5	Satisfying the <i>Total Differential Compatibility</i> condition (<i>step 2</i>)	58
3.6	Determination of $d(s, p)$ on $\partial\mathbb{T}$ and \mathbb{T} (<i>step 3 and 4</i>)	59
3.6.1	Dirichlet boundary condition on $d(s, p)$ over $\partial\mathbb{T}$ (<i>step 3</i>)	59
3.6.2	C^0 finite element for Laplace problem on $d(s, p)$ over \mathbb{T} (<i>step 4</i>)	59
3.7	Determination of $P_c^g(s, p)$ on \mathbb{T} (<i>step 5</i>)	60

3.7.1	Boundary condition over $\partial\mathbb{T}$	61
3.7.2	Solving the biharmonic problem for $P_c^g(s, p)$ using C^1 finite elements . . .	61
3.8	Determination of kr_1, kr_2, kr_3 and $\partial P_c^g/\partial p$ on \mathbb{T} (<i>step 6</i>)	64
3.9	Conclusion	66

Bibliographie 67

Chapitre 4

Formulation du modèle d'écoulement - pression globale revisitée

4.1	Equation en pression globale	70
4.2	Equations en saturation	71
4.3	Préliminaires à la méthode des éléments finis mixtes	72
4.4	Application des éléments finis mixtes dans la résolution de l'équation de pression globale	73
4.4.1	Discretisation du flux total	73
4.4.2	Discretisation de l'équation de pression globale	74
4.4.3	Hybridisation et construction du système algébrique en traces de pression globale	75
4.5	Approche découplée pour la résolution de l'équation de saturation	76
4.5.1	Application des éléments finis mixtes à la résolution du terme diffusif : formulation variationnelle	76
4.5.2	Application des éléments finis discontinus à la résolution du terme convectif	81
4.6	Résolution des systèmes d'équations couplées	84
4.6.1	Schéma IMPES et interpolation	84
4.6.2	Résolution de l'équation de saturation complète	84
4.6.3	Traitements des non linéarités et gestion du pas de temps	85
4.7	Cas tests d'écoulement	85
4.7.1	Écoulement unidirectionnel 1D de Buckley-Leverett	86
4.7.2	Écoulement bidirectionnel 1D de McWhorter-Sunada	87
4.7.3	Écoulement radial bidimensionnel de Buckley-Leverett (Five-Spot)	89
4.7.4	Cas test 2D d'écoulement triphasique en milieu poreux homogène inspiré du cas A1 du benchmark MACAOH	92
4.8	Conclusions	94

Chapitre 5

Modules et formalismes d'un modèle de transport multiconstituant

5.1	Flux diffusif en phase gazeuse	97
-----	--	----

5.1.1	Mélange à N constituants	97
5.1.2	Expression du coefficient de diffusion	98
5.1.3	Influence de l'effet multiconstituant	99
5.2	Dissolution du NAPL en zone saturée	100
5.2.1	Conservation de la masse pour un mélange multiconstituant	100
5.2.2	Corrélation du coefficient de transfert de masse et paramètres associés au transport	101
5.2.3	Coefficients de transfert de masse	103
5.3	Discrétisation des équations de transport	105

Conclusion générale	107
----------------------------	------------

Bibliographie	111
----------------------	------------

Annexe A

Algorithme d'interpolation des données triphasiques par optimisation

A.1	<u>Etape 1-</u> Initialisation	119
A.2	<u>Etape 2-</u> Choix du flux fractionnaire en huile f_2	120
A.3	<u>Etape 3-</u> Détermination de la fonction ϕ et des flux fractionnaires f_1, f_3 satisfaisant la condition de différentielle totale.	121
A.4	<u>Etape 4-</u> Détermination du système gaz/eau par optimisation	123
A.5	<u>Etape 5-</u> Détermination de la mobilité totale d	127

Annexe B

Predictor-corrector scheme $P(EC)_\mu^m E$ for solving P_c^g on $\partial\mathbb{T}$

Annexe C

C^1 Hsieh-Clough-Tocher finite element for biharmonic problem

Annexe D

Solutions exactes en milieu poreux homogène

D.1	Introduction	151
D.1.1	Objectifs	151
D.1.2	Application aux problèmes de transport en milieu poreux	151
D.1.3	Tests numériques	152
D.2	Solution analytique de Buckley-Leverett	152
D.2.1	Méthode des caractéristiques	152
D.2.2	Solutions analytiques	154

D.2.3	Application au déplacement eau-solvant chlorés avec prise en compte de la gravité	155
D.2.4	Implémentation de la méthode	155
D.3	Solution de McWhorther-Sunada	158
D.4	Formulation du problème	158

Table des figures

1.1	<i>Milieu poreux rempli par de l'eau et de l'huile (système diphasique)</i>	5
1.2	<i>Différentes échelles au sein d'un même milieu poreux. Illustration d'une contamination où la source (DNAPL) s'infiltré dans un aquifère (réservoir souterrain saturé en eau)</i>	6
1.3	<i>Evolution de la porosité ϕ en fonction du diamètre moyen r [Helmig 1997]</i>	7
1.4	<i>Détails de l'interface entre deux phases. L'angle de contact α caractérise le ménisque à l'interface fluide-fluide (figure de droite) et définit la phase mouillante (eau) et non-mouillante (NAPL)</i>	10
1.5	<i>Tension de surface et angle de contact à l'équilibre</i>	11
1.6	<i>Courbes capillaires typiques issues du modèle de Brooks-Corey (gauche) et de Van Genuchten (droite) pour un cycle complet (drainage/imbibition). Les paramètres correspondent à un sable # 30 [Turner 2004]. Drainage : $\lambda = 2.89$, $P_d = 873 Pa$, $n = 5.5$, $j = 0.00077 Pa^{-1}$. Imbibition : $\lambda = 2.29$, $P_d = 667 Pa$, $n = 4$, $j = 0.0011 Pa^{-1}$</i>	13
1.7	<i>Perméabilités relatives associées au drainage et à l'imbibition. Les paramètres correspondent à un sable # 30 [Turner 2004]. Drainage : $\lambda = 2.89$, $P_d = 873 Pa$, $n = 5.5$, $\alpha = 0.00077 Pa^{-1}$. Imbibition : $\lambda = 2.29$, $P_d = 667 Pa$, $n = 4$, $\alpha = 0.0011 Pa^{-1}$</i>	14
1.8	<i>Interface entre deux milieux poreux homogènes</i>	15
1.9	<i>Courbes de pressions capillaires pour un milieu poreux comportant une discontinuité</i>	16
2.1	<i>Diagramme ternaire discrétisé</i>	31
2.2	<i>Nombre d'itération (gauche) et $\sqrt{F_{obj}}$ (droite) obtenus à l'issue de l'étape d'optimisation sur le sable H2F, maillage $\Delta S = 0.05$.</i>	33
2.3	<i>Nombre d'itération (gauche) et $\sqrt{F_{obj}}$ (droite) obtenus à l'issue de l'étape d'optimisation sur le sable H1F, maillage $\Delta S = 0.05$.</i>	33
2.4	<i>Pressions capillaires huile/gaz et eau/huile d'entrée, sable H2F, maillage $\Delta S = 0.1$</i>	34
2.5	<i>Pressions capillaires huile/gaz et eau/huile d'entrée, sable H1F, maillage $\Delta S = 0.1$</i>	34
2.6	<i>Perméabilités relatives huile/gaz et eau/gaz d'entrée, sable H2F, $\Delta S = 0.1$</i>	35
2.7	<i>Perméabilités relatives huile/gaz et eau/gaz d'entrée, sable H1F, $\Delta S = 0.1$</i>	35
2.8	<i>Pression capillaire globale P_c^g [Pa] obtenue pour les sable H1F (droite) et H2F (gauche), maillage $\Delta S = 0.05$.</i>	36
2.9	<i>Flux fractionnaires DT pour le sable H2F, eau (noté (w) en haut), huile (noté (o) en milieu) et gaz (noté (g) en bas) satisfaisant la condition de « différentielle totale » (à gauche) et ceux obtenu par le modèle de Stone à partir des perméabilités relatives triphasiques (à droite), maillage $\Delta S = 0.05$.</i>	37

2.10	<i>Flux fractionnaires DT pour le sable H1F, eau (noté (w) en haut), huile (noté (o) en milieu) et gaz (noté (g) en bas) satisfaisant la condition de « différentielle totale » (à gauche) et ceux obtenus par le modèle de Stone à partir des perméabilités relatives triphasiques (à droite), maillage $\Delta S = 0.05$.</i>	38
2.11	<i>Estimation des perméabilités DT sur l'arête gaz/eau, solutions pour le sable H1F (figures en haut) et le sable H2F (figures en bas), maillage $\Delta S = 0.05$.</i>	40
2.12	<i>Perméabilités relatives triphasiques pour le sable H2F, eau (haut), huile (milieu) et gaz (bas) satisfaisant la condition de « différentielle totale » (à gauche) et celles obtenues par le modèle de Stone (à droite), maillage $\Delta S = 0.05$.</i>	43
2.13	<i>Perméabilités relatives triphasiques pour le sable H1F, eau (haut), huile (milieu) et gaz (bas) satisfaisant la condition de « différentielle totale » (à gauche) et celles obtenues par le modèle de Stone (à droite), maillage $\Delta S = 0.05$.</i>	44
3.1	<i>Illustration of the ternary diagram \mathbb{T} and different curves \mathcal{C} along which $P_c^g(s, p)$ is computed</i>	51
3.2	<i>Initial relative two-phase permeabilities given on $\partial\mathbb{T}_{12}$, $\partial\mathbb{T}_{13}$ and $\partial\mathbb{T}_{23}$ for cases 1 and 2</i>	55
3.3	<i>Capillary pressure P_c^{32} [Pa] (top) and P_c^{12} [Pa] (bottom) given on \mathbb{T} for cases 1 and 2</i>	55
3.4	<i>Numerical results for β^{ij} [Pa] over $\partial\mathbb{T}$ using $P(EC)_{10}^2 E$, case 1</i>	58
3.5	<i>Global mobility solution d of the Laplace problem, case 1</i>	60
3.6	<i>Global mobility solution d of the Laplace problem, case 2</i>	60
3.7	<i>Numerical results for β^{ij} [Pa] over $\partial\mathbb{T}$ using $P(EC)_{10}^2 E$ from step 1, global capillary pressure $p - p_2 = P_c^g(s, p)$ and $(\partial P_c^g / \partial s_1; \partial P_c^g / \partial s_3)$ (blue arrows) computed from step 5, case 2</i>	62
3.8	<i>Relation of global pressure to water pressure : $p - p_1 = P_c^g(s, p) - P_c^{12}(s_1)$, case 2</i>	62
3.9	<i>Relation of global pressure to gas pressure : $p - p_3 = P_c^g(s, p) - P_c^{32}(s_3)$, case 2</i>	62
3.10	<i>Water fractional flow $\nu_1(s, p)$ for case 1 (dashed line) and case 2 (solid line) on \mathbb{T}</i>	63
3.11	<i>Oil fractional flow $\nu_2(s, p)$ for case 1 (dashed line) and case 2 (solid line) on \mathbb{T}</i>	63
3.12	<i>Gas fractional flow $\nu_3(s, p)$ for case 1 (dashed line) and case 2 (solid line) on \mathbb{T}</i>	64
3.13	<i>Relative permeability of water $kr_1(s, p)$ for case 1 (dashed line) and case 2 (solid line) on \mathbb{T}</i>	65
3.14	<i>Relative permeability of oil $kr_2(s, p)$ for case 1 (dashed line) and case 2 (solid line) on \mathbb{T}</i>	65
3.15	<i>Relative permeability of gas $kr_3(s, p)$ for case 1 (dashed line) and case 2 (solid line) on \mathbb{T}</i>	65
3.16	<i>Compressibility factor $\partial P_c^g / \partial p$ for case 2</i>	65
4.1	<i>Géométrie du domaine proposé pour modéliser l'écoulement unidirectionnel de Buckley-Leverett</i>	86
4.2	<i>Champ de saturation en eau obtenu au bout de 10 000 secondes</i>	86
4.3	<i>Résultats numériques obtenus avec l'approche en pression globale au bout de 10000 secondes suivant la section $y = 0.5$</i>	87
4.4	<i>Géométrie du domaine proposé pour modéliser l'écoulement bidirectionnel de McWhorter et Sunada</i>	88
4.5	<i>Solutions numériques du front de saturation en eau (droite) et du flux diffusif (gauche) comparées avec la solution pseudo analytique de McWhorter-Sunada au bout de 250, 500 et 1000 secondes</i>	88

4.6	<i>Five Spot - Cas diagonal</i>	89
4.7	<i>Five Spot - Cas parallèle</i>	89
4.8	<i>Résultats numériques obtenus avec l'approche en pression globale au bout de 200 jours et pour différentes configurations de maillage : (a) maillage 16×16 en diagonal, (b) maillage 16×16 en croix</i>	90
4.9	<i>Résultats numériques (cas diagonal) obtenus avec l'approche en pression globale au bout de 200 jours et pour différentes configurations de maillage : (c) maillage 16×16 antidiagonal, (d) maillage 32×32 antidiagonal</i>	91
4.10	<i>Problème du Five-spot (cas diagonal) - Section suivant $y = x$ du profil de saturation en eau comparé avec les solutions numériques obtenues par [Helmig 1997] au bout de 200 jours (figure gauche), solution numérique du cas parallèle au bout de 200 jours (figure de droite)</i>	91
4.11	<i>Schéma du domaine de simulation et conditions aux limites du cas test</i>	92
4.12	<i>Solutions numériques obtenues par deux modèles numériques (SIMUSCOPP et MPTRACES) lors du drainage, évolution du profil de saturation en eau au cours du temps suivant l'axe central à $x = 12.5m$ (figure de gauche) et champ de saturation et de pression globale au bout de 3 heures (figure de droite)</i>	94
5.1	<i>Evolution du flux sortant en TCE et PCE normalisé (en $x = 1$) en fonction du temps, extrait de [Chastanet 2007]</i>	100
5.2	<i>Corrélation pour le coefficient de diffusion en fonction de la saturation en NAPL ($\phi = 0.65$, $Pe = 0$), extrait de [Chastanet 2007].</i>	102
5.3	<i>Corrélation pour le coefficient de transfert de masse en fonction du nombre de Reynolds ($\varepsilon_\beta = 0.373$, $d_{50} = 1$ cm, $U_i = 1$, $\phi = 0.65$, $x/d_{50} = 7$, $Sc = 1000$), extrait de [Chastanet 2007]</i>	105
A.1	<i>Dérivées directionnelles appliquées au barycentre du triangle T avec le sommet en eau (w), en gaz (g) et en huile (o)</i>	130
C.1	<i>Hsieh-Clough-Tocher shape function ψ over an elementary triangle for each dof</i> .	142
C.2	<i>Shape function ψ_1^x over an elementary triangle T (dark blue lines show $T_{i,1 \leq i \leq 3}$)</i>	143
C.3	<i>Illustration of the full-HCT triangular finite element</i>	143
C.4	<i>Energy error ϵ for test case (1,1) between full-HCT (-o-) and reduced-HCT (-∇-) for numerical solution u_h and its derivative according to x and y resp. u_h^x, u_h^y</i> . .	147
C.5	<i>Test case for $a = 1, b = 1$ with full-HCT approach (left,-o), reduced-HCT approach (right,-o) and analytical solution (-)</i>	148
C.6	<i>Test case for $a = \pi, b = \pi$ with full-HCT approach (left,-o), reduced-HCT approach (right,-o) and analytical solution (-)</i>	148
C.7	<i>Trigonometric test case for $a = 2\pi, b = 2\pi$ with full-HCT approach (left,-o), reduced-HCT approach (right,-o) and analytical solution (-)</i>	149
D.1	<i>Flux fractionnaire f (point d'infexion) avec la saturation en huile au front $S_{nw,f}$ (tangente de Welge)</i>	154
D.2	<i>Dérivée du flux fractionnaire f' en fonction de la saturation effective en huile</i> . .	154
D.3	<i>Fonction objectif F pour la saturation effective en NAPL S_{nw}</i>	156
D.4	<i>Saturation en huile et vitesse du front se deplacant au cours du temps obtenu pour $n = 2$.</i>	157
D.5	<i>Fonction objectif et temps CPU en fonction du nombre d'itération pour trois valeur de n</i>	157

D.6	<i>Saturation en huile et vitesse du front se déplaçant au cours du temps obtenu pour $n = 2$.</i>	161
D.7	<i>Fonction objectif et temps CPU en fonction du nombre d'itération pour trois valeurs de n.</i>	161

Introduction générale

Le nombre de cas de contamination des eaux souterraines par des produits pétroliers (et dérivés) n'a cessé de croître durant ces dernières années. Ces contaminations sont essentiellement dues à des déversements accidentels ou à des fuites issues de lieux de stockage. Les composés organo-chlorés, comme le trichloréthylène (TCE) et le perchloréthylène (PCE) sont fortement toxiques et faiblement solubles dans l'eau. Ils peuvent contaminer un aquifère sur plusieurs dizaines d'année.

Ce travail de recherche bénéficiant d'une bourse de thèse cofinancé ADEME/BURGÉAP se place donc dans un contexte d'évaluation du devenir de ces composés organochlorés aliphatiques (COCA) dans le milieu souterrain. Il s'inscrit dans le cadre du projet R&D « code complet » co-financé par l'ADEME et dont les partenaires sont BURGEAP, le LHyGeS et l'IMFT. Ce projet a été initié à la suite du projet R&D MACAOH (Modélisation Atténuation, Caractérisation dans les Aquifères des Organo-halogénés).

Les situations classiquement rencontrées sur les sites pollués mettent en jeu une « zone source » (corps d'imprégnation en phase organique à saturation résiduelle) dont la modélisation nécessite de prendre en compte de façon concomitante, les écoulements triphasiques, les transferts de masse entre phases (volatilisation, dissolution, sorption), des mécanismes de dégradation (biodegradation de la phase dissoute) et des interactions nappes-rivières. Il n'existe pas à ce jour de code complet permettant de tenir compte de l'ensemble de ces mécanismes. Dans le domaine de la modélisation des hydrosystèmes souterrains, la simulation d'écoulements multiphasiques devient complexe (hétérogénéités, couplage avec des hydrosystèmes de surface). La difficulté majeure vient essentiellement de la nature non linéaire des équations qui régissent le système et du manque de données concernant les relations constitutives. Ce travail de thèse a eu pour vocation de fournir un outil de calcul performant (temps de calcul, structure modulaire) permettant de simuler dans un premier temps les équations d'écoulement compressible multiphasique. Une étape ultérieure consistera à traiter les équations de transport multiconstituants en y associant les nouveaux formalismes physiques présentés plus haut.

Dans ce contexte de recherche, le mémoire de thèse présente la mise en place d'algorithmes numériques performants pour résoudre les équations décrivant les écoulements multiphasique dans le milieu poreux. Des outils numériques sont également décrits et utilisés afin de générer l'ensemble des variables secondaires indispensables à une résolution performante de l'écoulement. Ce mémoire propose, après une revue bibliographique sur les formalismes existants, une description des schémas utilisés dans l'acquisition des variables d'écoulement. Des expériences numériques sont ensuite menées sur des cas diphasiques monodimensionnel et bidimensionnel avec effet de compressibilité, de capillarité et de gravité. Dans les cas mono dimensionnels, les résultats numériques sont comparés avec des solutions analytiques et semi-analytiques également

décrites dans le mémoire. Enfin une dernière partie est consacrée aux équations de transport avec une description des formalismes retenus et plus particulièrement sur les phénomènes de dissolution. Le mémoire de thèse se décline en cinq chapitres qui renvoient vers les annexes concernant les détails des développements numériques proposés.

La première partie est un chapitre bibliographique dont l'objectif est de présenter les modèles d'écoulements multiphasiques existants. Une reformulation de l'écoulement, par rapport aux approches classiques, est ensuite proposée en pression globale / saturation (eau et gaz) [Chavent and Jaffré 1986]. Cette approche requiert une étape préalable de pré traitement des données initiales. Pour l'acquisition de ces données, les valeurs expérimentales sont uniquement connues en système diphasique et très rarement en système triphasique. Un certain nombre d'interpolation sont donc utilisées pour pallier ce manque d'information [?]. Leur existence montre qu'aucune interpolation ne reflète la réalité. Une nouvelle classe d'interpolation de ces données triphasiques tenant compte des propriétés des fluides (viscosités, compressibilité, tensions interfaciales) est proposée tout en respectant la condition de différentielle totale (DT) dans l'écoulement. L'acquisition de ces données permet de résoudre plus rapidement les écoulements multiphasiques compressibles. Cette nouvelle formulation est équivalente à la formulation originale [Chavent 2009] (incompressible) et a été élargie aux écoulements compressibles diphasiques [Amaziane and Jurak 2008] puis triphasiques [Chavent 2009]. Une première version de l'algorithme d'interpolation de ces données est donnée dans le chapitre 2 du mémoire de thèse [Chavent and Salzano 1985] mais sa complexité a cependant limité son utilisation dans des codes numériques.

Le deuxième chapitre est consacré à l'implémentation de l'approche globale développée dans le chapitre 1. Une première approche d'acquisition des variables secondaires par optimisation, basée sur l'algorithme de Chavent-Salzano [Chavent and Jaffré 1986; Chavent and Salzano 1985] est donnée. Le système physique recherché détermine un domaine triphasique dans lequel nous exprimons trois nouvelles fonctions à savoir : les perméabilités relatives triphasiques, les fonctions fractionnelles triphasiques et la mobilité totale des trois phases. La difficulté réside dans la détermination des perméabilités relatives à l'intérieur du domaine triphasique. Plusieurs méthodes existent et se basent sur des considérations physiques [?]. Les résultats obtenus pour deux sables différents sont analysés et comparés avec l'approche de Stone.

Le troisième chapitre décrit l'approche globale revisitée [Chavent *et al.* 2008; Chavent 2009] ainsi que son implémentation. Un nouvel algorithme d'interpolation des variables triphasiques par éléments finis C^0 et C^1 est donné. Une première étape consiste à calculer la pression capillaire sur les frontières du diagramme à partir de trois équations différentielles ordinaires non linéaires. La résolution est assurée par un schéma multi-pas prédicteur-correcteur d'Adams [Quarteroni *et al.* 2007] avec une procédure de linéarisation (méthode de Picard) sur la correction. La condition de différentielle totale est alors introduite et consiste, au terme de la résolution des trois équations différentielles ordinaires, à fermer le diagramme ternaire en imposant que la valeur de pression capillaire au sommet en gaz soit identique (condition de compatibilité). L'approche qui est adoptée, pour la résolution de la mobilité globale et celle de la pression capillaire globale, utilise respectivement des éléments finis standard C^0 et des éléments finis composites spectraux C^1 [Bernadou and Hassan 1980; Bernadou *et al.* 1980]. Les perméabilités triphasiques découlent des solutions obtenues par ces deux méthodes. Les données requises en entrée de modèle sont le niveau de pression globale, les perméabilités diphasiques, les propriétés physico-chimiques des fluides (viscosités dynamiques, masses volumiques) et les pressions capillaires diphasiques.

En sortie, l'algorithme développé donne les variables secondaires *DT-compatibles*, i.e. les perméabilités triphasiques, la mobilité globale, les flux fractionnaires et le facteur de compressibilité associé.

Le chapitre 4 présente les schémas numériques retenus et la discrétisation des équations d'écoulement triphasique basées sur l'approche globale revisitée. La formulation en écoulement fractionnel adoptée dans le chapitre 1 permet d'identifier si l'écoulement est dominé par les forces de convection ou de capillarité. Cette formulation donne lieu à deux équations de natures différentes. La méthode des éléments finis mixtes hybrides (EFMH) classiquement appliquée aux équations parabolique/elliptique est proposée pour l'équation en pression globale. Une méthodologie similaire est choisie pour la partie *diffusive* de l'équation de saturation. Une formulation par éléments finis discontinus (EFD) est proposée pour l'équation hyperbolique obtenue par « operator splitting » sur les équations de saturation en eau et en gaz. Nous traitons également du problème de l'évaluation des variables secondaires non-linéaires issues de l'interpolation précédente (cf. chapitre 3) ainsi que du traitement du terme gravitaire. Des premiers tests d'écoulement sont comparés aux solutions semi-analytique de McWhorther-Sunada [McWhorther and Sunada 1990] et analytique de Buckley-Leverett [Buckley and Leverett 1942] permettent d'envisager une bonne résolution du nouvel écoulement proposé. Des études numériques sont également menées et comparées sur des cas bidimensionnels diphasiques avec effet de gravité.

Le cinquième chapitre traite de façon succincte des perspectives de couplage entre le modèle d'écoulement multiphasique développé et le modèle de transport multiconstituants associant un module de cinétique de dissolution de la phase organique. Différentes corrélations du coefficient de transfert de masse sont analysées et comparées. Dans le cadre du couplage écoulement/transport, une formulation analogue à l'écoulement par « operator splitting » est proposée en utilisant les outils numériques utilisés pour l'écoulement (EFMH,EFD).

En conclusion, des travaux futurs se focaliseront sur la mise en place des nouveaux modules décrits en introduction et sur leur validation par rapport à des solutions numériques existantes [Chastanet 2007]. Des travaux ultérieurs pourront également être menés afin de « guider » l'interpolation vers des modèles de perméabilité connus ou des valeurs expérimentales ponctuelles par optimisation tout en respectant la condition de « Différentielle Totale ».

Modèle d'écoulement multiphasique en milieu poreux

Ce chapitre sert d'introduction à la modélisation mathématique des écoulements multiphasiques en milieu poreux. Nous discutons brièvement comment la nature complexe des écoulements multiphasiques en milieu poreux est décrite ainsi que son domaine de validité et les formalismes existants introduisant leur modélisation numérique.

1.1 Espace poral

1.1.1 Définition du milieu poreux

Le milieu poreux est composé d'une matrice solide (ou phase solide) et d'un volume poral. Une représentation bidimensionnelle (section du milieu poreux) peut être donnée avec deux phases liquides : eau et huile occupant l'espace poral. Dans la perspective de développer un modèle mathématique permettant de décrire la dynamique des fluides dans cet espace, certaines hypothèses doivent être formulées concernant la géométrie et les dimensions du milieu poreux [[Bastian 1999](#)] :

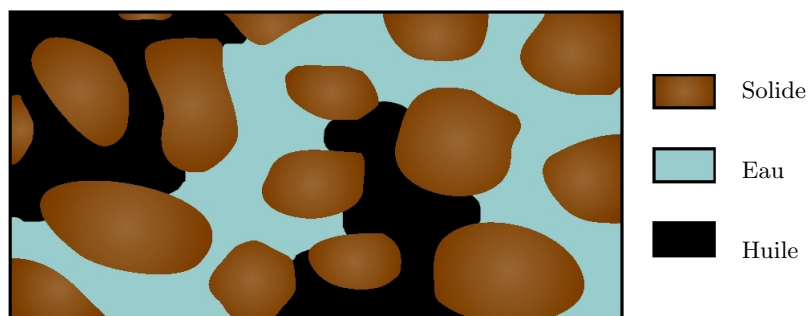


FIG. 1.1 – *Milieu poreux rempli par de l'eau et de l'huile (système diphasique)*

1. Le volume poral est interconnecté (milieu continu)
2. Les dimensions du volume des vides doivent être suffisamment grandes comparées aux dimensions des molécules de fluide. La structure solide peut être donc, hypothétiquement considéré comme continue.

3. Les dimensions du volume poral doivent être suffisamment petite pour que l'écoulement des fluides soit gouverné par des forces « adhésives » (interface fluide-solide) et des forces « cohésives » (interface fluide-fluide) dans le système multiphasique. Cela exclu les cas de type réseaux de canaux (pipes networks) dans la description du milieu poreux.

Il existe différents types de milieu poreux comme le sol, les sables avec différentes tailles de grain, les roches fracturées, les grès, les massifs karstiques. D'autres milieux poreux plus exotiques existent comme les céramiques, les gommés, le pain, les os ou bien les tissus organiques [Bear 1972].

1.1.2 Définition d'une phase

Une phase est définie comme une portion de composition chimique homogène et séparé des autres phases par des conditions physiques (conditions aux limites) [Bastian 1999]. La modélisation des équations d'écoulement entre deux phases ou plus nécessite certaines caractéristiques intrinsèques à chaque phase comme la viscosité dynamique μ [$Pa.s$] et la masse volumique ρ [$kg.m^3$]. L'écoulement de l'air (ou mélange gazeux), d'eau ou de NAPL est majoritairement étudié dans les applications environnementales qui nous intéressent. Le NAPL est l'acronyme de Non-Aqueous Phase Liquid. Ces liquides regroupent les NAPL lourds ou denses (DNAPL) qui possèdent donc une densité (ou masse volumique) supérieure à celle de l'eau et les NAPL légers (LNAPL) dont la densité est plus faible que celle de l'eau. Les problèmes majoritairement rencontrés en milieu poreux sont les contaminations des hydrosystèmes souterrains où le NAPL est le plus souvent un dérivé de produit pétrolier ou de Composés Organo-Chlorés Aliphatiques (COCA). Ces derniers possèdent une volatilité chimique importante et une solubilité très faible dans l'eau. Ces deux types de NAPL satisfont tous deux à la définition de phase.

1.1.3 Approche continue du milieu poreux

La section précédente a mis en évidence l'importance de considérer les différentes échelles dans la modélisation des écoulements en milieu poreux. La figure suivante (cf. Fig. 1.2) montre les différentes échelles d'étude, de l'échelle macroscopique (figure de gauche) à l'échelle moléculaire (figure de droite). Chaque problème traitant de la dynamique des fluides au sein d'un milieu

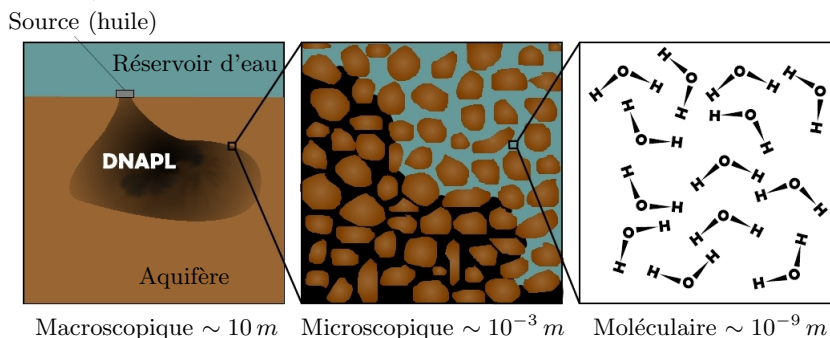


FIG. 1.2 – Différentes échelles au sein d'un même milieu poreux. Illustration d'une contamination où la source (DNAPL) s'infiltré dans un aquifère (réservoir souterrain saturé en eau)

poreux doit être muni d'un jeu de conditions aux limites et de conditions initiales. Les conditions aux limites qui définissent un problème à l'échelle macroscopique ne conviennent évidemment pas dans la description d'un phénomène à l'échelle moléculaire. Cette observation vient de la

distribution géométrique aléatoire du milieu poreux. Afin de construire un modèle mathématiques, une description continue du milieu poreux doit être donnée à l'échelle macroscopique. Chaque quantité prise à l'échelle macroscopique doit être la moyenne des quantités prise dans un volume élémentaire (échelle microscopique). Ce processus de prise de moyenne conduit à des équations macroscopiques qui sont indépendantes de la description exacte de la configuration microscopique (seules les propriétés statistiques du milieu poreux et des phases sont considérées).

Notion de porosité

Dans cette section, le paramètre macroscopique appelé porosité ϕ est obtenu par une prise de moyenne au sein d'un volume de référence. L'évolution de la porosité peut être représentée à différentes échelles (cf. Fig. 1.3) : Soit Ω un domaine occupé par un milieu poreux et $mes\Omega$ son

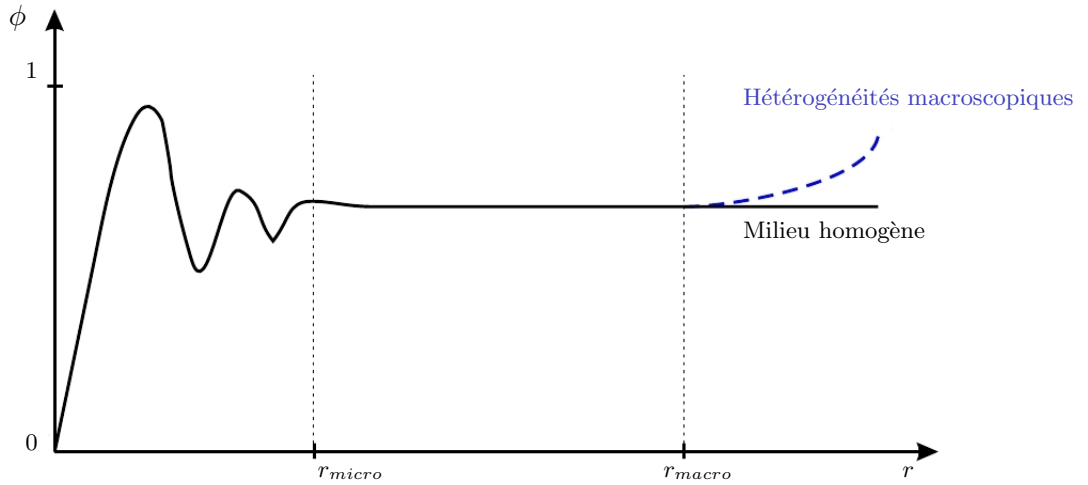


FIG. 1.3 – Evolution de la porosité ϕ en fonction du diamètre moyen r [Helmig 1997]

volume. Un indicateur d'espace occupé par le vide peut être décrit à l'échelle microscopique tel que

$$\gamma(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} \in \text{espace des vides} \\ 0 & \mathbf{x} \in \text{matrice solide} \end{cases} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (1.1)$$

Supposons que $\mathcal{S}(x_0, r) \subset \Omega$ est une sphère centrée en x_0 avec un rayon r . La porosité $\phi(x_0)$ prise au point x_0 et tenant compte du volume $\mathcal{S}(x_0, r)$ est définie par :

$$\phi(x_0) = \frac{1}{mes(\mathcal{S}(x_0, r))} \int_{\mathcal{S}(x_0, r)} \gamma(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (1.2)$$

La quantité macroscopique appelée porosité est donc obtenue par la prise de moyenne à l'échelle microscopique de la fonction γ (espace des vides). Le *Volume Élémentaire de Référence* doit être pris tel que la valeur moyenne de la quantité considérée soit indépendante de la taille du volume d'intégration. La variation de la porosité peut être tracée en fonction de l'évolution du rayon

de \mathcal{S} (cf. Fig. 1.3). Pour des valeurs de r petites, on observe des oscillations importantes de la porosité. Entre r_{micro} et r_{macro} , la valeur de $\phi(x_0)$ reste presque constante (valeur moyenne). Pour les grandes valeurs de r (supérieures à r_{macro}), la porosité a un comportement monotone i.e. constant dans un milieu homogène et croissant dans un milieu hétérogène. Le volume moyen décrit entre r_{micro} et r_{macro} est appelé *Volume Élémentaire de Référence* (VER) et existe tant que la quantité moyennée ne dépend pas de r . Le VER est un volume suffisamment grand pour qu'il permette d'estimer statistiquement tout les paramètres associés à la configuration de l'espace poral [Bear 1972] et suffisamment petit pour être considéré comme une fraction négligeable d'un volume plus grand décrivant l'échelle macroscopique. L'homogénéisation est également une technique permettant de décrire ce phénomène de changement d'échelle. Cette méthode est basée sur la théorie des séries (asymptotic functional expansion, [Hornung 1997]). La taille du VER doit être suffisamment grande devant celle des pores, chenaux et fissures afin de construire des valeurs moyennes significatives. En milieu fissuré, on peut être amené à choisir un VER énorme ne respectant plus la contrainte de continuité des paramètres d'un VER à l'autre [de Marsily 1981; Helmig 1997].

Milieu homogène / milieu hétérogène

Un milieu poreux est *homogène* resp. *hétérogène* relativement à une quantité macroscopique (porosité, température) si ce paramètre conserve la même valeur resp. varie à travers le domaine. Dans le cadre de ce travail, seul le milieu homogène sera traité. Certaines remarques concernant le traitement des hétérogénéités seront néanmoins développées dans la suite du premier chapitre. Ici le milieu hétérogène est considéré comme composé d'un ensemble de milieu homogène au propriétés différentes (hétérogénéités) au sein d'un seul volume macroscopique. Ainsi chaque quantité sera supposée constante ou constante par morceau dans l'espace.

1.2 Ecoulement diphasique

Les bases des écoulements diphasiques en milieu poreux sont développées dans cette section. Les notations utilisées ici seront les même que celles utilisées pour les formulations triphasiques. Les définitions et les explications sont présentées dans [Helmig 1997; Bear 1972; Bastian 1999].

1.2.1 Notion de saturation

Considérons un VER de milieu poreux occupé par plusieurs phases. A l'échelle microscopique, chaque point du VER est occupé soit par la phase solide, soit par une des deux phase liquide. Soit γ_j la fonction indiquant la présence de la phase α (indicatrice de phase) :

$$\gamma_j(t, \mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} \in \text{la phase } j \text{ au temps } t \\ 0 & \mathbf{x} \in \text{sinon} \end{cases} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (1.3)$$

Cette fonction pointant la phase j dans l'espace et dans le temps nous permet de construire la quantité macroscopique appelée *saturation* de la phase j et notée s_j soit :

$$s_j(t, x_0) = \frac{\int_{VER} \gamma_j(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x}}{\int_{VER} \gamma(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x}}, \quad (1.4)$$

où $x_0 \in VER$ et la fonction γ est définie dans (1.1). Le VER peut être considéré comme une sphère $\mathcal{S}(x_0, r)$ définie plus haut. La saturation de la phase j peut être exprimée comme le ratio volumique de la phase j dans le volume des vides à une certaine position x et à un temps t . Ainsi, $0 \leq s_j \leq 1$ et $\sum s_j = 1$.

Saturation résiduelle

Dans la mesure où la phase j ne peut pas être entièrement mobilisée dans le déplacement multiphasique au sein du milieu poreux (effets d'hystérésis, [Helmig 1997]), une *saturation résiduelle de la phase j* notée s_{rj} est introduite. Elle exprime la saturation minimale de la phase j qui est retenue dans le milieu poreux et due aux forces « adhésives » avec la matrice solide. Néanmoins, la saturation résiduelle peut être réduite en diminuant la tension de surface (i.e. modification de s_{rj} par des substances chimiques comme des *surfactants*) ou par changement de phase (vaporisation). Seul les cas dont la saturation résiduelle reste constante seront considérés ici. Ainsi, nous pouvons écrire que $s_{rj} \leq s_j \leq 1 - \sum_{\beta \neq j} S_{r\beta}$.

Saturation effective

Dans la suite, la saturation s_{rj} sera considérée comme constante dans l'ensemble du domaine et dans le temps (paramètre d'entrée). Une nouvelle quantité est introduite : la *saturation effective*

$$\bar{s}_j = \frac{s_j - s_{rj}}{1 - \sum_{\beta} S_{r\beta}}.$$

Cette définition nous permet d'écrire que $0 \leq \bar{s}_j \leq 1$ et $\sum_j \bar{s}_j = 1$. Une nouvelle quantité θ est introduite :

$$s_j = s_{rj} + \theta \bar{s}_j,$$

avec $\theta = 1 - \sum_{\beta} S_{r\beta}$.

1.2.2 Conservation de la masse

Rappelons que s_j est à prendre comme la saturation de la phase j . L'équation de conservation de la masse peut s'exprimer pour chacune des phases j soit :

$$\frac{\partial(\phi \rho_j s_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_j \mathbf{u}_j) + \rho_j Q_j = 0. \quad (1.5)$$

Cette expression du théorème de continuité traduit le fait que la saturation réduit l'espace poral d'une quantité ϕV à un volume $\phi s_j V$ occupé par la phase j . L'équation de conservation de la masse (1.5) peut être ré-écrite avec la saturation effective comme inconnue :

$$\theta \frac{\partial(\phi \rho_j \bar{s}_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_j \mathbf{u}_j) + \rho_j Q_j = 0, \quad (1.6)$$

avec \mathbf{u}_j la vitesse de la phase j . La saturation s_{rj} restant constante au cours du temps.

1.2.3 Loi de Darcy généralisée

Comme dans les écoulements monophasiques, on peut montrer que par une prise de moyenne sur un VER (ou par homogénéisation), la vitesse de la phase j à l'échelle macroscopique notée

u_j peut s'exprimer sous la forme de la loi de Darcy [Quintard 1996] tel que :

$$\mathbf{u}_j = -\frac{kr_j}{\mu_j} \mathbf{K} \cdot (\nabla p_j - \rho_j \mathbf{g}), \quad (1.7)$$

si le transfert de quantité de mouvement entre phases est négligeable. Ici, \mathbf{K} est le *tenseur de perméabilité intrinsèque* (ou perméabilité absolue) et est indépendant des fluides, kr_j est appelée *perméabilité relative* de la phase j et dépend de la saturation effective de la phase mouillante.

1.2.4 Notion de capillarité

Les écoulements monophasiques sont gouvernés par des forces de pressions issus des gradients de pressions au sein de l'espace poral et d'une force extérieure : la gravité. L'évolution de l'interface entre les différentes phases fluides (échelle microscopique) génère une *force capillaire*. Cette force est construite à partir de la *tension de surface* σ [$N.m^{-1}$] de chaque phase à leurs interfaces et qui est causé à la fois par un effet d'adhésion à la phase solide et par l'existence de forces cohésives à l'échelle moléculaire au sein de chaque phase. La figure ci-dessus (cf. Fig. 1.4)

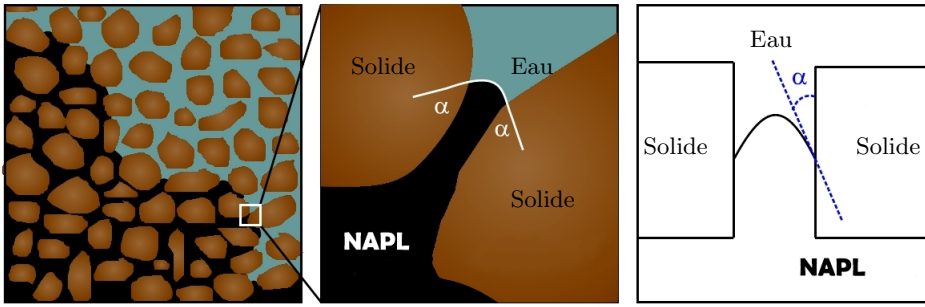


FIG. 1.4 – Détails de l'interface entre deux phases. L'angle de contact α caractérise le ménisque à l'interface fluide-fluide (figure de droite) et définit la phase mouillante (eau) et non-mouillante (NAPL)

montre une interface entre de l'eau et du NAPL dans un canal induit par deux grains de la matrice solide. À l'interface fluide/fluide, l'équilibre des forces se traduit par une courbure due à la capillarité. Considérons deux fluides non-miscibles (e.g. eau et huile). L'interaction des trois phases au sens large (matrice solide, eau et huile) génère un *angle de contact* α (cf. Fig. 1.4). L'influence de ces forces décroît lorsque la distance en partant de l'interface croît. L'équation de *Young* donne l'expression des forces à l'équilibre :

$$\sigma_{S-1} = \sigma_{S-1} + \sigma_{1-2} \cos \alpha, \quad (1.8)$$

où σ_{S-1} , σ_{S-1} , et σ_{1-2} sont respectivement les tensions de surface entre la matrice solide et le fluide 1, le solide et le fluide 2 et les fluides 1 et 2 (cf. Fig. 1.5). En partant de (1.8), l'angle de contact j s'exprime directement :

$$\alpha = \arccos \left(\frac{\sigma_{S-2} - \sigma_{S-1}}{\sigma_{1-2}} \right). \quad (1.9)$$

L'angle de contact joue un rôle important car il détermine *l'angle de mouillabilité*. La phase fluide

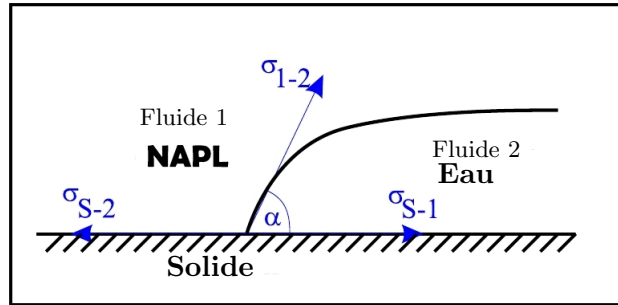


FIG. 1.5 – Tension de surface et angle de contact à l'équilibre

possédant un angle *aigu* sera considérée comme une phase *mouillante* (notée w) par rapport à la surface solide (fluide 1 dans Fig. 1.5). Lorsque l'angle de contact est $> 90^\circ$, la phase est qualifiée de *non-mouillante* (notée nw)

1.2.5 Pression capillaire

La grandeur *microscopique* appelée *pression capillaire* est introduite :

$$p_c = p_{nw} - p_w \geq 0. \quad (1.10)$$

L'interface entre deux phases est maintenue par une discontinuité dans le champ de pression microscopique entre les deux phases. La pression capillaire peut être vue comme la hauteur du saut de pression et toujours positif car la pression de la phase non-mouillante p_{nw} est plus grande que celle de la phase mouillante p_w . Afin de tenir compte des effets capillaires à l'échelle macroscopique, une prise de moyenne est opérée sur le champ de pression capillaire microscopique sur l'ensemble du VER. Cette prise de moyenne aboutit à une grandeur macroscopique qui sera plus tard appelée *pression capillaire macroscopique* :

$$p_c(t, \mathbf{x}) = p_{nw}(t, \mathbf{x}) - p_w(t, \mathbf{x}).$$

En général, cette pression capillaire est une fonction des saturations, de la température des fluides et de la composition (changement de la tension de surface). En accord avec [Hassanizadeh and Gray 1993], cette grandeur macroscopique n'est valide que lorsque les phases sont immobiles (à l'équilibre). La pression capillaire macroscopique p_c est aussi bien une fonction de la surface constituée par l'interface fluide-fluide que de la saturation. Cependant, il semble difficile de prendre en compte l'approche de [Hassanizadeh and Gray 1990; Hassanizadeh and Gray 1993] dans un modèle d'écoulement multiphasique car la dépendance entre la pression capillaire et la surface interfaciale fluide-fluide n'est pas connue explicitement. La pression capillaire sera considérée comme fonction uniquement de la saturation de la phase mouillante $p_c(\bar{s}_w)$. Du point de vue hydrogéologique, il existe deux grands modèles mathématiques non-linéaires permettant de construire la pression capillaire p_c . Chacun d'eux est basé sur des observations expérimentales et tiennent compte des effets macroscopiques liés à la saturation effective de la phase mouillante \bar{s}_w .

Modèle capillaire de Brooks-Corey

Brooks et Corey ont développé un modèle mathématique [Brooks and Corey 1964] permettant de décrire $p_c(\bar{s}_w)$ tel que :

$$\bar{s}_w(p_c) = \left(\frac{p_c}{P_d}\right)^\lambda \text{ pour } p_c \geq P_d. \quad (1.11)$$

Le paramètre λ décrit la distribution des grains dans le milieu poreux. Des valeurs faibles de λ indiquent un matériel poreux composé d'un seul type de grain (uniforme), alors que des valeurs grandes de λ indique la grande non-uniformité du matériel poreux [Helmig 1997]. La *pression d'entrée* P_d [Pa] est considérée comme la valeur minimale de pression capillaire pour déplacer la phase mouillante (à la saturation effective maximale, pour le pore le plus grand). La paramétrisation $\bar{s}_w \leftrightarrow p_c$ permet d'écrire

$$p_c(\bar{s}_w) = P_d \bar{s}_w^{-\frac{1}{\lambda}} \text{ pour } \bar{s}_w \in]0, 1], \quad (1.12)$$

en notant que $p_c(1) = P_d$

Modèle capillaire de Van-Genuchten

Van Genuchten, a également défini un modèle de pression capillaire [van Genuchten 1980] :

$$\bar{s}_w(p_c) = (1 + (\alpha p_c)^n)^m \text{ pour } p_c \geq 0 \quad (1.13)$$

Les paramètres m et n sont reliés par la relation $m = 1 - \frac{1}{n}$ et caractérisent la structure du milieu poreux. Le dernier paramètre α est donné en [Pa⁻¹]. La paramétrisation $\bar{s}_w \leftrightarrow p_c$ permet d'écrire :

$$p_c(\bar{s}_w) = \frac{1}{\alpha} \left(\bar{s}_w^{-\frac{1}{m}} - 1 \right)^{\frac{1}{n}} \text{ pour } \bar{s}_w \in]0, 1], \quad (1.14)$$

A l'inverse du modèle de Brooks-Corey, le modèle de Van Genuchten ne permet pas de simuler l'effet de seuil car la pression capillaire est toujours égale à zéro pour la saturation effective maximale, i.e ; $p_c(\bar{s}_w = 1) = 0$. Pour des faibles valeurs de saturation effective en phase mouillante \bar{s}_w , la pression capillaire comme sa dérivée première $p'_c(\bar{s}_w)$ n'est pas bornée (branche asymptotique). Ce phénomène a des conséquences numériques importantes dans les formulations mathématiques qui seront présentées dans la suite (cf. Section 1.4).

1.2.6 Phénomène d'hystérisis

La figure 1.6 montre l'allure typique des courbes de pression capillaire $p_c(\bar{s}_w)$. Ces courbes restent valables dans le cadre d'un *déplacement* (cycle) ou d'un imbibition (cycle). Si le milieu poreux est drainé puis de nouveau saturé (imbibition), la pression capillaire change. [Bastian 1999] montre que $\bar{s}_w \leftrightarrow p_c$ tient compte de l'ensemble des cycles d'imbibition/drainage du milieu poreux (historique). Lorsque le ménisque se déplace et rencontre un étranglement (réduction d'un canal capillaire), il *saute* l'étranglement (imbibition). Lors du drainage, le ménisque s'arrête au niveau de l'étranglement sans le franchir. Ce phénomène explique pourquoi pour une saturation effective importante, la pression capillaire lors du drainage est supérieure à celle issue lors de l'imbibition (cf. Fig. 1.6). Ce phénomène est appelé *hystérisis capillaire* a été décrit entre autres par [Bastian 1999; Helmig 1997]. Dans la plupart des écoulements, ce phénomène peut être négligé car le régime d'écoulement n'est influencé que par une seule courbe capillaire (milieu homogène). Nous négligerons ce phénomène dans la suite de notre étude.

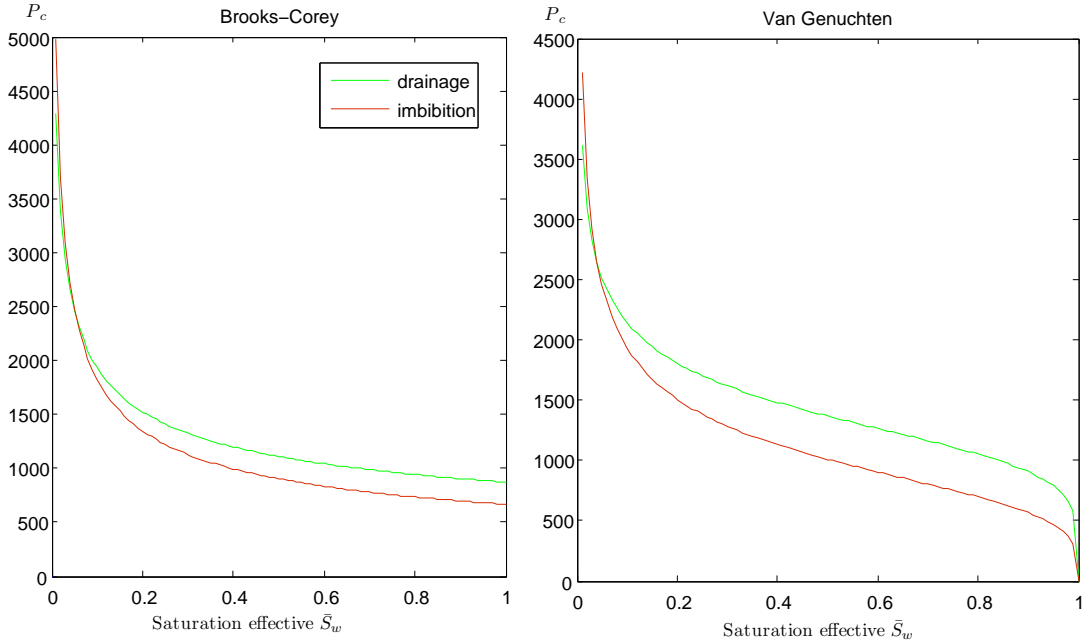


FIG. 1.6 – Courbes capillaires typiques issues du modèle de Brooks-Corey (gauche) et de Van Genuchten (droite) pour un cycle complet (drainage/imbibition). Les paramètres correspondent à un sable # 30 [Turner 2004]. Drainage : $\lambda = 2.89$, $P_d = 873 \text{ Pa}$, $n = 5.5$, $j = 0.00077 \text{ Pa}^{-1}$. Imbibition : $\lambda = 2.29$, $P_d = 667 \text{ Pa}$, $n = 4$, $j = 0.0011 \text{ Pa}^{-1}$

1.2.7 Perméabilité relative

L'existence des modèles de perméabilités relatives kr_j tiennent au fait que le déplacement de la phase j dépend de la présence des autres phases. Ils obéissent tous à la contraintes $0 \leq kr_j \leq 1$. Dans le cadre d'écoulements diphasiques, les expressions mathématiques de kr_w et kr_{nw} découlent des modèles de pression capillaire énoncés plus haut [Helmig 1997].

$$kr_w(\bar{s}_w) = \bar{s}_w^a \left(\frac{\int_0^{\bar{s}_w} p_c(s)^{-b} ds}{\int_0^1 p_c(s)^{-b} ds} \right)^c, \quad (1.15)$$

et

$$kr_{nw}(\bar{s}_w) = (1 - \bar{s}_w)^a \left(\frac{\int_0^{\bar{s}_w} p_c(s)^{-b} ds}{\int_0^1 p_c(s)^{-b} ds} \right)^c. \quad (1.16)$$

Le modèle mathématique de perméabilité relative de *Burdine* est obtenu par substitution des pressions capillaires de Brooks-Corey dans les relations (1.15), (1.16) avec $a = b = 2$ et $c = 1$ soit :

$$kr_w(\bar{s}_w) = \bar{s}_w^{3+\frac{2}{\lambda}} \quad (1.17)$$

et

$$kr_{nw}(\bar{s}_w) = (1 - \bar{s}_w)^2 (1 - \bar{s}_w^{1+\frac{2}{\lambda}}) \quad (1.18)$$

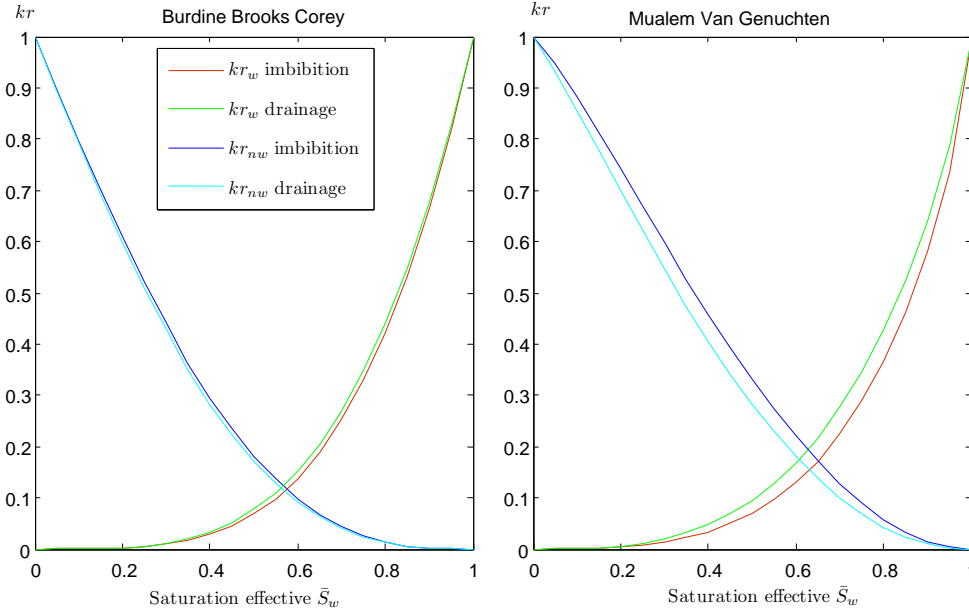


FIG. 1.7 – *Perméabilités relatives associées au drainage et à l'imbibition. Les paramètres correspondent à un sable # 30 [Turner 2004]. Drainage : $\lambda = 2.89$, $P_d = 873 \text{ Pa}$, $n = 5.5$, $\alpha = 0.00077 \text{ Pa}^{-1}$. Imbibition : $\lambda = 2.29$, $P_d = 667 \text{ Pa}$, $n = 4$, $\alpha = 0.0011 \text{ Pa}^{-1}$*

On parle alors du modèle de *Burdine-Brooks-Corey*. Le modèle mathématique de *Mualem* est obtenu par substitution des pressions capillaires de Van Genuchten dans les relations (1.15), (1.16) avec $a = 1/2$, $b = 1$ et $c = 2$ soit :

$$kr_w(\bar{s}_w) = \bar{s}_w^{\frac{1}{2}} \left(1 - \left(1 - \bar{s}_w^{\frac{1}{m}}\right)^m\right)^2 \quad (1.19)$$

et

$$kr_{nw}(\bar{s}_w) = (1 - \bar{s}_w)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \bar{s}_w^{\frac{1}{m}}\right)^{2m} \quad (1.20)$$

On parle alors du modèle de *Mualem-Van Genuchten*. Les relations qui unissent les paramètres λ , P_d de Brooks-Corey avec ceux du modèle de Van Genuchten n et α sont décrites dans [Morel-Seytoux *et al.* 1996].

1.3 Comportement d'un fluide à l'interface de deux matériaux

Cette section donne quelques axes de réflexion sur le traitement des hétérogénéités au sein d'un milieu poreux. Dans la suite du travail, nous travaillerons uniquement en milieu homogène. Ici la notion d'hétérogénéité fait référence à deux milieux homogènes ayant au moins une interface en commun et pourvu chacun de deux modèles capillaires différents. Certains résultats présentés dans la suite pourrons néanmoins tenir compte d'une variation dans l'espace du tenseur de perméabilité absolue et/ou de la porosité.

Conditions interfaciales

Soit deux milieux homogènes Ω_A et Ω_B pourvu chacun de deux pressions capillaires différentes notées respectivement p_c^A et p_c^B . Initialement, les deux milieux sont complètement saturés en eau i.e. l'eau est présente des deux côtés de l'interface séparant Ω_A et Ω_B . Cela implique

nécessairement que la saturation résiduelle $S_{rnw} = 0$ dans les deux domaines. La pression en eau p_w est *continue* à l'interface. La pression p_{nw} n'est pas définie tant que la phase non-mouillante n'est pas présente. Supposons que la phase non-mouillante approche de l'interface par le milieu Ω_A . En supposant qu'il n'y a pas de production de masse au niveau de l'interface, la conservation de la masse permet d'écrire à l'interface que le flux est continu :

$$\rho_w \mathbf{u}_w \cdot \mathbf{n} = \rho_{nw} \mathbf{u}_{nw} \cdot \mathbf{n},$$

avec \mathbf{n} le vecteur normal à l'interface et orienté vers Ω_B (cf. Fig. 1.8). La notion de *pression d'entrée* peut être vu comme la valeur de la pression capillaire dans la zone saturée $p_c(1)$. Cette définition est en accord avec le modèle de perméabilité de Brooks-Corey et la notion de pression de déplacement P_d . Il est ainsi possible de décrire le comportement de la saturation à l'interface. La phase non-mouillante va alors traverser l'interface si et seulement si la pression capillaire p_c^A est supérieure à la pression d'entrée $p_c^B(1)$. Si cette condition est vérifiée, alors la pression

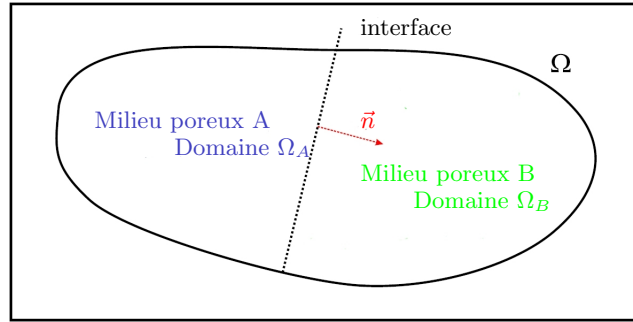


FIG. 1.8 – Interface entre deux milieux poreux homogènes

capillaire est continue à l'interface et $p_c^A = p_c^B$ (les perméabilités étant nécessairement non nuls de part et d'autre de l'interface). Cette relation implique l'existence d'un *saut* de saturation à l'interface comme cela est montré en figure ci-dessous (cf. Fig. 1.9). Si la pression capillaire p_c^A reste inférieure à la pression d'entrée $p_c^B(1)$, la phase présente dans Ω_A ne franchira pas l'interface vers Ω_B . Ce comportement a été largement décrit expérimentalement [Bastian 1999; Helmig 1997] lorsque une phase non-mouillante s'infiltré dans un milieu complètement saturé (phase mouillante) avec un effet d'accumulation à l'interface de deux milieux homogènes. Lorsque la pression de la phase non-mouillante atteint un niveau suffisamment grand, la phase (non-mouillante) pénètre l'autre milieu. Une condition dite de *pression capillaire étendue* est donnée :

$$\bar{s}_w^B = \begin{cases} 1 & \text{si } p_c^A(\bar{s}_w^A) \leq p_c^B(1), \\ \frac{p_c^A(\bar{s}_w^A)}{p_c^B} & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.21)$$

Dans le modèle capillaire de Van Genuchten, l'expression liant la pression $p_c(\bar{s}_w)$ et la saturation effective (pression d'entrée nulle) est toujours inversible (1.21). Il n'y a pas d'effet seuil comme dans le modèle de Brooks-Corey.

1.4 Différentes formulations pour les écoulements diphasiques

Il existe différentes formulations de modèles diphasiques en fonction du choix des variables primaires retenues [Helmig 1997; Binning and Celia 1999; Bastian 1999; Nayagum 2001].

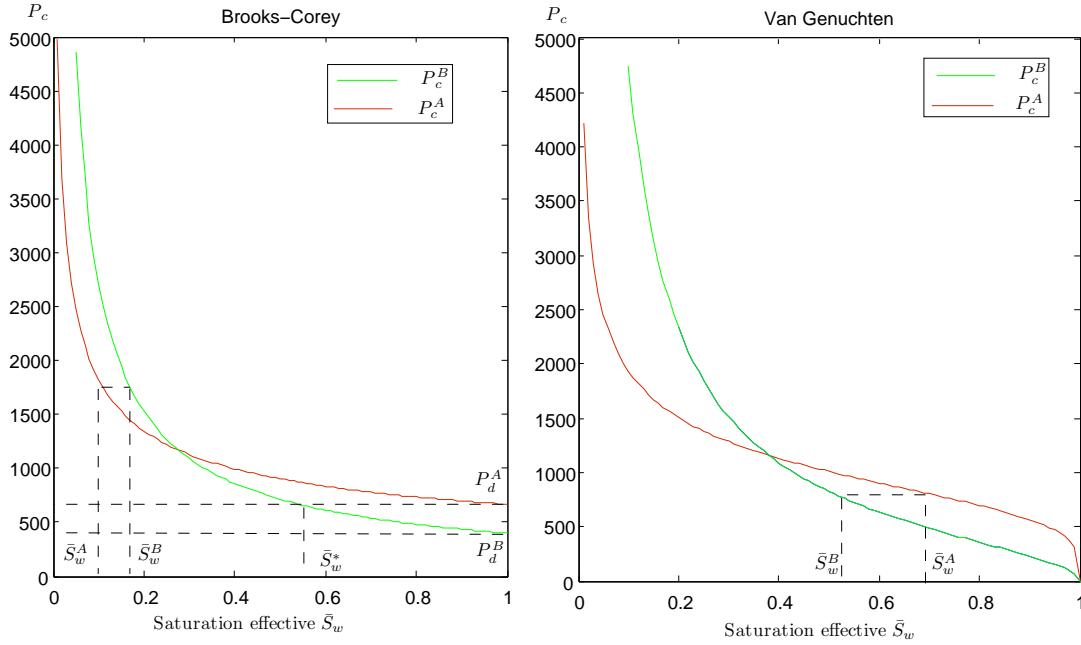


FIG. 1.9 – Courbes de pressions capillaires pour un milieu poreux comportant une discontinuité

Les conditions initiales et aux limites seront alors plus ou moins facile à appliquer quivant le choix effectué. Ce choix implique également la ou les méthodes numériques employées lors de la discrétisation des équations d'écoulements. Les méthodes numériques seront décrites dans le chapitre 4. Les différentes formes existantes du modèle d'écoulement diphasique sont brièvement décrits ici. L'écoulement non-miscible de deux phases en milieu poreux homogène est introduit avec ρ_j , ϕ constant dans le temps et l'espace et un tenseur \mathbf{K} isotrope.

1.4.1 Formulation *pression-pression*

La formulation en pression de la phase non-mouillante p_{nw} et pression de la phase mouillante p_w est obtenu simplement en injectant dans l'équation de conservation de la masse (1.5) la loi de Darcy généralisée (1.7). Les variables primaires sont donc les deux pressions p_w et p_{nw} . La saturation de la phase non-mouillante est éliminée en notant que $s_{nw} = 1 - s_w$. Ainsi, il vient :

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial(\rho_w s_w)}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{k r_w}{\mu_w} \rho_w \mathbf{K} \cdot (\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g}) \right) + \rho_w Q_w &= 0 \\ -\phi \frac{\partial(\rho_{nw} s_w)}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{k r_{nw}}{\mu_{nw}} \rho_{nw} \mathbf{K} \cdot (\nabla p_{nw} - \rho_{nw} \mathbf{g}) \right) + \rho_{nw} Q_{nw} &= 0 \end{aligned} \quad (1.22)$$

Les équations sont couplées et non linéaires. La fermeture est assurée par les relations constitutives en pressions capillaires (1.14), (1.12) et perméabilités relatives (1.17), (1.18); (1.19), (1.20), fonctions de la saturation effective en phase mouillante.

1.4.2 Formulation *pression-saturation*

En utilisant directement l'expression de la pression capillaire (1.10) et $s_{nw} = 1 - s_w$, une formulation en pression de la phase mouillante p_w et saturation de la phase non-mouillante s_{nw}

peut être dégagée :

$$\begin{aligned} -\phi \frac{\partial(\rho_w s_{nw})}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{kr_w}{\mu_w} \rho_w \mathbf{K} \cdot (\nabla p_w - \rho_w \mathbf{g}) \right) + \rho_w Q_w &= 0, \\ \phi \frac{\partial(\rho_{nw} s_{nw})}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{kr_{nw}}{\mu_{nw}} \rho_{nw} \mathbf{K} \cdot (\nabla p_w + \nabla p_c - \rho_{nw} \mathbf{g}) \right) + \rho_{nw} Q_{nw} &= 0. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Une formulation analogue peut être également formulée en p_{nw} et saturation en phase non-mouillante s_{nw} . Cette dernière formulation (p_{nw}, s_w) est entre autre implémentée dans le code de calcul MUFTE_UG [Helmig 1997]. En remarquant que le modèle de pression capillaire n'est une fonction que de la saturation, il est possible de ré-écrire que $\nabla p_c = \frac{dp_c}{ds_j} \nabla s_j$ avec $j = (w, nw)$ suivant la formulation retenue. En appliquant ce changement de variable à la formulation (p_{nw}, s_w) , il vient :

$$\phi \frac{\partial(\rho_w s_w)}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{kr_w}{\mu_w} \rho_w \mathbf{K} \cdot (\nabla p_{nw} - \rho_w \mathbf{g}) \right) - \nabla \cdot \left(\rho_w \frac{kr_{nw}}{\mu_{nw}} \mathbf{K} \cdot \frac{dp_c}{ds_w} \nabla s_w \right) + \rho_{nw} Q_{nw} = 0 \quad (1.24)$$

L'équation d'advection-diffusion (1.24) comporte trois termes : un terme d'accumulation, un terme associant le gradient de pression de la phase non-mouillante ainsi que la gravité et un terme représentant les forces de capillarité. La fonction $\frac{kr_w}{\mu_w}(s_w)$ (mobilité de la phase mouillante) est une fonction non linéaire de la saturation. Le second terme peut être interprété comme la composante convective de l'écoulement. Le troisième terme correspond à une terme de diffusion. Si l'écoulement est principalement gouverné par la convection, l'équation résultante sera de type hyperbolique; si le terme de diffusion domine, elle sera de type parabolique. Cette formulation pose certains problèmes lorsque la saturation de la phase mouillante devient très petite (diffusion). En effet, les formulations (p_w, s_{nw}) [Huber and Helmig 1996] comportent un terme $\frac{kr_{nw}}{\mu_{nw}} \nabla p_c$ qui n'est pas borné pour des valeurs de saturation en s_w faibles. Ceci est dû au comportement asymptotique de la pression capillaire au voisinage de la saturation résiduelle en phase mouillante. La formulation (p_{nw}, s_w) pose le même type de problème pour des valeurs de saturation maximale i.e. le terme $\frac{kr_{nw}}{\mu_{nw}} \nabla p_c$ tend vers l'infini (modèle capillaire de Van Genuchten).

Écoulement fractionnel en système diphasique

La formulation fractionnelle retenue dans les formulations pression moyenne-saturation et pression globale saturation permet de traiter un écoulement de l'ensemble des phases. Certaines variables de l'écoulement propres à chaque phase (mobilité, flux total) sont alors exprimées comme fraction de l'écoulement général. Cette formulation fractionnelle aboutie à une équation en pression reformulée et une équation en saturation. Ici la phase mouillante est supposée incompressible (eau) - i.e. sa masse volumique est constante - et la phase non mouillante est faiblement compressible, c'est à dire que la loi reliant sa masse volumique à sa pression est linéaire (considéré comme un gaz parfait) :

$$\rho_w = \text{cste}, \rho_{nw} = c_{nw} p_{nw}, \quad (1.25)$$

où c_{nw} est une constante positive. Le flux massique total :

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_w + \mathbf{q}_{nw} = \rho_w \mathbf{u}_w + \rho_{nw} \mathbf{q}_{nw} \quad (1.26)$$

Equation de saturation Nous supposons les viscosités dynamiques μ_j constantes et la pression capillaire ne dépendant que de la saturation effective de la phase mouillante qui sera notée s_w . Nous introduisons la *mobilité relative* $d_j = kr_j/\mu_j$ [$1/(Pa.s)$] également fonction de la saturation effective de la phase mouillante. L'équation de conservation de la masse de la phase mouillante (sans terme puit-source) donne :

$$\phi \frac{\partial(\rho_w s_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_w \mathbf{u}_w) = 0. \quad (1.27)$$

La loi de Darcy (1.7) nous permet d'obtenir pour le flux massique de la phase mouillante \mathbf{q}_w , en utilisant la définition de la pression capillaire (1.10) :

$$\mathbf{q}_w = -\rho_w d_w \mathbf{K} \cdot (\nabla p_{nw} - p'_c \nabla s_w - \rho_w \mathbf{g}). \quad (1.28)$$

En effet, comme p_c ne dépend que de s_w , on a $\nabla p_w - \nabla p_{nw} = -p'_c \nabla s_w$. Pour éliminer le gradient de pression de la phase non-mouillante, on considère également la loi de Darcy pour la phase non mouillante :

$$\mathbf{q}_{nw} = -\rho_{nw} d_{nw} \mathbf{K} \cdot (\nabla p_{nw} - \rho_{nw} \mathbf{g}). \quad (1.29)$$

Pour élimier le gradient de pression de la phase non mouillante, on combine donc $\rho_{nw}(p_{nw})d_{nw}(s_w) \times (1.28) - \rho_w d_w(s_w) \times (1.29)$ soit

$$\begin{aligned} \rho_{nw}(p_{nw})d_{nw}(s_w)\mathbf{q}_w - \rho_w d_w(s_w)(\mathbf{q} - \mathbf{q}_w) &= \rho_w d_w(s_w)\rho_{nw}(p_{nw})d_{nw}(s_w)(-\rho_{nw}(p_{nw})\mathbf{K} \cdot \mathbf{g}) \\ &\quad - \rho_w d_w(s_w)d_{nw}(s_w)\rho_{nw}(p_{nw})\mathbf{K} \cdot (-p'_c(s_w)\nabla s_w - \rho_w \mathbf{g}). \end{aligned}$$

On définit la mobilité globale par :

$$d(s_w, p_{nw}) = (\rho_w d_w(s_w) + \rho_{nw}(p_{nw})d_{nw}(s_w)), \quad (1.30)$$

et le flux fractionnaire en phase mouillante :

$$f_w(s_w, p_{nw}) = \frac{\rho_w d_w(s_w)}{d(s_w, p_{nw})}. \quad (1.31)$$

Alors

$$\begin{aligned} d(s_w, p_{nw})\mathbf{q}_w - \rho_w d_w(s_w)\mathbf{q} &= -d^2(s_w, p_{nw})f_w(s_w, p_{nw})(1 - f_w(s_w, p_{nw}))\mathbf{K} \cdot (-p'_c(s_w)\nabla s_w) \\ &\quad + (\rho_w^2 d_w(s_w)d_{nw}(s_w)\rho_{nw}(p_{nw}) - \rho_w \rho_{nw}^2(p_{nw})d_w(s_w)d_{nw}(s_w))\mathbf{K} \cdot \mathbf{g}. \end{aligned}$$

En introduisant les quantités suivantes :

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{g}}(s_w, p_{nw}) &= \frac{\rho_w \rho_{nw}(p_{nw})d_w(s_w)d_{nw}(s_w)}{d(s_w, p_{nw})}(\rho_w - \rho_{nw}(p_{nw})), \\ a(s_w, p_{nw}) &= -\frac{\rho_w \rho_{nw}(p_{nw})d_w(s_w)d_{nw}(s_w)}{d(s_w, p_{nw})}p'_c(s_w), \end{aligned} \quad (1.32)$$

on en déduit l'expression du flux massique de la phase mouillante :

$$\mathbf{q}_w(s_w, p_{nw}) = -a(s_w, p_{nw})\mathbf{K} \cdot \nabla s_w + f_w(s_w, p_{nw})\mathbf{q} + b_{\mathbf{g}}(s_w, p_{nw})\mathbf{K} \cdot \mathbf{g} \quad (1.33)$$

Equation de pression En sommant les deux équations de conservation de la masse, on obtient

$$\phi \frac{\partial}{\partial t} (c_{nw}(1-s_w)p_{nw} + \rho_w s_w) + \nabla \cdot (\mathbf{q}) = 0. \quad (1.34)$$

On peut expliciter le flux total \mathbf{q} en fonction des grandeurs définies précédemment. La loi de Darcy nous permet d'écrire :

$$\begin{aligned} \mathbf{q}(s_w, p_{nw}) &= \mathbf{q}_w(s_w, p_{nw}) + \mathbf{q}_{nw}(s_w, p_{nw}) \\ &= -\rho_{nw}(p_{nw})d_{nw}(s_w)\mathbf{K} \cdot (\nabla p_{nw} - \rho_{nw}(p_{nw})\mathbf{g}) - \rho_{nw}(p_{nw})d_{nw}(s_w)\mathbf{K} \cdot \nabla p_{nw} \\ &\quad - \rho_w d_w(s_w)\mathbf{K} \cdot (\nabla p_{nw} - p'_c(s_w)\nabla s_w) \end{aligned}$$

On définit

$$\bar{\rho}(s_w, p_{nw}) = \frac{[\rho_w^2 d_w(s_w) + \rho_{nw}^2(p_{nw})d_{nw}(s_w)]}{d(s_w, p_{nw})}, \quad (1.35)$$

Alors

$$\mathbf{q} = \bar{\rho}d\mathbf{K} \cdot \mathbf{g} - d\mathbf{K} \cdot \nabla p_{nw} + f_w d p'_c \mathbf{K} \cdot \nabla s_w.$$

Finalement

$$\mathbf{q}(s_w, p_{nw}) = -d(s_w, p_{nw})\mathbf{K} \cdot (\nabla p_{nw} - f_w(s_w, p_{nw})p'_c(s_w)\nabla s_w - \bar{\rho}(s_w, p_{nw})\mathbf{g})$$

On peut remarquer la présence d'un terme de diffusion en saturation dans l'équation en pression. Ceci représente un couplage fort entre les deux équations.

Formulation *pression moyenne-saturation*

La formulation en pression moyenne est semblable à la formulation en pression globale qui sera introduite dans la section suivante. La variable primaire en pression moyenne est construite comme la moyenne arithmétique des pressions des deux phases p_{nw} et p_w soit

$$p_m = \frac{p_{nw} + p_w}{2} \quad (1.36)$$

Pour établir l'équation de pression moyenne, l'équation de conservation de la masse (1.5) abouti en développant le terme d'accumulation :

$$\phi \rho_j \frac{\partial s_j}{\partial t} + \rho_j s_j \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi s_j \frac{\partial \rho_j}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_j \mathbf{u}_j) + \rho_j Q_j = 0 \quad (1.37)$$

En supposant le milieu poreux incompressible et en sommant sur les deux phases (w) et (nw), on obtient :

$$\phi \left(s_w \frac{\partial \rho_w}{\partial t} + s_{nw} \frac{\partial \rho_{nw}}{\partial t} \right) + \nabla \cdot (\mathbf{q}) + \underbrace{\rho_w Q_w + \rho_{nw} Q_{nw}}_{Q_t} = 0 \quad (1.38)$$

En remarquant que le *flux volumique total* s'écrit $\mathbf{q} = \rho_w \boldsymbol{\varphi}_w + \rho_{nw} \boldsymbol{\varphi}_{nw}$. En introduisant le coefficient de compressibilité de la phase j $c_j = \frac{\partial \rho_j}{\partial p_j}$, il vient

$$\phi \left(s_w c_w \frac{\partial p_w}{\partial t} + s_{nw} c_{nw} \frac{\partial p_{nw}}{\partial t} \right) + \nabla \cdot (\mathbf{q}) + \underbrace{\rho_w Q_w + \rho_{nw} Q_{nw}}_{Q_t} = 0 \quad (1.39)$$

La formulation en pression moyenne et (1.10) permet d'écrire que $p_{nw} = p_m + \frac{p_c}{2}$ et également $p_w = P_m - \frac{p_c}{2}$. En exprimant ces deux relations dans l'équation de conservation de la masse (1.39), il vient [Durlinsky 1993] :

$$\phi c_t \frac{\partial p_m}{\partial t} + \frac{1}{2} \phi (s_{nw} c_{nw} - s_w c_w) \frac{\partial p_c}{\partial t} = \nabla \cdot [d\mathbf{K} \cdot \nabla P_m] + \frac{1}{2} \nabla \cdot [(\rho_{nw} d_{nw} - \rho_w d_w) \mathbf{K} \cdot \nabla p_c] - \nabla \cdot [d\mathbf{K} \cdot \mathbf{g}] + Q_t, \quad (1.40)$$

avec $d(s_w, p_{nw})$ qui dépend à la fois de la saturation de la phase mouillante et de la pression de la phase non-mouillante l'huile ou le gaz, l'eau étant supposée incompressible. Nous introduisons $c_t(s_w, p_{nw}) = \rho_{nw}(p_{nw})c_{nw}s_{nw} + \rho_w c_w s_w$ la compressibilité totale. Suivant l'hypothèse formulée dans la section 1.2.5, la variation de la pression capillaire est petite devant celle de la pression moyenne ainsi le terme $\frac{\partial p_c}{\partial t}$ peut être négligé. En faisant l'hypothèse supplémentaire que les fluides en présence sont incompressibles, il vient :

$$\nabla \cdot [d\mathbf{K} \cdot \nabla P_m] + \frac{1}{2} \nabla \cdot [(\rho_{nw} d_{nw} - \rho_w d_w) \mathbf{K} \cdot \nabla p_c] - \nabla \cdot [d\mathbf{K} \cdot \mathbf{g}] + Q_t = 0, \quad (1.41)$$

L'équation résultante est de type elliptique et fortement non linéaire à travers les termes de mobilités et de pression capillaire. Ainsi, l'équation de saturation en phase-mouillante donne :

$$\phi \rho_w \frac{\partial s_w}{\partial t} + \nabla \cdot [f_w(s_w, p_{nw}) \mathbf{q}] + \nabla \cdot [b_g(s_w, p_{nw}) \mathbf{K} \cdot \mathbf{g}] - \nabla \cdot [a(s_w, p_{nw}) \mathbf{K} \cdot \nabla s_w] + \rho_w Q_w = 0. \quad (1.42)$$

Cette équation est fortement non linéaire car les fonctions a , b_g et f_w dépendent étroitement de la saturation s_w . Cette formulation est particulièrement bien adaptée aux écoulements incompressibles pour lesquels le flux total reste constant $\nabla \cdot (\mathbf{q}) = 0$ comme l'écoulement unidirectionnel de Buckley-Leverett (vitesse totale constante) ou l'écoulement bidirectionnel de McWhorter-Sunada (vitesse totale nulle).

Formulation *pression globale-saturation*

Nous donnons ici une description rapide de la pression globale et de l'équation de saturation en phase mouillante résultante. Cette approche employée dans le milieu pétrolier (écoulements huile-gaz). Cette formulation en pression globale introduite par Guy Chavent pour les cas compressibles permet de réduire le couplage entre les équations de pression et de saturation [Chavent 1981; Chavent and Jaffré 1986]. L'objectif est d'éliminer le terme de diffusion en saturation dans l'équation en pression (1.36). Pour y parvenir, on cherche à définir une nouvelle variable mathématique, homogène à une pression, nommée « pression globale », de telle sorte que nous puissions expliciter une fonction que nous noterons g vérifiant :

$$\nabla p_{nw} - f_w(s_w, p_{nw}) p'_c(s_w) \nabla s_w = g(s_w, p_{nw}) \nabla p. \quad (1.43)$$

On construit la pression globale pour un cas où la phase mouillante est incompressible et la phase non mouillante faiblement compressible. La pression globale sera de la même forme que les grandeurs p_w et p_{nw} et que cette nouvelle variable p vérifie :

$$p = \frac{1}{2}(p_w + p_{nw}) + \tilde{\gamma}(s_w, p). \quad (1.44)$$

Cherchons suivant quelles conditions imposées sur $\tilde{\gamma}$ et f l'égalité (1.43) est vérifiée. On a :

$$\nabla p = \frac{1}{2}(2\nabla p_{nw} - p'_c \nabla s_w) + \frac{\partial \tilde{\gamma}}{\partial s_w} \nabla s_w + \frac{\partial \tilde{\gamma}}{\partial p} \nabla p, \quad (1.45)$$

soit

$$\left(1 - \frac{\partial \tilde{\gamma}}{\partial p}\right) \nabla p = \nabla p_{nw} + \left(\frac{\partial \tilde{\gamma}}{\partial s_w} - \frac{1}{2} p'_c\right) \nabla s_w. \quad (1.46)$$

L'égalité (1.43) sera donc vérifiée si :

$$\frac{\partial \tilde{\gamma}}{\partial s_w}(s_w, p) = \left(\frac{1}{2} - f_w(s_w, p)\right) p'_c(s_w), \quad (1.47)$$

$$g(p) = 1 - \frac{\partial \tilde{\gamma}}{\partial p}(p). \quad (1.48)$$

Fonction auxiliaire : la pression capillaire globale On introduit une fonction auxiliaire P_c^g . Soit $s_{wc} \in [0, 1]$, caractérisé par

$$p_c(s_{wc}) = 0 \text{ ou } (p_c(1) > 0 \text{ et } s_{wc} = 1). \quad (1.49)$$

On supposera dans la suite que $s_{wc} = 1$. On définit alors la fonction auxiliaire P_c^g par

$$\forall s_w \in]0, 1] \quad \forall p \in [p_w, p_w + p_c(s_w)],$$

$$P_c^g(s_w, p) = \int_{s_{wc}}^{s_w} \left(f_w(s, p) - \frac{1}{2}\right) (-p'_c(s)) ds. \quad (1.50)$$

On a alors $\frac{\partial P_c^g}{\partial s_w}(s_w, p) = \left(\frac{1}{2} - f_w(s_w, p)\right) p'_c(s_w)$. L'égalité (1.47) est vérifiée de manière approchée pour $\tilde{\gamma} = P_c^g$ à condition que $f_w(s_w, p)$ reste relativement proche de $f_w(s_w, p_{nw})$.

Remarque D'autre définition de la pression globale tel que $p = p_{nw} + P_c^g$ sont également utilisée [Amaziane and Jurak 2008] est conduit à une expression de la pression capillaire globale légèrement différente $P_c^g(s_w, p) = -\int_1^{s_w} f_w(s, p) p'_c(s) ds$. C'est cette définition que nous utiliserons en système diphasique dans le chapitre 4. En système triphasique (eau/huile/gaz), nous définissons la pression globale comme la somme de la pression de la phase dont la mouillabilité est intermédiaire : l'huile et la pression capillaire globale i.e. $p = p_{huile} + P_c^g$ (voir chapitre 2 et 3).

Définition de la pression globale p La pression globale est alors définie de façon implicite [Chavent and Jaffré 1986] :

$$\begin{cases} p_w \leq p \leq p_{nw} \\ p = \frac{1}{2}(p_w + p_{nw}) + P_c^g(s_w, p) \end{cases} \quad (1.51)$$

pour que cette définition soit vérifiée, elle doit satisfaire deux conditions relatives à l'existence d'un point fixe :

- **Norme de P_c^g majorée** : La fonction de fluw fractionnaire f_w est bornée entre 0 et 1 par définition. Par ailleurs, la fonction de pression capillaire est monotone décroissante (lorsque la saturation de la phase mouillante s_w augmente). Ainsi, on en déduit avec $s_{wc} = 1$

$$\forall s_w, p \quad |P_c^g(s_w, p)| \leq \frac{1}{2}(p_c(s_w) - p_c(1)) \quad (1.52)$$

– **Norme de $\frac{\partial P_c^g}{\partial p}$ majorée** : La fonction p_c est décroissante positive, ainsi on a :

$$\left| \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \right| = \left| \int_1^{s_w} \frac{\partial f_w}{\partial p} \left| -\frac{dp_c}{ds} \right| ds \right| \leq \max \left[\left| \frac{\partial f_w}{\partial p} \right| \right] p_c(s_w) \quad (1.53)$$

En notant que $f_w = \rho_w d_w / d$, $\rho_w = cste$, $d_w = d_w(s_w)$ et $c_{nw} = \frac{\partial \rho_{nw}}{\partial p}$, on a :

$$\frac{\partial f_w}{\partial p} = -\frac{df_w}{d^2} c_{nw} d_{nw} = -\frac{f_w}{d} c_{nw} \frac{(1-f_w)}{\rho_{nw}} d = -f_w \frac{(1-f_w)}{p}. \quad (1.54)$$

Or par définition $f_w \in [0, 1]$, donc $f_w(1-f_w) \in [0, \frac{1}{4}]$ et donc,

$$\forall s, p \quad \left| \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \right| \leq \frac{1}{4} \frac{p_c(s_w)}{p}. \quad (1.55)$$

Une démarche analogue à celle effectuée pour la pression moyenne permet de déterminer les équations de pression globale et de saturation en eau associées. Dans la mesure où la variable primaire en pression globale est définie dans la suite du mémoire comme la somme de la pression d'une phase et de la pression capillaire globale, le système d'équation *pression globale-saturation* est donnée ici pour une variable de pression globale $p = p_{nw} + P_c^g$ (p_{nw} peut être la pression en gaz par exemple) :

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial}{\partial t} (s_w \rho_w + (1-s_w) \rho_{nw}(p)) - \nabla \cdot (\mathbf{q}) + Q_t &= 0 \\ \mathbf{q}(s_w, p) &= -d(s_w, p) \mathbf{K} \cdot \left(\left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p}(s_w, p) \right) \nabla p - \bar{\rho}(s_w, p) \mathbf{g} \right) \\ \phi \rho_w \frac{\partial s_w}{\partial t} + \nabla \cdot [f_w(s_w, p) \mathbf{q}] - \nabla \cdot [a(s_w, p) \mathbf{K} \cdot \nabla s_w] + \nabla \cdot [b_g(s_w, p) \mathbf{K} \cdot \mathbf{g}] + Q_w &= 0 \end{aligned} \quad (1.56)$$

Remarque : Suivant [Chavent and Jaffré 1986; Chavent 2009], nous redéfinissons dans la suite du mémoire la *mobilité relative de la phase j* $d_j = B_j k r_j / \mu_j$ [$1/(Pa.s)$] où $B_j = \rho_j / \rho_j^0$ est appelé *facteur de volume de la phase j*. On définit également les vitesses par phase \mathbf{q}_j pondérée par le facteur de volume :

$$\mathbf{q}_j \stackrel{\text{def}}{=} \varphi_j = B_j \mathbf{u}_j \quad (1.57)$$

1.5 Conclusion

On remarque que l'on a complètement éliminé le terme de diffusion en saturation dans l'équation de pression globale (couplage moins fort). Le terme $(1 - \partial P_c^g / \partial p)$ sera plus tard appelé *facteur de compressibilité*. L'équation de saturation n'a pas été modifiée (convection-diffusion). Les conditions évoquées dans (1.52), (1.55) seront rappelées en système triphasique dans le début du chapitre 3 avec la variable primaire en pression globale construite à partir de la pression de la phase huile (condition d'existence et de stabilité de la pression globale). Les équations relatives à la formulation "pression globale" en système triphasique seront données en chapitre 4.

Récemment, une nouvelle *formulation exacte en pression globale* a été développée pour les écoulements compressibles diphasiques [Amaziane and Jurak 2008] et pour les écoulements compressibles triphasiques [Chavent 2009] sous la condition que les données initiales triphasiques

satisfassent une *condition dite de Différentielle Totale* (DT). Cette condition DT permet de traiter des écoulements triphasiques compressibles formulés en pression globale, saturation en eau et saturation en gaz. La disparition du terme de diffusion dans l'équation de pression et mis en évidence en système diphasique dans le chapitre 1 se généralise en système triphasique. Afin de pouvoir reformuler les équations d'écoulement en pression globale, nous traitons dans le chapitre 2 et 3 de deux approches qui nous ont permis de travailler avec des variables secondaires (mobilités, flux fractionnaires) respectant la condition DT introduite dans le chapitre 2.

2

Formulation approchée de la pression globale en système triphasique

Le modèle d'écoulement fractionnel qui a été développé par [Chavent and Jaffré 1986], consiste à associer une pression capillaire globale au système triphasique (cf. Section 2.2). Elle permet de tenir compte d'un effet de compressibilité de la phase gaz et associe trois variables primaires en pression globale, saturation en eau et saturation en gaz. La reformulation conservative en pression globale permet d'obtenir une expression de la pression globale comme la somme de la pression de l'huile et de la pression capillaire globale.

Cette approche requiert une étape préalable de prétraitement des données initiales des deux systèmes diphasiques (cf. Section 2.3) consistant à interpoler ces données sur la totalité du domaine triphasique [Chavent and Salzano 1985]. L'objectif est de présenter les résultats issus de la phase d'interpolation pour deux sables différents : un sable fin (H1F) et un sable moyen (H2F).

2.1 Equations liées à la physique et conventions

Dans la suite, nous adopterons les notations suivante :

$$\begin{aligned} \text{eau} & (1) \\ \text{huile} & (2) \\ \text{gaz} & (3) \end{aligned}$$

La variable (P) sera volontairement laissée sans indice pour faire référence à la pression globale. Nous noterons \mathbb{T} le diagramme ternaire constitué des trois phases et $\partial\mathbb{T}$ l'union des trois frontières. Par ailleurs S fera référence à la distribution de saturation effective $S(\mathbf{x}, t) = (S_1(\mathbf{x}, t), S_3(\mathbf{x}, t))$ et $s = (s_1, s_3)$ sa valeur en un point du diagramme \mathbb{T} (en remarquant que $s_2 = 1 - s_1 - s_3$). Nous introduisons la notion de *facteur de volume* $B_j(P)$ évalué à la pression globale P :

$$B_j(p) = \frac{\rho_j(p)}{\rho_j(p_0)} \quad j = 1, 2, 3 \quad (2.1)$$

avec $\rho_j(p)$ la masse volumique de la phase j évaluée à la pression P , P_0 désignant une pression de référence (la pression atmosphérique par exemple). La pression P retenue est proche de la pression des phases P_j et satisfait la relation $P_{j,min} \leq P(\mathbf{x}, t) \leq P_{j,max}$.

Une mobilité relative de la phase j associant le facteur de volume B_j est également introduite telle que :

$$d_j(p) = \frac{B_j(p)}{\mu_j} \quad (2.2)$$

avec $B_j(P)$ le facteur de volume et μ_j la viscosité dynamique de la phase j .

Dans la suite des développements, nous supposons le milieu poreux homogène et les saturations S_1 et S_3 comme étant effectives. Les fonctions d'écoulement fractionnel se construisent naturellement en introduisant la mobilité totale $d = \sum_j d_j kr_j$ soit :

$$f_j(s, p) = \frac{d_j(s, p)}{d(s, p)} kr_j(s) \quad (2.3)$$

La connaissance de kr_1 , kr_2 et kr_3 suffit donc pour déterminer deux des trois fonctions f_j , la dernière s'obtenant directement par construction $\sum_j f_j = 1$. Par commodité, nous exprimerons la dépendance des perméabilités relatives uniquement à travers la mobilité totale d et les fonctions f_1 , f_3 . Les fonctions d et f_j ne peuvent pas être choisies de façon aléatoires si l'on souhaite les faire correspondre à une perméabilité relative précise kr_j . Un certain nombre de conditions doivent être vérifiées sur la mobilité totale :

$$\begin{cases} d > 0 \quad \forall (S_1, S_3, P) \\ d \leq d_1 \text{ avec } S_1 = 1 \text{ et } S_3 = 0, \forall P \\ d \leq d_2 \text{ avec } S_1 = 0 \text{ et } S_3 = 0, \forall P \\ d \leq d_3 \text{ avec } S_1 = 0 \text{ et } S_3 = 1, \forall P \end{cases} \quad (2.4)$$

Les flux fractionnaires [Chavent and Jaffré 1986] sont défini comme suit :

$$\begin{cases} 0 \leq f_j(s, p) \leq 1 \\ 0 \leq f_1(s, p) + f_3(s, p) \leq 1 \\ S_1 = 0 \implies f_1 = 0 \\ S_3 = 0 \implies f_3 = 0 \\ S_1 + S_3 = 0 \implies f_1 + f_3 = 0 \end{cases} \quad (2.5)$$

Nous définissons également les pressions capillaires P_c diphasiques et faisons l'hypothèse qu'elles ne s'expriment qu'en fonction des variables S_1 , S_3 et pas de l'espace [Chavent and Jaffré 1986]. Concernant la prise en compte des hétérogénéités du milieu poreux, l'ensemble des variables secondaires DT devront être générées pour chaque nouvelle zone affectée avec un modèle de pression capillaire et de perméabilités donné.

$$P_1 - P_2 = P_c^{12}(S_1, S_3) \quad \text{ainsi que} \quad \begin{cases} P_c^{12}(1, 0) = 0 \\ \text{et } \forall (s_1, s_3) \geq 0, (s_1 + s_3) \leq 1 \\ \frac{\partial P_c^{12}}{\partial s_1}(s_1, s_3) \geq 0 \\ \frac{\partial P_c^{12}}{\partial s_3}(s_1, s_3) \leq 0 \end{cases} \quad (2.6)$$

$$P_3 - P_2 = P_c^{32}(s_1, s_3) \quad \text{ainsi que} \quad \begin{cases} P_c^{32}(s_1, 0) = 0, \forall s_1 \in [0, 1] \\ \text{et } \forall (s_1, s_3) \geq 0, (s_1 + s_3) \leq 1 \\ \frac{\partial P_c^{32}}{\partial s_1}(s_1, s_3) \leq 0 \\ \frac{\partial P_c^{32}}{\partial s_3}(s_1, s_3) \geq 0 \end{cases}$$

2.2 Notion de « différentielle totale »

Les développements mathématiques (formulation flux fractionnaire) relatifs aux écoulements compressibles triphasiques associant une pression globale sont ceux de [Chavent and Jaffré 1986]. La description des fonctions d'écoulement (pression capillaire, perméabilité relative etc.) se fera à partir des saturations en eau, en gaz et d'une pression globale. La nature des variables primaires et leur expressions (notamment celle de la pression) seront discutées plus tard. Les fonctions caractéristiques des fluides sont données en système diphasique. Les paramètres de viscosité μ_j et B_j connus. Il est donc possible de déterminer de manière générale, les paramètres $d_j(p)$.

- Le système diphasique eau-huile (1 – 2) se traduit par une saturation en gaz nulle ($S_3 = 0$). La variable S_1 est donc utilisée pour décrire les perméabilités relatives de l'eau et de l'huile $kr_1^{12}(s_1)$ et $kr_2^{12}(s_1)$ ainsi que la pression capillaire $P_c^{12}(s_1)$. Dans un deuxième temps, on obtient la mobilité totale du système diphasique $d^{12}(s_1, p)$ et les fonctions flux fractionnaires $f_1^{12}(s_1, p)$, $f_2^{12}(s_1, p)$ (2.3).
- Le système diphasique gaz-huile (3 – 2) s'exprime par une saturation en eau nulle soit $S_1 = 0$. La variable S_3 , utilisée comme variable indépendante sert donc à décrire les perméabilités relatives en gaz $kr_3^{32}(s_3)$ et en huile $kr_2^{32}(s_3)$ ainsi que la pression capillaire $P_c^{32}(s_3)$. On définit de la même manière la mobilité totale $d^{32}(s_3, p)$ et les flux fractionnaires $f_3^{32}(s_3, p)$, $f_2^{32}(s_3, p)$.

Les trois saturations et les pressions capillaires peuvent se représenter sur un diagramme ternaire en choisissant comme coordonnées les variables s_1 et s_3 dans le repère (S_1, S_3) (centré en S_2). Le diagramme ternaire se construit tel que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Système diphasique gaz/huile : côté (3 – 2), d'équation } S_1 = 0 \\ \text{Système diphasique eau/huile : côté (1 – 2), d'équation } S_3 = 0 \\ \text{Système diphasique gaz/eau : côté (1 – 3), d'équation } S_1 + S_3 = 1 \end{array} \right.$$

Ce système déterminent un domaine triphasique (1 – 2 – 3) dans lequel nous devons exprimer trois nouvelles fonctions à savoir les perméabilités relatives triphasiques $kr_j(s)$, les fonctions flux fractionnaires triphasiques $f_j(s, p)$ et la mobilité totale des trois phases $d(s, p)$. La difficulté réside dans la détermination de perméabilités relatives à l'intérieur du domaine triphasique. Plusieurs méthodes existent et se basent sur des considérations physiques [?].

L'approche que nous adopterons par la suite consiste à prolonger les données diphasiques (connues sur les frontières) à l'ensemble du diagramme et ainsi déterminer les perméabilités relatives triphasiques en respectant une condition dite de « différentielle totale ». Faire l'hypothèse de différentielle totale permet de simplifier une partie des équations liées à l'écoulement (notamment celle en pression). Elle impose néanmoins une construction préliminaire d'un certain nombre de données initiales et permet de s'affranchir du modèle de Stone couramment utilisé pour l'évaluation de kr_2 .

Faire l'hypothèse d'une condition de différentielle totale (DT) équivaut à dire qu'il existe un triplet quelconque $(S_1, S_3, P)(\mathbf{x}, t)$ auquel est associé une fonction capillaire $P_c^g(S_1, S_3, P)$, qu'on appellera « fonction capillaire globale » étendue au système triphasique [Chavent and Jaffré 1986].

$$(S_1, S_3, P) \longmapsto P_c^g(S_1, S_3, P) \quad (2.7)$$

A cette définition est associée la forme différentielle introduite en système diphasique (1.43) suivante :

$$\begin{aligned} \nabla P_c^g(S_1, S_3, P) &= f_1(S_1, S_3, P) \nabla P_c^{12}(S_1, S_3) + f_3(S_1, S_3, P) \nabla P_c^{32}(S_1, S_3) \\ &+ \frac{\partial P_c^g}{\partial P}(S_1, S_3, P) \nabla P \end{aligned} \quad (2.8)$$

En remarquant que chaque pression capillaire diphasique dépend de deux saturations et en exprimant chaque gradient de pression capillaire en gradient de saturation, il vient :

$$\nabla P_c^g = \left(f_1 \frac{\partial P_c^{12}}{\partial S_1} + f_3 \frac{\partial P_c^{32}}{\partial S_1} \right) \nabla S_1 + \left(f_1 \frac{\partial P_c^{12}}{\partial S_3} + f_3 \frac{\partial P_c^{32}}{\partial S_3} \right) \nabla S_3 + \frac{\partial P_c^g}{\partial P} \nabla P$$

Pour que la fonction $P_c^g(S_1, S_3, P)$ existe, c'est à dire que la forme différentielle précédente soit une forme différentielle totale exacte, pour tout $(S_1, S_3, P) \in [0, 1]^2 \times \mathbb{R}$, soit :

$$\begin{cases} \frac{\partial P_c^g}{\partial S_1}(S_1, S_3, P) = f_1(S_1, S_3, P) \frac{\partial P_c^{12}}{\partial S_1}(S_1, S_3) + f_3(S_1, S_3, P) \frac{\partial P_c^{32}}{\partial S_1}(S_1, S_3) \\ \frac{\partial P_c^g}{\partial S_3}(S_1, S_3, P) = f_1(S_1, S_3, P) \frac{\partial P_c^{12}}{\partial S_3}(S_1, S_3) + f_3(S_1, S_3, P) \frac{\partial P_c^{32}}{\partial S_3}(S_1, S_3) \end{cases} \quad (2.9)$$

il faut et il suffit que la relation de Cauchy soit vérifiée :

$$\frac{\partial}{\partial S_3} \left(\frac{\partial P_c^g}{\partial S_1}(S_1, S_3, P) \right) \Big|_P = \frac{\partial}{\partial S_1} \left(\frac{\partial P_c^g}{\partial S_3}(S_1, S_3, P) \right) \Big|_P$$

Cette condition nécessaire et suffisante est prise à P constante, $\partial P_c^g / \partial P$ étant connue (2.8). En remarquant que $\frac{\partial}{\partial S_1} \left(\frac{\partial P_c^{12}}{\partial S_3} \right) = \frac{\partial}{\partial S_3} \left(\frac{\partial P_c^{12}}{\partial S_1} \right)$ et $\frac{\partial}{\partial S_1} \left(\frac{\partial P_c^{32}}{\partial S_3} \right) = \frac{\partial}{\partial S_3} \left(\frac{\partial P_c^{32}}{\partial S_1} \right)$, on obtient :

$$\frac{\partial f_1}{\partial S_3} \frac{\partial P_c^{12}}{\partial S_1} + \frac{\partial f_3}{\partial S_3} \frac{\partial P_c^{32}}{\partial S_1} = \frac{\partial f_1}{\partial S_1} \frac{\partial P_c^{12}}{\partial S_3} + \frac{\partial f_3}{\partial S_1} \frac{\partial P_c^{32}}{\partial S_3} \quad (2.10)$$

L'équation précédente (2.10) est appelée « condition différentielle ». Elle doit être vérifiée par les perméabilités relatives triphasiques et par la pression capillaire globale (2.8). Une expression possible de la pression capillaire globale (à pression p donnée) s'obtient en intégrant l'expression différentielle de la pression capillaire globale (2.9) suivant s_1, s_3 . Une interprétation géométrique est donnée en chapitre 3 (cf. Fig. 3.1) en parcourant, par exemple, l'arête (1 – 2) du point $(s_1 = 1, s_3 = 0)$ au point $(s_1 = cte, s_3 = 0)$ (première contribution intégrale) puis en partant de $(s_1 = cte, s_3 = 0)$ et progressant le long de la droite $s_1 = cte$ (parallèle au système diphasique huile/gaz) vers le point (s_1, s_3) (deuxième contribution intégrale). La fonction $P_c^g(s_1, s_3, P)$ est ainsi entièrement déterminée, soit :

$$\begin{aligned} P_c^g(S_1, S_3, P) &= \int_1^{S_1} \left[f_1(\sigma, 0, P) \frac{\partial P_c^{12}}{\partial S_1}(\sigma, 0) + f_3(\sigma, 0, P) \frac{\partial P_c^{32}}{\partial S_1}(\sigma, 0) \right] d\sigma \\ &+ \int_0^{S_3} \left[f_1(S_1, \sigma, P) \frac{\partial P_c^{12}}{\partial S_3}(S_1, \sigma) + f_3(S_1, \sigma, P) \frac{\partial P_c^{32}}{\partial S_3}(S_1, \sigma) \right] d\sigma \end{aligned} \quad (2.11)$$

Une expression de P_c^g en un point précis (s_1, s_3) de \mathbb{T} est obtenue par intégration suivant une courbe \mathcal{C} (pour une valeur donnée de pression globale p) (2.11). Il est possible d'arriver au même point (s_1, s_3) en suivant d'autres chemins. L'expression de la pression capillaire globale est simplifiée pour $s_3 = 0 \Rightarrow f_3(s_1, 0, p) = 0$ i.e. on retrouve la définition évoquée précédemment en système diphasique (cf. Section 1.4.2).

2.3 Construction des données triphasiques satisfaisant la condition de « différentielle totale »

Nous présentons un algorithme permettant de prolonger les relations diphasiques connues sur la totalité du diagramme [Chavent and Jaffré 1986] et [Chavent and Salzano 1985]. En pratique, les données accessibles en entrée (cf. Section 2.2) sont celles des deux systèmes diphasiques. Ainsi, pour le système diphasique (1 – 2), les données supposées connues sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} kr_1^{12}(s_1), kr_2^{12}(s_1) \\ B_1(p), B_2(p) \\ P_c^{12}(s_1) \end{array} \right. \implies \left\{ \begin{array}{l} d^{12}(s_1, p) = \sum_j kr_j^{12}(s_1) d_j(p) \\ f_j^{12}(s_1, p) = kr_j^{12}(s_1) \frac{d_j(p)}{d^{12}(s_1, p)} \end{array} \right. \quad j = 1, 2 \quad (2.12)$$

De la même manière, les relations suivantes permettent de décrire le système diphasique (3 – 2), soit :

$$\left\{ \begin{array}{l} kr_3^{32}(s_3), kr_2^{32}(s_3) \\ B_3(p), B_2(p) \\ P_c^{32}(s_3) \end{array} \right. \implies \left\{ \begin{array}{l} d^{32}(s_3, p) = \sum_j kr_j^{32}(s_3) d_j(p) \\ f_j^{32}(s_3, p) = kr_j^{32}(s_3) \frac{d_j(p)}{d^{32}(s_3, p)} \end{array} \right. \quad j = 3, 2 \quad (2.13)$$

L'objectif est donc, à partir des relations d'entrées (2.12), (2.13) de déterminer :

$$\left\{ \begin{array}{l} kr_j \\ f_j \\ d \end{array} \right. \quad \text{tel que} \quad \left\{ \begin{array}{l} d(s_1, s_3, p) = \sum_j kr_j(s_1, s_3) d_j(p) \\ f_j(s_1, s_3, p) = kr_j(s_1, s_3) \frac{d_j(p)}{d(s_1, s_3, p)} \\ \sum_j f_j(s_1, s_3, p) = 1 \end{array} \right. \quad j = 1, 2, 3 \quad (2.14)$$

2.4 Discrétisation du domaine triphasique et paramètres d'entrée

Dans l'approche proposée [Chavent and Jaffré 1986], les données partiques nécessaires à l'étude des hydrosystèmes souterrains sont celles des systèmes diphasiques gaz/huile et eau/huile. Lors de l'initialisation, le modèle capillaire de Van Genuchten (1.14) ainsi que le modèle de perméabilité relative de Mualem-Van Genuchten (1.19), (1.20) ont été retenus. Chaque sable testé associe donc un couple de paramètre (α, m) caractérisant le milieu poreux.

Concernant les paramètres fluides, la phase huile est entièrement composée de TCE, le gaz est composé uniquement d'air et l'eau est prise à $T = 20^\circ C$. Le tableau ci-dessous résume les paramètres en entrée, les trois fluides étant pris ici comme incompressibles (cf. Tab. 2.1).

2.4.1 Discrétisation du domaine triphasique

La discrétisation du domaine triphasique (cf. Fig. 2.1) sera prise uniforme ; chaque frontière étant subdivisée en NS intervalles égaux tel que $\Delta S = 1/NS$.

Symbole	Valeur	Description	Unité
α_{H1F}	0.0001	Paramètre α de Van Genuchten, sable fin	$[Pa^{-1}]$
m_{H1F}	0.93	Paramètre m de Van Genuchten, sable fin	$[-]$
α_{H2F}	0.0015	Paramètre α de Van Genuchten, sable moyen	$[Pa^{-1}]$
m_{H2F}	0.63	Paramètre m de Van Genuchten, sable moyen	$[-]$
μ_1	1, 2	Viscosité dynamique de l'eau	$[\times 10^{-3} Pa.s]$
μ_2	0, 55	Viscosité dynamique de l'huile	$[\times 10^{-3} Pa.s]$
μ_3	0, 015	Viscosité dynamique du gaz	$[\times 10^{-3} Pa.s]$
σ_{13}/σ_{32}	2.5	Tension superficielle adimensionnelle gaz/huile	$[-]$
σ_{13}/σ_{12}	2.1	Tension superficielle adimensionnelle eau/huile	$[-]$
B_1	1	Facteur de volume pour l'eau	$[-]$
B_2	1	Facteur de volume pour l'huile	$[-]$
B_3	1	Facteur de volume pour le gaz	$[-]$

TAB. 2.1 – Paramètres d'entrée relatifs à l'interpolation des variables secondaires triphasiques

Chaque point de la triangulation (\mathcal{T}) est donc défini de la façon suivante :

$$\begin{cases} (s_1, s_3) = (s(i), s(j)) \\ (s(i), s(j)) = (i, j)\Delta s \quad \forall (i, j) \in [0, NS] \times [0, NS - i] \end{cases} \quad (2.15)$$

Dans la suite, les fonctions dépendant de S_1 et S_3 pourront être notées $f(i, j)$ sur la maillage(\mathcal{T}).

La construction des données triphasiques passe par la détermination des trois perméabilités triphasiques $\forall (s_1, s_3) \in [0, 1]$ et $s_1 + s_3 \leq 1$. Nous allons décrire par étape la construction de ces données triphasiques. A partir des données initiales (2.12), (2.13), des conditions aux frontières (1 – 2) et (3 – 2) sont imposées sur $kr_j(s_1, s_3)$ et $f_j(s_1, s_3, p)$, c'est l'étape d'initialisation.

2.5 Méthode de résolution par optimisation

Dans cette partie, nous décrivons brièvement la méthode utilisée pour résoudre le problème d'estimation de paramètres. Deux approches sont proposées en annexe sections A.4, A.5. La première consiste à construire un problème d'optimisation dont l'inconnue est la mobilité globale d . Cette approche a été utilisée par [Chavent and Jaffré 1986] pour construire les perméabilités relatives triphasiques satisfaisant la condition de différentielle totale. Nous proposons une variante consistant à approcher le problème précédent en cherchant directement les perméabilités relatives. L'avantage de cette approche est de ramener le problème initial d'optimisation sous contraintes d'inégalités linéaires (approche en mobilité globale) à un problème d'optimisation sous contraintes de bornes uniquement (approche par flux fractionnaires). Le deuxième avantage de cette approche par flux fractionnaire est de résoudre le problème d'optimisation séquentiellement sur chaque noeud du maillage tout en variant judicieusement les contraintes de bornes. Dans cette section, nous introduisons de manière général la résolution d'un problème d'optimisation sous contraintes et présentons la méthode de résolution employée.

La résolution d'un problème d'estimation de paramètres discrets :

$$\begin{aligned} \min J(v). \\ Av \leq b, \\ v_U \leq u, \\ v_L \leq l, \end{aligned} \quad (2.16)$$

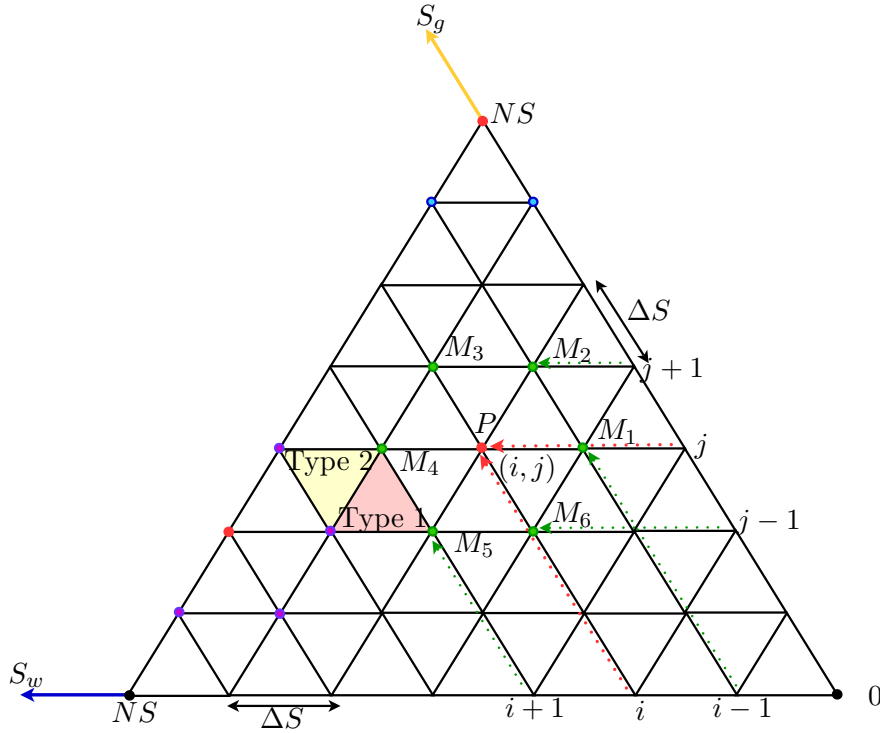


FIG. 2.1 – Diagramme ternaire discrétisé

où v_L sont les degrés de liberté qui doivent être minorés, v_U les degrés de liberté qui doivent être majorés et A la matrice des contraintes d'inégalité appartenant à $\mathbb{R}^{NdC \times NdP}$, NdC étant le nombre de contraintes d'inégalités linéaires et NdP la taille du vecteur v ($NdC < NdP$). Nous commençons par introduire une fonction objectif $J_\mu(v)$ qui prend en compte la contrainte $Av \leq v$ par pénalisation. Nous obtenons ainsi un nouveau problème d'optimisation soumis uniquement à des contraintes de bornes.

$$\begin{aligned} \min J_\mu(v). \\ v_U \leq u \\ v_L \leq l \end{aligned} \quad (2.17)$$

Nous rappelons alors brièvement le principe de la méthode d'optimisation de type quasi-Newton utilisé ici pour résoudre ce problème pénalisé. Comme elle suppose la connaissance du gradient de la fonction objectif J_μ par rapport au paramètre v . Nous renvoyons le lecteur aux sections A.4, A.5 pour les développements mathématiques relatifs à chacune des deux approches et présentant la manière dont est calculé la fonction objectif et son gradient. Les résultats présentés dans la suite ont été obtenus en suivant l'approche par flux fractionnaires.

2.5.1 Le problème pénalisé

Suivant les méthodes de pénalisation classique [Fletcher 1987], nous construisons une nouvelle fonction objectif :

$$J_\mu(v) = J(v) + \mu \sum_i^{NdC} [(Av - b)_i^+]^2, \quad (2.18)$$

et $\mu > 0$ est le paramètre de pénalisation. Le terme $\mu \sum_i^{NdC} [(Av - b)_i^+]^2$ sert à faire augmenter de manière sensible la fonction objectif lorsque les contraintes $Av \leq b$ sont violées. Il a été montré [Luenberger 1969, Luenberger 1973] que lorsque $\forall \mu > 0$, le problème pénalisé admet au moins une solution v_μ , le paramètre de pénalisation étant choisi par essais successifs.

2.5.2 La méthode BFGS

Il s'agit maintenant de résoudre le problème pénalisé (2.17) pour une valeur de paramètre de pénalisation $\mu > 0$ fixée.. C'est un problème d'optimisation d'une fonction non-linéaire J_μ sous contraintes de bornes. Comme le Hessian de J_μ est difficile à calculer et peut être mal conditionné pour certaines valeurs de μ , c'est une méthode d'optimisation du premier ordre de type quasi-Newton qui a été choisie. Elle est basée sur une approximation quadratique de la fonction j_μ à minimiser :

$$J_\mu(v_k) + \nabla J_\mu(v_k)^T (v - v_k) + \frac{1}{2} (v - v_k)^T M_k (v - v_k) \quad (2.19)$$

où v_k est l'itéré courant et M_k est une matrice symétrique définie positive qui approche le hessian de la fonction J_μ . L'algorithme de la méthode de quasi-Newton est le suivant :

- **Etape 0** : Initialisations
 - On choisit un itéré initial v^0
 - une tolérance d'arrêt ε
 - une matrice symétrique définie positive initiale M^0 .
 - On calcule $g^0 \stackrel{\text{def}}{=} \nabla J_\mu(v^0)$.
 - Itéré $k = 0$
- **Etape 1** : Critère d'arrêt
 - Si $\|g^k\| < \varepsilon$ on s'arrête.
- **Etape 2** : Calcul du pas de la nouvelle descente
 - On résout le système linéaire $M_k d^k = -g^k$.
- **Etape 3** : Calcul du pas à l'aide d'une recherche linéaire (Wolfe)
 - A partir de $t = 1$, on cherche t tel que
 - (W₁) $J_\mu(v^k + td^k) \leq J_\mu(v^k) + w_1 t g_k^T d^k$
 - (W₂) $\nabla J_\mu(v^k + td^k)^T \geq w_2 g_k^T d^k$
- **Etape 4** : Mise à jour
 - $v^{k+1} = v^k + td^k$
 - $s_k = v^{k+1} - v^k$
 - $g^{k+1} = \nabla J_\mu(v^{k+1})$
 - $y_k = g^{k+1} - g^k$
 - $$M^{k+1} = M^k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} - \frac{M^k s_k s_k^T M^k}{s_k^T M^k s_k}$$
 - Retour à l'étape 1

Remarques : Les règles concernant la recherche linéaire de Wolfe s'interprètent de la manière suivante : on demande que J_μ diminue suffisamment (W₁) et d'autres part que sa dérivée augmente suffisamment (W₂).

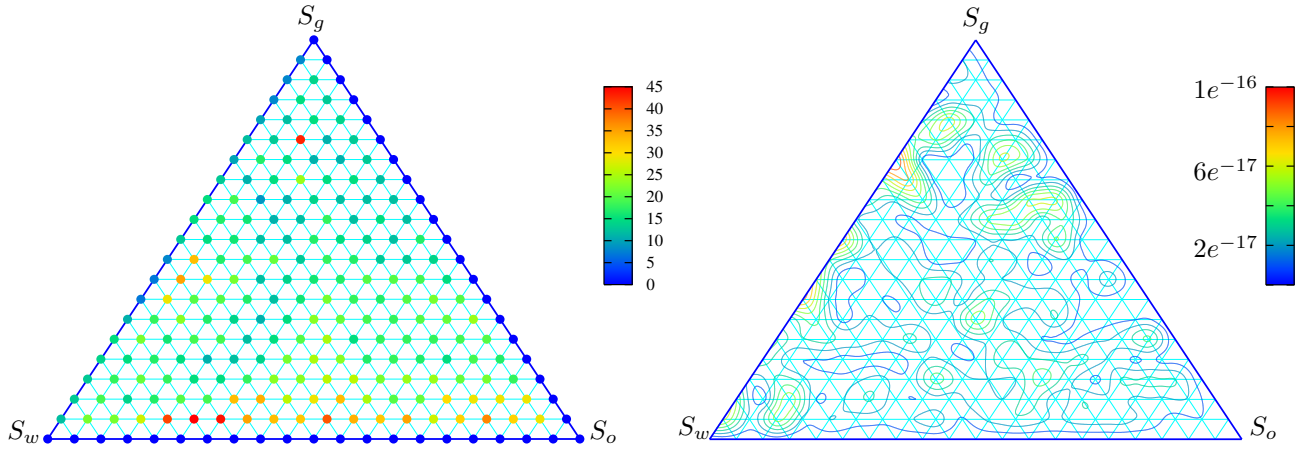


FIG. 2.2 – Nombre d'itération (gauche) et $\sqrt{F_{obj}}$ (droite) obtenus à l'issue de l'étape d'optimisation sur le sable H2F, maillage $\Delta S = 0.05$.

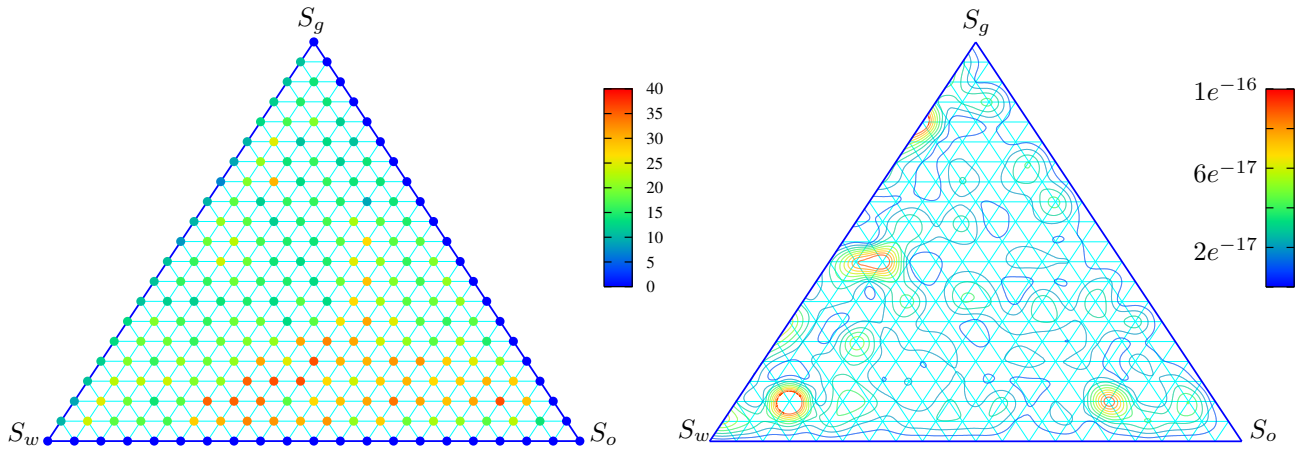


FIG. 2.3 – Nombre d'itération (gauche) et $\sqrt{F_{obj}}$ (droite) obtenus à l'issue de l'étape d'optimisation sur le sable H1F, maillage $\Delta S = 0.05$.

Par ailleurs, dans le cadre des méthodes de quasi-Newton, plusieurs formules de mise à jour de la matrice M_k existent. Celle que nous avons choisie ici est appelée formule de *Broyden Fletcher Goldfarb Shanno* (BFGS). En pratique, nous avons utilisé la méthode L-BFGS-B (*a Limited memory BFGS algorithm for bound constrained optimization*) [Byrd et al. 1994] qui présente l'avantage de pouvoir résoudre de grand systèmes non-linéaire avec un stockage réduit du Hessien à travers les vecteurs s_k et y_k . La fonction objectif est construite sur la base de l'approche en flux fractionnaire pour le côté eau/gaz et sur l'ensemble du diagramme. Nous avons par ailleurs utilisé une technique de gestion des contraintes actives pour traiter les contraintes de bornes en utilisant la notion de dérivées directionnelles (cf. Fig. A.1). Nous présentons dans les figures 2.2 et 2.3 le comportement du solveur au cours de l'optimisation (nombre d'itération par noeud) et la valeur de la fonction objectif à l'issue de l'interpolation.

2.6 Initialisation de l'algorithme d'interpolation

La première étape (cf. Section A.1) consiste à affecter sur les arêtes eau/huile et gaz/huile, les pressions capillaires obtenues par normalisation de Parker (A.7) et les perméabilités relatives des phases mouillante et non mouillante. Le système eau/gaz est entièrement déterminé par optimisation. L'étape d'initialisation est résumée en annexe (cf. Section A.1). L'entrée de valeurs discrètes de pression capillaire garantit la continuité de la courbe résultante. L'utilisation des paramètres analytiques de Van Genuchten nécessite une étape de régularisation. En effet, lorsque la saturation effective de la phase mouillante est nulle, la dérivée de la pression capillaire est infinie (branche asymptotique). Chaque courbe capillaire est régularisées pour chacun des

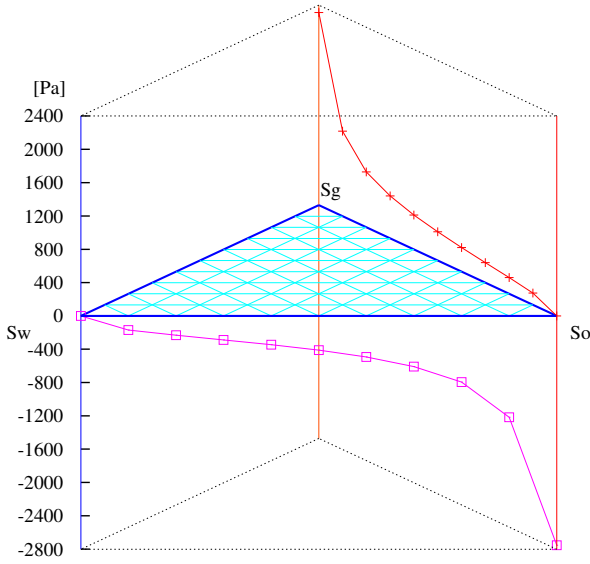


FIG. 2.4 – Pressions capillaires huile/gaz et eau/huile d'entrée, sable H2F, maillage $\Delta S = 0.1$

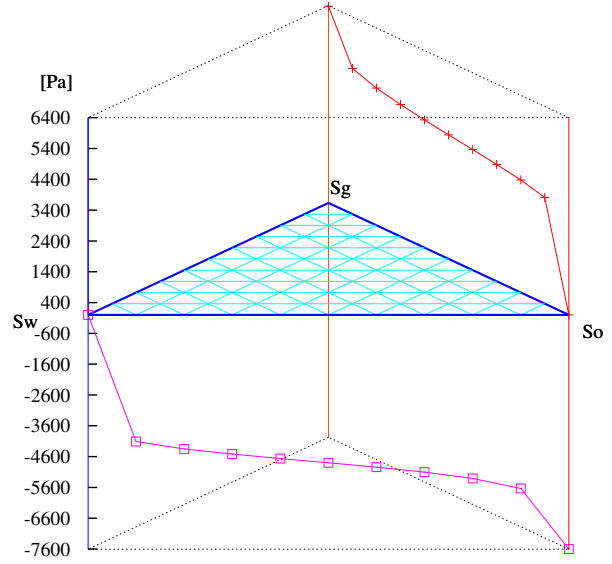


FIG. 2.5 – Pressions capillaires huile/gaz et eau/huile d'entrée, sable H1F, maillage $\Delta S = 0.1$

deux sables et sont affectées sur leur arêtes respectives (cf. Figs. 2.4, 2.5). Le nombre de maille suivant S_1 et S_3 est pris égal à 10 soit $\Delta S = 0.1$. La pression capillaire eau/huile a été prise comme l'opposée de la pression capillaire physique huile/eau ce qui explique les valeurs négatives. Cette convention de construction est celle adoptée par Chavent. La fonction est donc monotone croissante lorsque la saturation effective en eau croît (2.6). Les deux figures (cf. Figs. 2.4, 2.4) montrent l'effet du changement des paramètres α et m sur la forme des courbes capillaires représentées. En effet, le paramètre m (ou n) contrôle la « courbure » tandis que j détermine « l'élévation » du plateau de pression capillaire. Les figures qui suivent (cf. Figs. 2.6, 2.7) montrent l'affectation des courbes de perméabilités relatives sur les frontières eau/huile et gaz/huile pour chacun des sables. La forme de ces courbes conditionne le déplacement des fluides dans le milieu poreux.

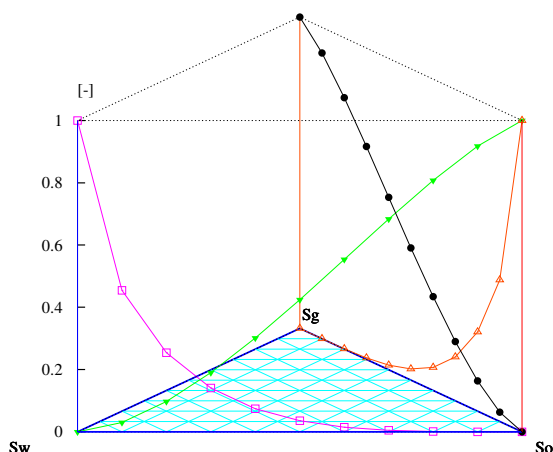


FIG. 2.6 – Perméabilités relatives huile/gaz et eau/gaz d’entrée, sable H2F, $\Delta S = 0.1$

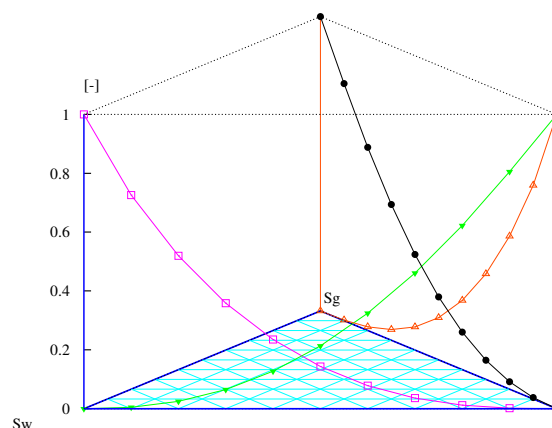


FIG. 2.7 – Perméabilités relatives huile/gaz et eau/gaz d’entrée, sable H1F, $\Delta S = 0.1$

2.7 Résolution des flux fractionnaires respectant la condition de différentielle totale (DT)

La résolution des flux fractionnaires DT est détaillée en sections A.2, A.3. La détermination des trois flux nécessite d’imposer le flux fractionnaire en huile (mouillabilité intermédiaire), les deux autres étant déduites de la condition de différentielle totale (A.8).

Deux approches ont été testées concernant le choix du modèle de flux fractionnaire pour l’huile. La première consiste à partir du modèle de Stone et construire la perméabilité triphasique en huile à partir des perméabilités relatives des systèmes eau/huile et gaz/huile (A.5). La seconde consiste à partir d’un modèle d’interpolation (A.6) linéaire et à construire directement le flux fractionnaire en huile. Ces deux approches conduisent à des flux fractionnaires en eau et en gaz différents.

Pour le choix de f_2 dans l’étape 2 (cf. Section A.2), le modèle de Stone est utilisé.

Les flux fractionnaires DT ont été résolus pour les sables H1F et H2F. Les solutions respectant la condition de différentielle totale (cf. Figs. 2.9, 2.10) sont confrontées à celles obtenues par l’approche classique dite « de Stone ». Les flux fractionnaires et les perméabilités relatives triphasiques (cf. Figs. 2.13, 2.12) sont représentées par des isovaleurs de 0.1 à 0.9.

Résultats : Pour les deux sables, l’approche DT et celle de Stone conduisent au même flux fractionnaire en huile par construction. Dans la figure (cf. Fig. 2.9), le flux fractionnaire DT en eau est sur-estimé par rapport à celui obtenu par l’approche de Stone (40%, $S_1 = 0.9$, $S_3 = 0.05$). Par ailleurs, le modèle de Stone sur-estime le flux fractionnaire en gaz par rapport à DT (50% supérieur au point $s_1 = 0.9$, $s_3 = 0.05$).

Ces différences sont d’autant plus marquées que la saturation effective en huile diminue. Concernant le sable H1F, les solutions des flux en eau et en gaz (cf. Fig. 2.10) présentent le même type de différences également accentuées au voisinage du système diphasique gaz/huile

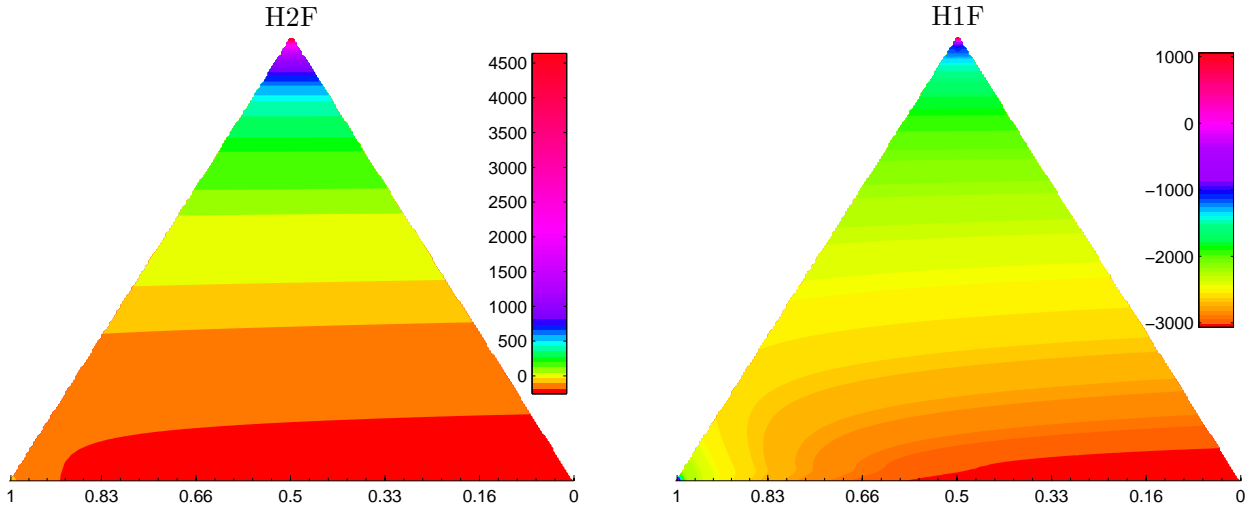


FIG. 2.8 – Pression capillaire globale P_c^g [Pa] obtenue pour les sable H1F (droite) et H2F (gauche), maillage $\Delta S = 0.05$.

(50% plus importante au point $s_1 = 0.75$, $s_3 = 0.15$).

Par ailleurs, dans le modèle utilisant la condition de différentielle totale, les isovaleurs des flux fractionnaires f_1 et f_3 se distribuent plus uniformément sur le domaine ternaire de telle sorte que la valeur maximale 1 est atteinte de manière plus « douce » que dans le modèle de Stone.

A l'issue de la résolution des flux fractionnaires, la pression capillaire globale P_c^g peut être calculée suivant la relation (2.11). Les résultats obtenus pour les deux sables sont présentés dans la (cf. Fig. 2.8). On constate que les deux surfaces obtenues augmentent très rapidement à l'approche du sommet en gaz. Par ailleurs, on remarque que les valeurs obtenus vers le sommet en huile sont particulièrement régulières. Cette constatation permet d'envisager un comportement plus régulier des gradients associant la pression capillaire globale (4.10). Ce point sera plus largement développé dans le chapitre 3 lors de l'évaluation des quantités $P_c^g - P_c^{12}$ et $P_c^g - P_c^{32}$ (cf. Section 3.7.2).

2.8 Résolution du champ de perméabilité triphasique construit sur la condition de différentielle totale (DT)

La résolution des perméabilités peut être menée de deux manières. La première approche consiste à résoudre le troisième système diphasique eau/gaz en travaillant sur une variable commune aux deux perméabilités, i.e. à chercher la mobilité d^{13} du système eau/gaz puis résoudre la mobilité globale sur l'ensemble du triangle. Cette approche a été développée par [Chavent and Salzano 1985; Chavent and Jaffré 1986] et développée en annexe A.4 et A.5. La deuxième approche que nous avons retenue consiste à travailler directement sur les perméabilités en construisant une fonction objectif à partir de la définition des flux fractionnaires et en imposant certaines contraintes de régularité et de monotonie sur les variables d'optimisation.

2.8. Résolution du champ de perméabilité triphasique construit sur la condition de différentielle totale (DT)

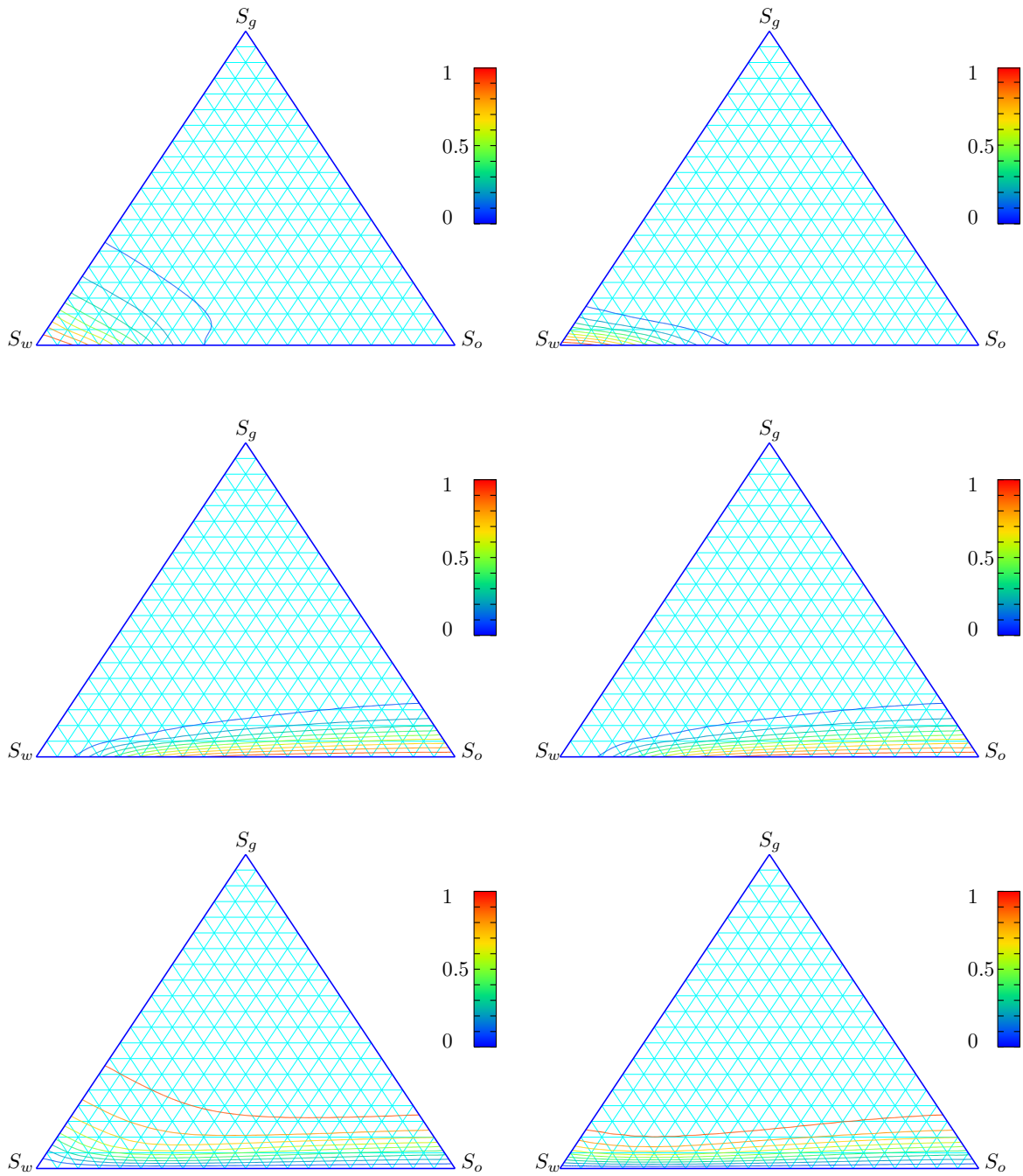


FIG. 2.9 – Flux fractionnaires DT pour le sable H2F, eau (noté (w) en haut), huile (noté (o) en milieu) et gaz (noté (g) en bas) satisfaisant la condition de « différentielle totale » (à gauche) et ceux obtenu par le modèle de Stone à partir des perméabilités relatives triphasiques (à droite), maillage $\Delta S = 0.05$.

Approche en flux fractionnaire

C'est cette deuxième approche en flux fractionnaire qui a été retenue car elle permet de travailler directement sur les variables d'optimisation. La fonction objectif a été construite au sens des moindres carrés. De manière générale, la méthode consiste à partir d'une série de

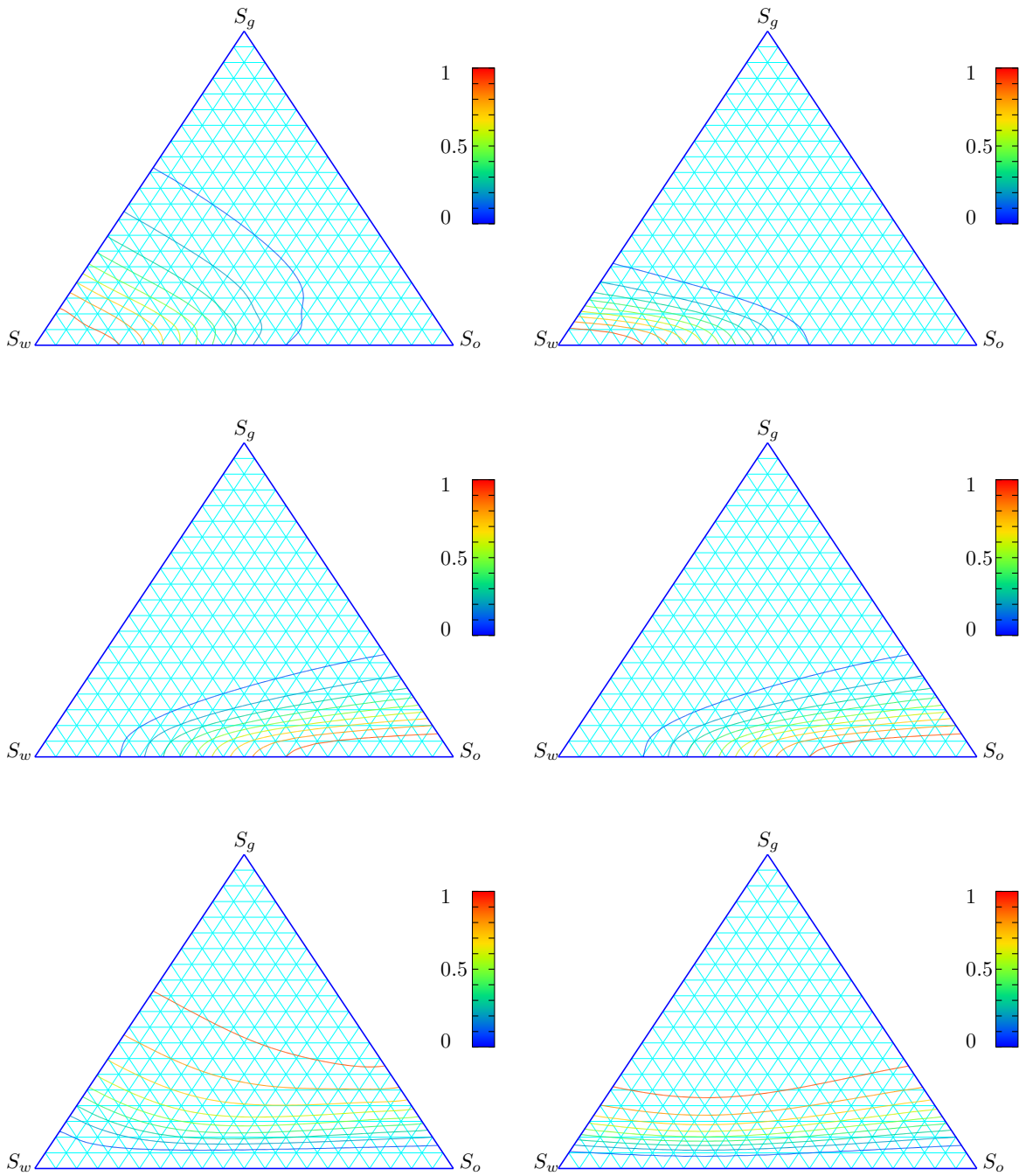


FIG. 2.10 – Flux fractionnaires DT pour le sable H1F, eau (noté (w) en haut), huile (noté (o) en milieu) et gaz (noté (g) en bas) satisfaisant la condition de « différentielle totale » (à gauche) et ceux obtenus par le modèle de Stone à partir des perméabilités relatives triphasiques (à droite), maillage $\Delta S = 0.05$.

données observées $(y_i)_{i=1,N}$ (N étant le nombre de noeuds) et chercher à minimiser la somme quadratique des déviations des mesures aux prédictions d'une fonction $f(x_i, \theta_j)$. Ainsi, sur N mesures, les paramètres d'ajustement $(\theta_j)_{j=1,M}$ optimaux (M , nombre de paramètres) seront

ceux qui minimisent la quantité suivante :

$$S(\theta) = \sum_{i=1}^N (y_i - f(x_i, (\theta_j)_{j=1,M}))^2 = \sum_{i=1}^N r_i^2(\theta)$$

où les $r_i(\theta)$ sont les résidus (écarts entre la mesure y_i et le modèle $f_i(\theta_j)$). A chaque déviation, un « poids » w_i peut être associé. Ils correspondent à l'inverse d'une variance lorsque les données observées sont entachées d'un bruit qui suit une distribution de type Loi normale (très courant). La quantité minimisée est alors appelée « khi-deux » (loi statistique) :

$$\chi^2(\theta) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{y_i - f(x_i, (\theta_j)_{j=1,M})}{\sigma_i} \right)^2 = \sum_{i=1}^N 1_i (y_i - f(x_i, (\theta_j)_{j=1,M}))^2$$

Dans le cas qui nous intéresse, les paramètres d'optimisation recherchés sont les deux perméabilités relatives kr_1 et kr_3 . Les mesures observées y_i correspondent aux prolongement des flux fractionnaires triphasiques déterminés dans l'étape 3 (cf. Section A.3) sur l'arête gaz/eau soit f_1 et f_3 . Chaque flux fractionnaire gaz/eau associe une perméabilité relative gaz/eau, il y a donc autant de paramètres recherchés que de valeurs observées $f_{j,i}$, c.a.d $M = N$. L'estimation de l'écart-type σ_i du bruit qui affecte chaque mesure sera $\sigma_i = \sqrt{2}$. La fonction objectif associe deux termes traduisant l'écart quadratique des flux fractionnaires $f_{1,3}$ au modèle théorique $\hat{f}_{1,3}$:

$$\hat{f}_{j,i} = \frac{d_j kr_{j,i}}{d_1 kr_{1,i} + d_3 kr_{3,i}}$$

soit le problème de minimisation $P(kr_{1,3})$:

$$\min_{j=1,3} [P(kr_j)] \quad \text{tel que} \quad F_{obj} = \frac{1}{2} \sum_{j=1,3} \sum_{i=1}^N (f_{j,i} - \hat{f}_{j,i})^2 \quad \text{avec} \quad kr_{1,3} \in [0, 1]$$

Dans la formulation générale, plus l'incertitude au point d'observation est grande, plus le poids est important. Ici le poids 1_i a été « également » distribué suivant les déviations des phases eau et gaz. Afin d'alléger le problème d'optimisation, nous avons préféré résoudre le problème précédent de manière séquentielle en considérant que :

$$\min_{1,3} [P(kr_j)] \approx \bigcup_{i=1,N} \min_{1,3} [P_i(kr_{j,i})]$$

L'avantage de cette reformulation est d'optimiser un nombre identique de paramètres (deux) quel que soit le nombre de noeuds. Dans la première formulation, l'augmentation du nombre de noeud rend le problème P de plus en plus complexe à résoudre. Concernant la résolution, une méthode de type *Quasi-Newton*, L-BFGS-B [Byrd et al. 1994] a été utilisée pour résoudre les problèmes $P_i(kr_{j,i})$ en chacun des noeuds. Afin d'orienter la minimisation vers une solution se rapprochant d'un modèle capillaire connu ($\tilde{kr}_{1,3}$) et garantir une solution monotone, chaque problème P_i est pénalisé et borné. Le nouveau problème contraint et pénalisé est noté \tilde{P}_{ϵ_i} . En remarquant que la flux fractionnaire en gaz resp. en eau est croissante resp. décroissante avec la

saturation en gaz (indice i), il vient (avec \bar{j} : la phase complémentaire) :

$$\tilde{P}\epsilon_{i \in [1, N]} \begin{cases} F_{obj, i} = \frac{1 - \epsilon}{2} \sum_{1,3} (f_{j,i} - \hat{f}_{j,i})^2 + \epsilon \sum_{1,3} (kr_{j,i} - \tilde{k}r_{j,i})^2 \\ \frac{\partial F_{obj, i}}{\partial kr_j} = (1 - \epsilon) \left[(f_{j,i} - \hat{f}_{j,i}) \left[\frac{\hat{f}_{j,i}^2 - f_{j,i}}{kr_{j,i}} \right] + (f_{j,i} - \hat{f}_{j,i}) \frac{d_j \hat{f}_{j,i}^2}{d_{\bar{j}} kr_{\bar{j}, i}} \right] \\ \quad + 2\epsilon [kr_{j,i} - \tilde{k}r_{j,i}] \\ kr_{1, min} \leq kr_{1,i} \leq kr_{1, i-1} \\ kr_{3, i-1} \leq kr_{3,i} \leq kr_{3, max} \end{cases} \quad (2.20)$$

Plus la saturation en gaz augmente et plus le problème $\tilde{P}\epsilon$ est contraint, la solution au premier noeud étant simplement bornée par $kr_{j, min}$ et $kr_{j, max}$.

Estimation des perméabilités DT sur la frontière eau/gaz

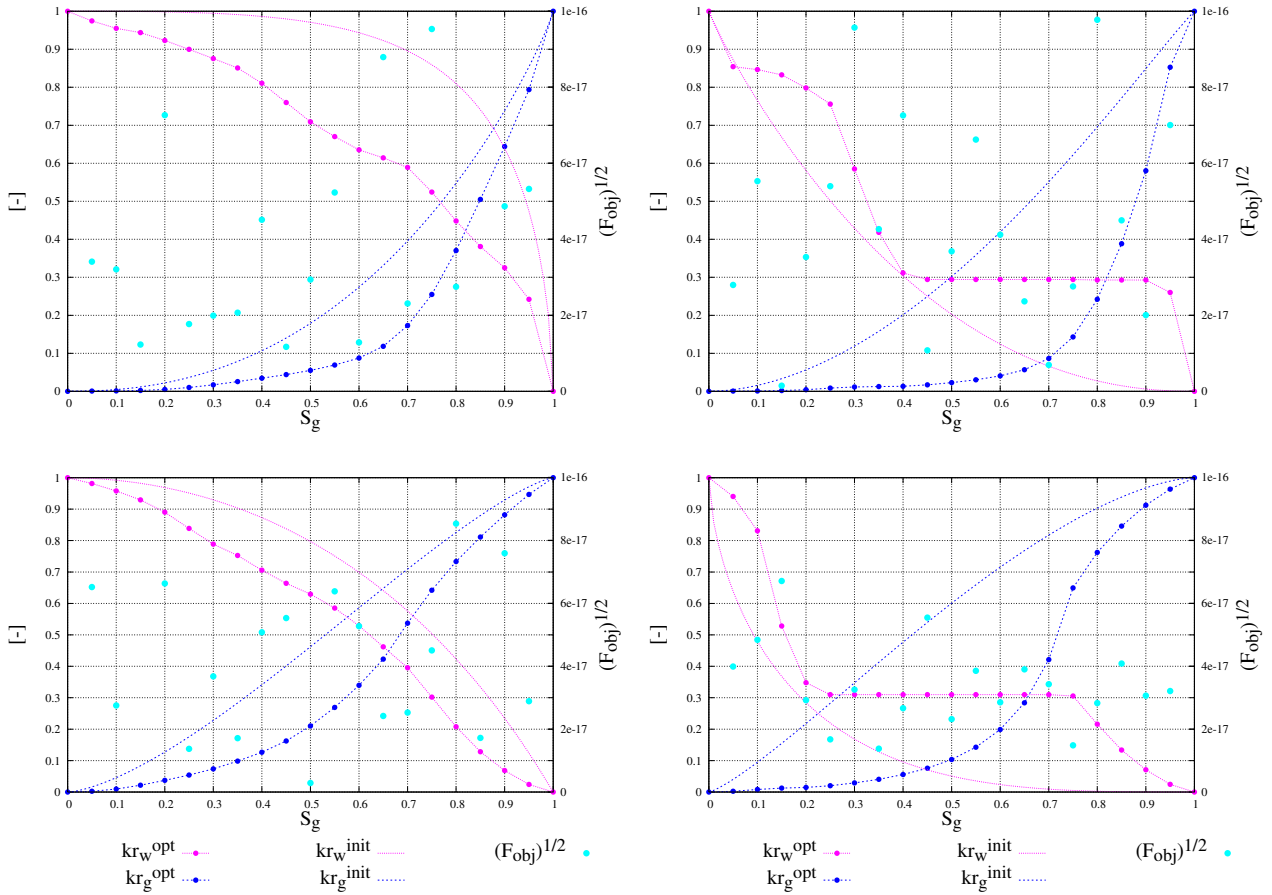


FIG. 2.11 – Estimation des perméabilités DT sur l'arête gaz/eau, solutions pour le sable H1F (figures en haut) et le sable H2F (figures en bas), maillage $\Delta S = 0.05$.

Le champ de perméabilité triphasique est résolu lors de l'étape 4 et 5 sections A.4, A.5. Dans l'étape 4, les perméabilités relatives diphasiques en eau et en gaz sont obtenues par optimisation sur l'arête gaz/eau (droite d'équation $S_w + S_g = 1$).

Les vecteurs qui permettent d'initialiser l'optimisation kr_w^0 et kr_g^0 dans le système gaz/eau ont été testés en partant du modèle capillaire de Van Genuchten. Deux couples de vecteurs initiaux sont présentés pour chacun des deux sables testés, le premier en partant du modèle de Van Genuchten ; le deuxième en s'en écartant. En trait continu est figuré le vecteur issu de l'étape d'optimisation gaz/eau, en trait pointillé est figuré le vecteur initial.

Résultats : On remarque que le choix des valeurs initialisant le problème d'optimisation conditionne l'allure des courbes de perméabilités obtenues. En effet, en partant du modèle initial de perméabilité relative (eau/huile et gaz/huile) comme valeurs initiales, les perméabilités estimées (en eau) présentent des plateaux correspondant à la contrainte maximale (cf. Fig. 2.11) (figures de droite haut et bas). En s'écartant du modèle initial, les perméabilités estimées sont régulières et strictement monotones (figures de gauche haut et bas).

Il est intéressant de remarquer la prise en compte simultané des trois fluides à travers les facteurs de volumes, les viscosités dans la détermination des perméabilités relatives à l'intérieur du triangle, ainsi que la dépendance des données sur les arêtes du diagramme (pressions capillaires huile/eau et gaz/huile). Dans la suite, les solutions régulières et monotones (pas de points singuliers) seront retenues. Il est possible de tenir compte utilement d'informations éventuelles sur le côté $S_w + S_g = 1$ pour choisir convenablement les vecteurs de départ et les paramètres d'optimisation. Ces paramètres (poids) permettent de « forcer » les vecteurs optimisés à se rapprocher d'un modèle de perméabilité connu.

Estimation des perméabilités triphasiques DT sur le diagramme T

Les valeurs de perméabilités relatives et de mobilité eau/gaz sont connues au terme de la résolution du système précédent (2.20). Nous connaissons également les flux fractionnaires sur l'ensemble du domaine triphasique (A.11) ainsi que les mobilités globales de chaque système diphasique (frontière). Nous pouvons donc estimer les perméabilités triphasique DT sur l'ensemble du triangle en définissant un nouveau problème d'optimisation sous contraintes. La fonction objectif associée est introduite de la même manière que dans la section précédente. En ajoutant une troisième phase : l'huile, le nouveau problème noté \tilde{Z}_i est résolu sur \mathbb{T} en chaque noeud i par la méthode L-BFGS-B [Byrd *et al.* 1994]. Un procédé de minimisation séquentielle a été retenu. Nous donnons la fonction objectif au sens des moindre carré (ici, $k = 1$ sera associé à

l'eau, $k = 2$, à l'huile et $k = 3$ au gaz) :

$$\tilde{Z}_{i \in [1, N]} \begin{cases} \hat{f}_{k,i} = \frac{d_k k r_{k,i}}{\sum_k d_k k r_{k,i}} \\ K_{obj,i} = \frac{1}{3} \sum_k (f_{k,i} - \hat{f}_{k,i})^2 \\ \frac{\partial F_{obj,i}}{\partial k r_k} = \frac{2}{3} \left[(f_{k,i} - \hat{f}_{k,i}) \left[\frac{\hat{f}_{k,i}^2 - \hat{f}_{k,i}}{k r_{k,i}} \right] + (f_{k+1,i} - \hat{f}_{k+1,i}) \frac{d_k \hat{f}_{k+1,i}^2}{d_{k+1} k r_{k+1,i}} \right] + \\ \frac{2}{3} \left[(f_{k+2,i} - \hat{f}_{k+2,i}) \frac{d_k \hat{f}_{k+2,i}^2}{d_{k+2} k r_{k+2,i}} \right] \end{cases} \quad (2.21)$$

Résultats : Les isovaleurs sont présentées en figure 2.12 et 2.13 pour des niveaux séparés de 10%. Les champ de perméabilités triphasiques DT sont comparées à ceux obtenus par l'approche de Stone [?].

A noter que le modèle de Stone ne satisfait pas la condition de différentielle totale et qu'il ne tient compte que de la saturation de la phase mouillante (isovaleurs parallèles). Les valeurs de perméabilités en huile sont sensiblement les même puisqu'elles tiennent compte du modèle initiale (Stone) pris lors de la résolution des flux fractionnaires. Nous avons cependant intégré la perméabilité en huile dans l'estimation afin de « faciliter » la recherche des solutions en eau et en gaz.

La construction des contraintes du problème \tilde{Z} basé sur la notion de dérivée directionnelles (cf. Fig. A.1) est présentée en annexe (cf. Section A.5). L'interprétation des résultats montre que les conditions de régularités et de stricte monotonie sont vérifiées (voir figures 2.12 et 2.13).

La solutions se prolongent correctement et de manière « douce » sur les frontières imposées. On constate que dans certains secteurs du diagramme ternaire, la perméabilité DT en gaz se comporte comme celle de Stone (valeurs de saturation effective en eau et en gaz inférieurs à 50%). La perméabilité DT en eau montre un comportement fortement non linéaire lié au modèle de perméabilité obtenu sur le système eau/gaz et aux flux fractionnaires DT.

2.9 Conclusion

La formulation approchée proposée ici et introduite par [Chavent and Jaffré 1986] permet une interpolation des variables secondaires *DT-compatibles* par optimisation. Ces variables nous permettraient de traiter les écoulements triphasiques compressibles en utilisant une formulation en pression globale. Nous avons calculé ces variables secondaires pour deux sables types H1F et H2F couramment utilisés. A partir des relations constitutives proposées, i.e. les courbes de perméabilité et les pressions capillaires sur les frontières gaz/huile et eau/huile, nous avons pu construire des flux fractionnaires construit à partir de la condition de différentielle totale. A l'issue de cette étape, un modèle de perméabilité relative eau/gaz est déterminé par optimisation et sur la base des flux fractionnaires DT. Le diagramme ternaire \mathbb{T} est ainsi *fermé*. Enfin, les perméabilités triphasiques DT sont déterminées par optimisation en satisfaisant certaines

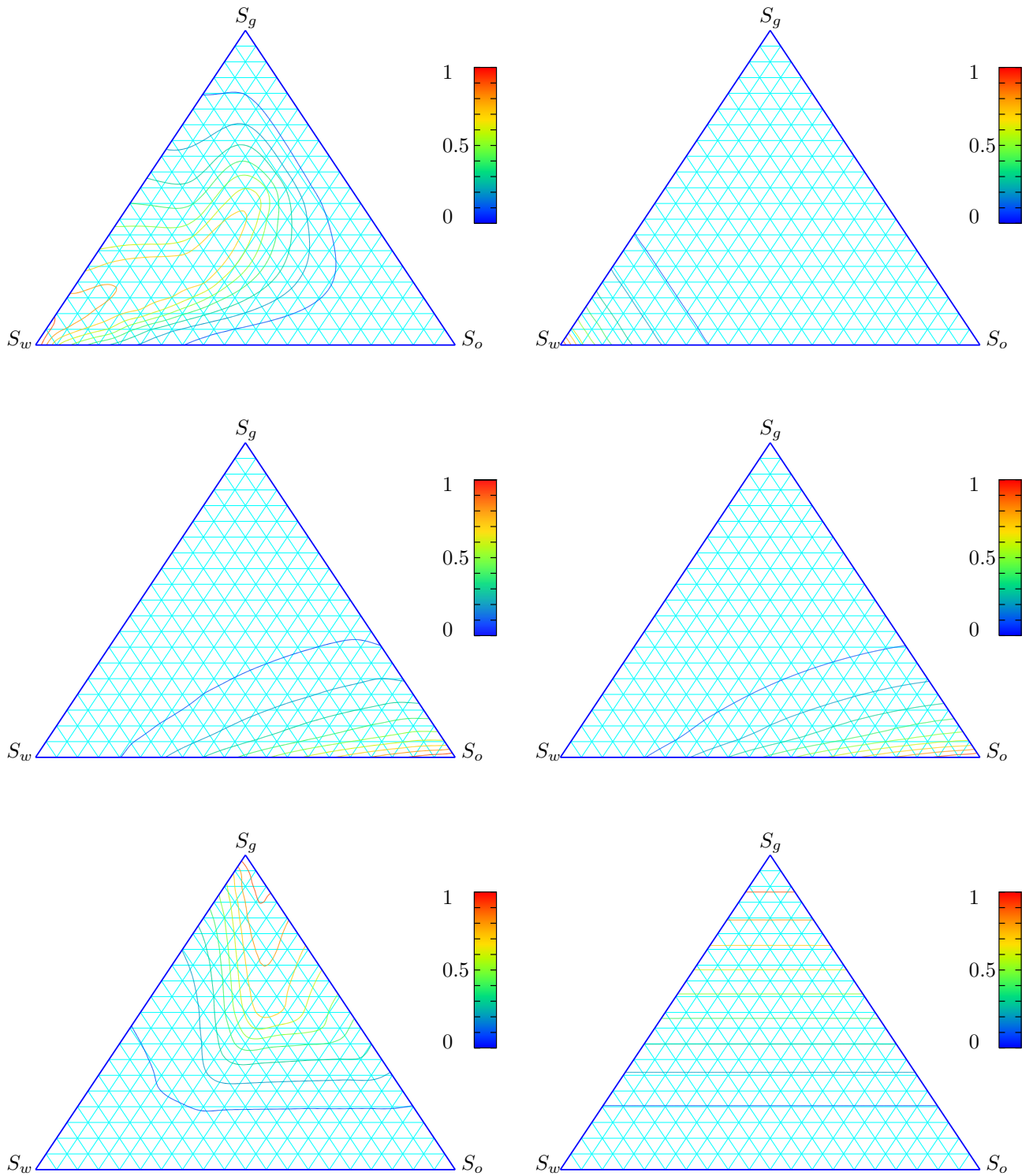


FIG. 2.12 – Perméabilités relatives triphasiques pour le sable H2F, eau (haut), huile (milieu) et gaz (bas) satisfaisant la condition de « différentielle totale » (à gauche) et celles obtenues par le modèle de Stone (à droite), maillage $\Delta S = 0.05$.

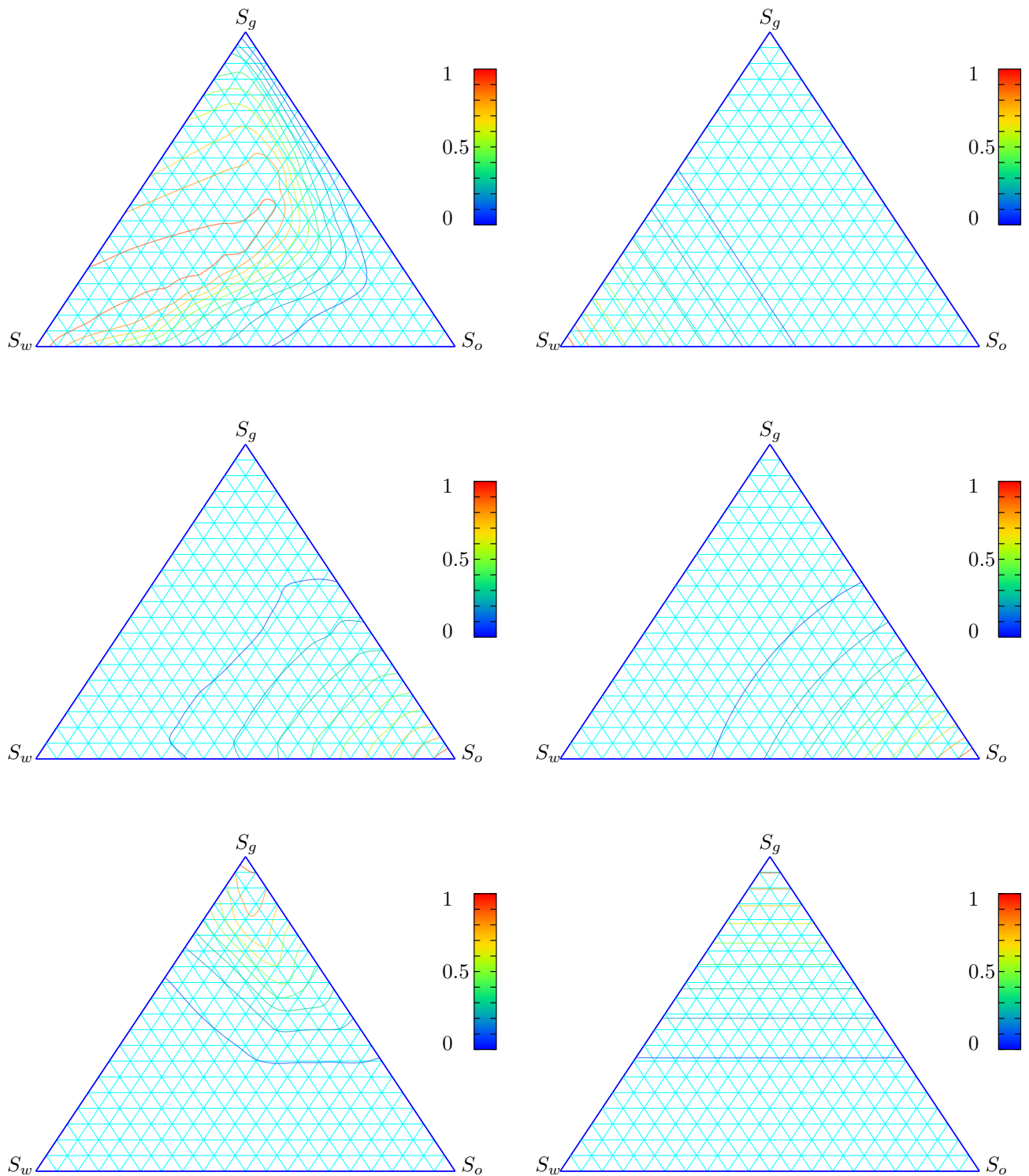


FIG. 2.13 – Perméabilités relatives triphasiques pour le sable H1F, eau (haut), huile (milieu) et gaz (bas) satisfaisant la condition de « différentielle totale » (à gauche) et celles obtenues par le modèle de Stone (à droite), maillage $\Delta S = 0.05$.

contraintes de régularité et de monotonie.

Cependant, l'incorporation de cette approche dans un code numérique peut s'avérer délicate lorsque les données initiales proposent des contrastes importants (hétérogénéités) par rapport à un modèle de référence utilisé pour le « calage » des paramètres d'optimisation. Par ailleurs, contrairement aux données classiquement connues dans l'exploitation des gisements pétroliers (eau/huile et gaz/huile), la modélisation des écoulements dans les aquifères utilise plus couramment des données issues du système diphasique eau/gaz. Par ailleurs, on maîtrise mal le système eau-gaz dans la formulation approchée.

Cette motivation a guidé Guy Chavent [[Chavent 2009](#)] vers l'élaboration d'un nouvel algorithme dont nous donnons le détail de l'implémentation en chapitre 3. L'interpolation des variables secondaires DT est conduite sur le même sable H1F. Une analyse comparative des deux algorithmes est donnée au début du chapitre 4.

Nouvelle formulation exacte de la pression globale en système triphasique

Abstract

We describe the construction of Total Differential (TD) three-phase data for the implementation of the exact global pressure formulation for the modeling of three-phase compressible flow in porous media. This global formulation is preferred since it reduces the coupling between the pressure and saturation equations, compared to phase or weighted formulations. It simplifies the numerical analysis of the problem and boosts its computational efficiency. However, this global pressure approach exists only for three-phase data (relative permeabilities, capillary pressures) which satisfy a TD condition. Such TD three-phase data are determined by the choice of a global capillary pressure function and a global mobility function, which take both saturations and global pressure level as argument. Boundary conditions for global capillary pressure and global mobility are given such that the corresponding three phase data are consistent with a given set of three two-phase data. The numerical construction of global capillary pressure and global mobility functions by C^1 and C^0 finite element is then performed using bilaplacian and laplacian interpolation. Examples of the corresponding TD three-phase data are given for a compressible and an incompressible case.

Article titled “Three-phase compressible flow in porous media : Total Differential Compatible interpolation of relative permeabilities” and submitted at *Journal of Computational Physics* JCOMP-D-09-00791.

Introduction

The global pressure formulation of porous flow equation was introduced for incompressible two-phase flows independently in [Chavent 1976, Antoncevic and Monahov 1978]. It was generalized by [Chavent and Jaffré 1986] to compressible two and three phase flows under the approximation that the volume factors are evaluated at the new global pressure instead of the corresponding phase pressure. For three-phase flows, this *approached global pressure formulation* was derived under a Total Differential (TD) condition for the three-phase relative permeabilities and capillary pressures. The difficulty in obtaining physically realistic TD data

[Chavent and Salzano 1985, Jégou 1997] has limited the use of the global pressure in numerical simulation codes. Nevertheless, comparisons with other approaches have shown that this formulation simplifies the numerical analysis of the problem and boosts its computational efficiency [Chen et al. 1997, Chen 2005]. Recently a new *exact global pressure formulation* has been developed for compressible two-phase flows [Amaziane and Jurak 2008], and for compressible three-phase flows under the condition that the three-phase data satisfy a *new TD-condition* [Chavent 2009]. In these formulations, the volume factors are evaluated at the corresponding phase pressure - and not at the global pressure as earlier.

Experimental values for three-phase relative permeabilities and capillary pressures are usually known only on the three two-phase edges of the ternary diagram \mathbb{T} , but rarely inside. Three-phase relative permeabilities are usually deduced from these sets of two-phase data by *interpolation formulas* such as introduced by [Stone 1970]. The existence of various interpolation formulas shows that none of these formulas detains the ultimate truth. Taking advantage of this lack of experimental three-phase data, a *new class* of *TD-interpolations* was introduced by [Chavent et al. 2008, Chavent 2009], which allows the use of an exact global pressure formulation. The two degrees of freedom of this class are the *global capillary function* $P_c^g(s, p)$ and the *global mobility function* $d(s, p)$, where s is one saturation point in the ternary diagram and p one global pressure level. We study in this paper the numerical implementation of one member of the above class of TD-interpolation, where the fractional flows and relative permeabilities are obtained by extending P_c^g and d inside the ternary diagram by means of two partial differential equations. We recall first the exact global pressure approach, with the notations and conventions introduced by [Chavent et al. 2008, Chavent 2009]. This leads to a simplified expression of the total volumetric flow rate, and hence to a weaker coupling between pressure and saturation equations. Then we discuss the boundary conditions to be imposed on P_c^g and d in order to obtain TD-three-phase data which coincide with the given two-phase data on the boundary $\partial\mathbb{T}$ of the ternary diagram. Next we introduce the two finite element solvers required for the interpolation of P_c^g and d on the ternary diagram. Finally, we show in the numerical results section TD-interpolated three-phase fractional flows and relative permeabilities obtained by this approach for two levels of compressibility.

3.1 Flow model

Let the fluids be numbered in order of decreasing wettability. s_j, p_j denote the saturation and pressure levels of phase $j = 1$ (water), 2 (oil) and 3 (gas), and S_j, P_j their distribution (function of space and time variables). Ternary diagram will be denoted by \mathbb{T} and its boundary by $\partial\mathbb{T}$. A three-phase saturation distribution will be denoted by $S = (S_1, S_3)$ (so that $S_2 = 1 - S_1 - S_3$), and a point of the ternary diagram by $s = (s_1, s_3)$ (so that $s_2 = 1 - s_1 - s_3$) in Fig. 3.1.

3.1.1 Conservation laws

For each phase j , one has :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi(\vec{x}, P_{\text{pore}})B_j(P_j)S_j) + \nabla \cdot (\varphi_j) = 0 \quad , \quad j = 1, 2, 3, \quad (3.1)$$

where :

$$\begin{aligned} \vec{x} &= \text{vector of spatial coordinates} \\ \phi(\vec{x}, P_{\text{pore}}) &= \text{porosity} \\ P_{\text{pore}} &= \text{pore pressure} \end{aligned}$$

and where for each phase $j = 1, 2, 3$:

$$\begin{aligned}
P_j(\vec{x}, t) &= \text{pressure} \\
S_j(\vec{x}, t) &= \text{reduced saturation} \\
\rho_j(p_j) &= \text{density at pressure } p_j \\
\varphi_j(\vec{x}, t) &= \text{volumetric flow vector at pressure } p_j \\
B_j(p_j) = \rho_j(p_j)/\rho_j^0 &= \text{volume factor}
\end{aligned}$$

with $\sum_j S_j = 1$, $0 \leq S_j \leq 1$ and ρ_j^0 density of phase j at reference pressure.

3.1.2 Muskat law

At the scale of a Representative Elementary Volume (REV) of porous medium [Bear 1972], the volumetric flow vector of each phase at reference pressure for a saturation distribution $S = (S_1, S_3)$ is given by :

$$\varphi_j = -K(\vec{x})d_j(P_j)kr_j(S)(\nabla P_j - \rho_j(P_j)g\nabla Z) \quad (3.2)$$

where :

$$\begin{aligned}
K(\vec{x}) &= \text{absolute permeability at location } \vec{x} \\
d_j(p_j) &= B_j/\mu_j = \text{phase mobility at pressure } p_j \\
\mu_j(p_j) &= \text{dynamic phase viscosity at pressure } p_j \\
kr_j(s) &= \text{relative phase permeability at saturation } s = (s_1, s_3) \\
g &= \text{gravity constant} \\
Z(\vec{x}) &= \text{depth at location } \vec{x}
\end{aligned}$$

3.1.3 Capillary pressure equation

The water-oil (resp. gas-oil) capillary pressures at point \vec{x} is usually supposed to depend only on the water saturation (resp. the gas saturation). To ensure a positive derivative of the water-oil capillary pressure function, it is chosen opposite to the classical definition :

$$\begin{cases} P_1 - P_2 = P_c^{12}(S_1), \\ P_3 - P_2 = P_c^{32}(S_3), \end{cases} \quad (3.3)$$

where :

$$\begin{aligned}
P_c^{12}(s_1) &= \text{water-oil capillary pressure at water saturation } s_1, \\
P_c^{32}(s_3) &= \text{gas-oil capillary pressure at gas saturation } s_3.
\end{aligned}$$

With the chosen wettability conventions one has :

$$\begin{cases} P_c^{12}(s_1) \leq 0, & P_c^{12}(1) = 0, & \frac{dP_c^{12}}{ds_1}(s_1) \geq 0, \\ P_c^{32}(s_3) \geq 0, & P_c^{32}(0) = 0, & \frac{dP_c^{32}}{ds_3}(s_3) \geq 0. \end{cases} \quad (3.4)$$

3.1.4 Pressure equation

Classical numerical resolutions with fractional flow formulation use a “pressure equation” referring to one of the three phase pressures, for example the oil pressure P_2 , and two “saturation” equations with respect to S_1 and S_3 . Summing the conservation equations in (3.1) for $j = 1, 2, 3$ gives :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi(\vec{x}, P_{pore}) \sum_{j=1}^3 B_j(P_j) S_j) + \nabla \cdot (\mathbf{q}) = 0, \quad (3.5)$$

where \mathbf{q} is the *global volumetric flow* vector :

$$\mathbf{q} \stackrel{def}{=} \sum_{j=1}^3 \varphi_j = -Kd(\nabla P_2 + f_1 \nabla P_c^{12} + f_3 \nabla P_c^{32} - \rho g \nabla Z), \quad (3.6)$$

where d, f_1, f_3, ρ are the global mobility, the water and gas fractional flows and the global density expressed as function of the *oil pressure level* p_2 , using the capillary pressure equations in (3.3) :

$$\begin{cases} d(s, p_2) & = kr_1(s)d_1 + kr_2(s)d_2 + kr_3(s)d_3 \\ f_j(s, p_2) & = kr_j(s)d_j/d(s, p_2), \quad j = 1, 2, 3 \\ \rho(s, p_2) & = \sum_{j=1}^3 \rho_j f_j(s, p_2) \\ \sum_{j=1}^3 f_j(s, p_2) & = 1 \end{cases} \quad (3.7)$$

with $d_1 = d_1(p_2 + Pc^{12}(s_1))$, $d_2 = d_2(p_2)$, $d_3 = d_3(p_2 + Pc^{32}(s_3))$, and similarly for ρ_1, ρ_2, ρ_3 . This “pressure equation” is strongly coupled to the saturation equations for S_1 and S_3 by the two gradient-of-capillary-pressure terms in the right-hand side of equation (3.6).

3.1.5 Definition of global pressure field and global capillary pressure function

To find a more suitable form for the pressure equation, a new “global pressure” field P [Chavent and Jaffré 1986, Chavent 2009] is introduced, with the objective that :

- the gradient-of-capillary-pressure coupling terms are eliminated from the formula for the global volumetric flow :

$$\mathbf{q} \approx -Kd[\nabla P - \rho g \nabla Z]. \quad (3.8)$$

Hence P and \mathbf{q} will follow a Darcy-like law, so one can expect that P exhibits a smooth behaviour

- P is in the range of the phase pressures :

$$P_{min} \leq P_1 \leq P \leq P_3 \leq P_{max}. \quad (3.9)$$

This will allow to use the global pressure P as pore pressure P_{pore} in the case of pressure dependent porosities.

Therefore, a comparison of \mathbf{q} in (3.6), (3.8) suggests to require that the global pressure field P is related to the oil pressure and saturation fields P_2 and $S = (S_1, S_3)$ by :

$$P = P_2 + P_c^g(S, P), \quad (3.10)$$

where P_c^g is a *global capillary pressure* function, to be determined. In order to achieve the objectives on P , this function has to satisfy first :

$$\begin{cases} \forall (S_1(\vec{x}, t), S_2(\vec{x}, t), S_3(\vec{x}, t), P(\vec{x}, t)), \\ \nabla P_c^g(S, P) = f_1(S, P) \nabla P_c^{12}(S_1) + f_3(S, P) \nabla P_c^{32}(S_3) + \frac{\partial P}{\partial p}(S, P) \nabla P. \end{cases} \quad (3.11)$$

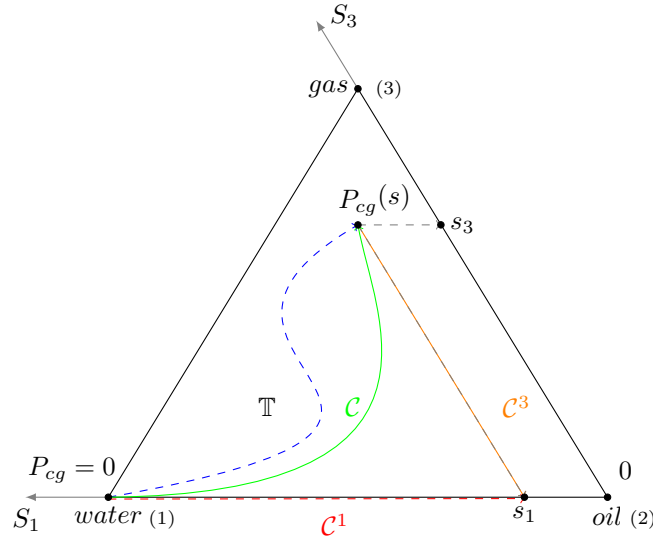


FIG. 3.1 – Illustration of the ternary diagram \mathbb{T} and different curves \mathcal{C} along which $P_c^g(s, p)$ is computed

where ∇ denotes the gradient with respect to the space variable \vec{x} . When this condition is satisfied, the volumetric flow rate becomes :

$$\mathbf{q} = -Kd \left[\left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p}\right) \nabla P - \rho g \nabla Z \right], \quad (3.12)$$

so that (3.8) is essentially satisfied. If moreover P_c^g is chosen such that :

$$P_c^g = 0 \text{ for } s = (1, 0), \text{ which correspond to the water summit of } \mathbb{T}, \quad (3.13)$$

then condition (3.9) is also satisfied (see (3.17) below).

The global pressure field P is uniquely determined by (3.10) once the oil pressure and saturation fields P_2 and $S = (S_1, S_3)$ are known, provided P_c^g satisfies the *stability condition* [Chavent and Jaffré 1986; Chavent 2009] :

$$\forall s \in \mathbb{T}, p_{min} \leq p \leq p_{max}, \left| \frac{\partial P_c^g}{\partial p}(s, p) \right| < 1. \quad (3.14)$$

3.2 Existence of a global pressure formulation

A global pressure formulation will exist as soon as one can find a *global capillary pressure* function $(s, p) \rightsquigarrow P_c^g$ that satisfies conditions given by equations (3.11), (3.13) and (3.14). But it is always possible to satisfy (3.13) once (3.11) and (3.14) hold, as these latter involve only derivatives of P_c^g . So we focus on conditions which ensure that (3.11) and (3.14) can be satisfied. The global pressure level $p \in [p_{min}, p_{max}]$ is fixed throughout this section.

3.2.1 Satisfying (3.11) : Total differential condition

Condition formulated in equation (3.11) is equivalent to :

$$\forall s \in \mathbb{T} \text{ one has : } \begin{cases} \frac{\partial P_c^g}{\partial s_1}(s, p) = f_1(s, p - P_c^g) \frac{dP_c^{12}}{ds_1}(s_1) , \\ \frac{\partial P_c^g}{\partial s_3}(s, p) = f_3(s, p - P_c^g) \frac{dP_c^{32}}{ds_3}(s_3) . \end{cases} \quad (3.15)$$

This implies that P_c^g satisfies a differential equation along any given smooth curve $\mathcal{C} : t \in [0, 1] \rightsquigarrow (\mathcal{C}_1(t), \mathcal{C}_3(t)) \in \mathbb{T}$ of the ternary diagram. Of particular interest are the curves \mathcal{C} starting at $(s_1, s_3) = (1, 0)$ (water, where $P_c^g = 0$) and ending at a given point $s = (s_1, s_3)$ of \mathbb{T} (cf. Fig. 3.1). Along such a curve, the function $\beta(t) = P_c^g(\mathcal{C}(t), p)$ satisfies :

$$\begin{cases} \frac{d\beta}{dt} = f_1(\mathcal{C}, p - \beta) \frac{dP_c^{12}}{ds_1} \mathcal{C}'_1 + f_3(\mathcal{C}, p - \beta) \frac{dP_c^{32}}{ds_3} \mathcal{C}'_3 , & \beta(0) = 0 , \\ \beta(1) = P_{cg}(s_1, s_3, p) \text{ independantly of the curve } \mathcal{C} , \end{cases} \quad (3.16)$$

where $\mathcal{C}'_j = d\mathcal{C}_j/dt$. The independancy condition stated in equation (3.16) is the *Total Differential (TD) condition* which has to be satisfied by the fractional flows f_1, f_3 and the capillary pressure functions P_c^{12}, P_c^{32} in order to ensure the existence of P_c^g , and hence of the global pressure P .

When this condition is satisfied, the value of P_c^g at a given point (s_1, s_3) of \mathbb{T} and a given global pressure level p can be expressed for example by integration along the curve made of $\mathcal{C}^1 = (1 - t + ts_1, 0)$ followed by $\mathcal{C}^3 = (0, ts_3)$ (cf. Fig. 3.1). But here $\mathcal{C}_1^{1'} = -1 + s_1, \mathcal{C}_3^{1'} = 0$ and $\mathcal{C}_1^{3'} = 0, \mathcal{C}_3^{3'} = s_3$, which gives :

$$\begin{cases} \frac{d\beta^1}{dt} = -f_1(\mathcal{C}^1, p - \beta^1) \frac{dP_c^{12}}{ds_1}(\mathcal{C}_1^1)(1 - s_1) , & \beta^1(0) = 0 \\ \frac{d\beta^3}{dt} = f_3(\mathcal{C}^3, p - \beta^3) \frac{dP_c^{32}}{ds_3}(\mathcal{C}_3^3)s_3 , & \beta^3(0) = \beta^1(1) \\ P_c^g(s_1, s_3, p) = \beta^3(1) \end{cases} \quad (3.17)$$

where β^1 and β^3 are expression of β along \mathcal{C}^1 and \mathcal{C}^3 curves. This formula is useful for the mathematical analysis of the new formulation (see for example the next section). However it cannot be used for the numerical determination of P_c^g for a given set of three-phase fractional flows and capillary pressures, as there is no simple way to know wether this set satisfies the TD-condition given by (3.16) or not - and in general it will not !

3.2.2 Satisfying the stability condition given by (3.14)

Let us start to compute $\partial P_c^g / \partial p(s, p)$ at a given point $s = (s_1, s_3) \in \mathbb{T}$. Following [Chavent 2009], we introduce $\gamma^j(t) \stackrel{\text{def}}{=} \partial P_c^g / \partial p(\mathcal{C}^j(t), p)$ for $j = 1, 3$, and derive the previous system of equations (3.17) with respect to p , which leads to :

$$\begin{cases} \frac{d\gamma^1}{dt} = -\frac{\partial f_1}{\partial p_2}(\mathcal{C}^1, p - \beta^1) \frac{dP_c^{12}}{ds_1}(\mathcal{C}_1^1)(1 - s_1)(1 - \gamma^1) , & \gamma^1(0) = 0 , \\ \frac{d\gamma^3}{dt} = \frac{\partial f_3}{\partial p_2}(\mathcal{C}^3, p - \beta^3) \frac{dP_c^{32}}{ds_3}(\mathcal{C}_3^3)s_3(1 - \gamma^3) , & \gamma^3(0) = \gamma^1(1) , \\ \frac{\partial P_c^g}{\partial p}(s_1, s_3, p) = \gamma^3(1) . \end{cases} \quad (3.18)$$

The two first lines of (3.18) are differential equations of the form :

$$\frac{d\gamma^j}{dt} = \underbrace{\frac{\partial f_j}{\partial p_2}(\mathcal{C}^j, p - \beta^j) \frac{dP_c^{j2}}{ds_j}(\mathcal{C}_j^j) \mathcal{C}_j^{j'}}_{\stackrel{\text{def}}{=} \alpha^j(t)} (1 - \gamma^j) , \quad \gamma^j(0) = \gamma_0^j , \quad (3.19)$$

whose analytical solution is given by :

$$\gamma^j(t) = 1 - (1 - \gamma_0^j) \exp\left(-\int_0^t \alpha^j(\tau) d\tau\right). \quad (3.20)$$

Using (3.20) and initial values of (3.18), the third line of (3.18) is then given by :

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_c^g}{\partial p}(s, p) &= 1 - (1 - \gamma^1(1)) \exp\left(-\int_0^1 \alpha^3(\tau) d\tau\right) \\ &= 1 - \exp\left(-\int_0^1 [\alpha^1(\tau) + \alpha^3(\tau)] d\tau\right). \end{aligned} \quad (3.21)$$

This shows that the coefficient $1 - \partial P_c^g / \partial p$ called compressibility factor, required for the implementation of the global pressure formulation (see (3.12)) is strictly positive, and gives a simple way to compute it - and of course to check whether the stability condition (3.14) is satisfied or not for the problem at hand! We refer to [Chavent 2009] for conditions on the mobilities $d_j, j = 1, 2, 3$ under which (3.14) hold true.

3.2.3 Remark on a single compressible phase case (gas)

When the compressibility of water and oil are neglected, the derivatives of phase mobilities are zero with respect to their own phase pressure ($d'_1 = d'_2 = 0$). Therefore $\partial f_1 / \partial p_2 = 0$ and hence $\alpha^1 = 0$. Then a simple calculation shows that :

$$\alpha^3(\tau) = \frac{kr_3 d'_3 (kr_1 d_1 + kr_2 d_2)}{(kr_1 d_1 + kr_2 d_2 + kr_3 d_3)^2} \frac{dP_c^{32}}{ds_3}(\tau s_3) s_3 \geq 0,$$

where $\tau \in [0, 1]$. Three-phase relative permeabilities kr_1, kr_2, kr_3 are evaluated at $(\tau s_1, \tau s_3)$ and d_1, d_2, d_3, d'_3 are computed at the corresponding phase pressure. It leads to :

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_c^g}{\partial p}(s_1, 0, p) &= 0 && \text{on the water-oil side,} \\ 0 \leq \frac{\partial P_c^g}{\partial p}(s_1, s_3, p) &< 1 && \text{over } \mathbb{T}. \end{aligned}$$

In particular, the stability condition formulated in expression (3.14) is automatically satisfied. In the numerical examples presented below, maximum values of $\partial P_c^g / \partial p$ are in the order of 10^{-4} , so that $1 - \partial P_c^g / \partial p \simeq 1$.

3.3 TD–Interpolation of two-phase data over \mathbb{T}

In order to take advantage of the exact global pressure formulation recalled in the previous sections, it is necessary to be able to construct secondary flow variables such as three-phase relative permeabilities and capillary pressures, which both coincide with given two-phase data on the side of the ternary diagram AND satisfy the TD condition (3.16). We present in this section an algorithm for its implementation, adapted from [Chavent 2009], and the case study to which it will be applied. Let p be a given global pressure level in the range of interest.

3.3.1 A Total Differential Compatible (TDC) interpolation algorithm for two-phase data

The TDC interpolation algorithm needs as input a collection of three two-phase relative permeabilities curves kr_i^{ij}, kr_j^{ij} , two capillary pressure curves P_c^{12}, P_c^{32} , the viscosities μ_i of each fluid, plus the gas compressibility data (see algorithm 1). Note that water and oil are supposed to be incompressible ($B_1 = B_2 = 1$).

Algorithm 1 Total Differential Compatible (TDC) interpolation algorithm of two-phase data

Require: p, kr_k^{ij} for $k = i, j, P_c^{12}(s_1), P_c^{32}(s_3)$ for all s_1, s_3 in $[0, 1], M_3, R, T_3, \rho_3^0, \mu_i$

Ensure: $kr_i(s, p), \nu_i(s, p), \partial P_c^g / \partial p(s, p)$ for all s in \mathbb{T}

step 1 : Solve non linear Ordinary Differential Equations to obtain $(P_c^g)^{data}$ on $\partial\mathbb{T}$

step 2 : Correct two-phase data for TD Compatibility

step 3 : Compute d on $\partial\mathbb{T}$

step 4 : Solve harmonic problem

$$\begin{cases} -\Delta d = 0 & \text{in } \mathbb{T} \\ d = d^{data} & \text{in } \partial\mathbb{T} \end{cases}$$

step 5 : Solve biharmonic problem

$$\begin{cases} \Delta^2 P_c^g = 0 & \text{in } \mathbb{T} \\ P_c^g = (P_c^g)^{data} & \text{on } \partial\mathbb{T} \\ \frac{\partial P_c^g}{\partial \mathbf{n}} = \left(\frac{\partial P_c^g}{\partial \mathbf{n}} \right)^{data} & \text{on } \partial\mathbb{T}_{13}, \partial\mathbb{T}_{23} \text{ and } \partial\mathbb{T}_{12} \end{cases} \rightarrow \text{Compute } \nu_i, d_i$$

step 6 : Compute $\frac{\partial P_c^g}{\partial p}(s, p), kr_i(s, p)$

We solve first in step 1 *Initial Value Problems* (3.16) on two-phase side(s) of \mathbb{T} with an *Ordinary Differential Equation (ODE) Solver* : starting at the water summit (1,0), where $P_c^g = 0$, one determines $(P_c^g)^{data} \stackrel{\text{def}}{=} \beta$ on the rest of the boundary. Solving for example one ODE on the water-gas side, and the other on the water-oil resp. oil-gas sides will produce in general two different values of $\beta = (P_c^g)^{data}$ at the gas summit (0, 1), which violates the TD condition (3.16)

So we correct in step 2 the two-phase data in order to satisfy the TD condition (3.16) on $\partial\mathbb{T}$: one modifies $(P_c^g)^{data}$ on the gas-oil side for example in such a way that it matches at the gas vertex the value of $(P_c^g)^{data}$ computed on the water-gas side. This might modify slightly the relative permeability data on the gas-oil side.

Then we compute in step 3 the global mobility d^{data} on $\partial\mathbb{T}$ at the given global pressure level p , which is given by (3.7) with P_2 replaced by $P - P_c^g(s, p)$. In step 4, the global mobility d is then extended to the interior of \mathbb{T} by solving an harmonic equation on \mathbb{T} by mean of C^0 piecewise linear finite elements.

Step 5 is devoted to the extension of the global capillary pressure $(P_c^g)^{data}$ to the inside of \mathbb{T} . In order to ensure that the fractional flows associated to P_c^g by (3.15) coincide on $\partial\mathbb{T}$ with those derived from the data, it is necessary to complete the Dirichlet condition $P_c^g = (P_c^g)^{data}$ by a Neumann condition on $\partial\mathbb{T}$. A biharmonic equation over \mathbb{T} is needed to perform this extension. It is solved by a C^1 *Hsieh-Clough-Tocher* finite element method, which ensure that the fractional flows derived from P_c^g are continuous over the ternary diagram. For each fluid

phase, the corresponding fractional flow and phase mobility are then derived. Finally, the TD relative permeabilities are computed from P_c^g and d and the stability condition is verified. The different steps introduced in algorithm 1 are discussed in the following sections.

3.3.2 Two-phase data settings

Data usually available for the engineer in environmental sciences or in reservoir modeling are three sets of two-phase data on capillary pressure and relative permeabilities for water-gas, gas-oil and water-oil system. Two global pressure levels p are studied : in case one, $p = 1 \text{ bar}$, and the gas volume factor B_3 remains close to one over \mathbb{T} (nearly incompressible flow) ; in case two, $p = 1, 2 \text{ bar}$, so that B_3 is near to 1, 15 (compressible flow). Conventions for diagram \mathbb{T} are given in Fig. 3.1. The ternary diagram is discretized with triangles equally spaced in S_1 and S_3 directions following $\Delta s_1 = \Delta s_3 = 0, 1$. Initial single phase settings are given in Tab. 3.1 for cases 1 and 2.

Furthermore, relative phase permeabilities kr_k^{ij} for $k = i, j$ are given for each pair of fluids in Fig. 3.2. Capillary pressure curves i.e. $P_c^{32}(s_3)$ and $P_c^{12}(s_1)$ are fixed on \mathbb{T} respecting the chosen wettability conventions (see (3.4)) and are shown in Fig. 3.3.

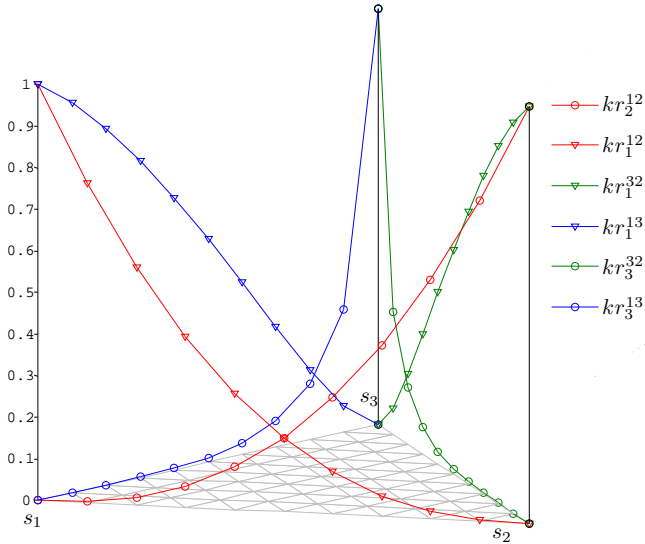


FIG. 3.2 – Initial relative two-phase permeabilities given on $\partial\mathbb{T}_{12}$, $\partial\mathbb{T}_{13}$ and $\partial\mathbb{T}_{23}$ for cases 1 and 2

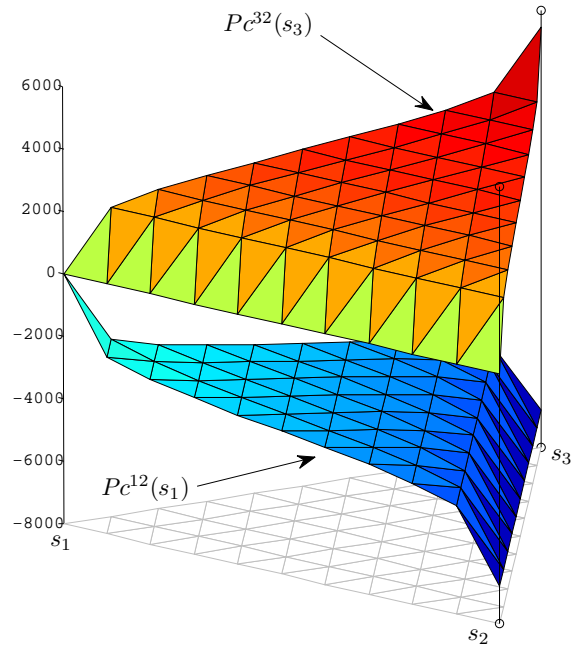


FIG. 3.3 – Capillary pressure P_c^{32} [Pa] (top) and P_c^{12} [Pa] (bottom) given on \mathbb{T} for cases 1 and 2

property	symbol	value	unit
Water dynamic viscosity	μ_1	1	$\times 10^{-3} [Pa s]$
Oil dynamic viscosity	μ_2	0.5	$\times 10^{-3} [Pa s]$
Gas dynamic viscosity	μ_3	0.015	$\times 10^{-3} [Pa s]$
Molar mass of gas phase	M_3	0.025	$[kg mol^{-1}]$
Temperature of gas phase	T_3	296	$[K]$
Ideal gas law constant	R	8.314	$[J K^{-1} mol^{-1}]$
Reference gas density at 1 bar	ρ_3^0	1.204	$[kg m^{-3}]$
Water and oil volume factor	B_1, B_2	1	$[-]$

TAB. 3.1 – Initial single phase data settings on $\partial\mathbb{T}$ for cases 1 and 2

3.4 Determination of $P_c^g(s, p)$ on $\partial\mathbb{T}$ (step 1)

Determination of $P_c^g(s, p)$ on $\partial\mathbb{T}$ requires to solve three non linear Ordinary Differential Equations (ODE's) along three curves \mathcal{C} of \mathbb{T} defined by :

$$\begin{cases} \mathcal{C}^{12}(t) = (1-t, 0), \\ \mathcal{C}^{23}(t) = (0, t), \\ \mathcal{C}^{13}(t) = (1-t, t), \end{cases} \quad \forall t \in [0, 1] \quad (3.22)$$

We shall use the notations :

$$\begin{aligned} \beta^{ij}(t) &= P_c^g(\mathcal{C}^{ij}, p) & d^{ij}(t, p) &= d(\mathcal{C}^{ij}, p_2 - \beta^{ij}), \\ \nu_k^{ij}(t, p) &= f_i(\mathcal{C}^{ij}, p_2 - \beta^{ij}) & dP_c^{k2}/ds_k &= P_c^{k2'} \text{ for } k = i, j \end{aligned}$$

3.4.1 Determination of β^{12} along the water-oil side $\partial\mathbb{T}_{12}$

We solve the ODE system starting from $\beta^{12}(0) = P_c^g(\mathcal{C}^{12}(0), p) = P_c^g(1, 0, p) = 0$ to the ending point at $s_1 = 0$ (i.e. $s_2 = 1$) :

$$\begin{cases} \beta^{12}(0) = 0, \\ \frac{d\beta^{12}}{dt}(t) = -f_1^{data}(1-t, 0, p - \beta^{12}(t))P_c^{12'}(1-t), \end{cases} \quad (3.23)$$

where $f_1^{data}(s_1, 0, p_2)$ is the water fractional flow derived from the data on the water-oil side. The water is supposed incompressible, so that $B_1 = 1$ and the *water-oil* ODE system is simply reduced to :

$$\begin{cases} \beta^{12}(0) = 0, \\ \frac{d\beta^{12}}{dt}(t) = -\frac{kr_1^{12}(1-t)}{\mu_1 d^{12}(1-t)} P_c^{12'}(1-t). \end{cases} \quad (3.24)$$

3.4.2 Determination of β^{32} along the gas-oil side $\partial\mathbb{T}_{23}$

The initial condition for β^{32} at $s_3 = 0$ (or $s_2 = 1$) is obtained from the final value $\beta^{12}(1)$ of β^{12} on the *water-oil* side :

$$\begin{cases} \beta^{32}(0) = \beta^{12}(1), \\ \frac{d\beta^{32}}{dt}(t) = f_3^{data}(0, t, p - \beta^{32}(t))P_c^{32'}(t), \end{cases} \quad (3.25)$$

where $f_3^{data}(0, s_3, p_2)$ is the gas fractional flow derived from the data on the oil-gas side. Thus the *gas-oil* ODE system can be expressed by :

$$\begin{cases} \beta^{32}(0) &= \beta^{12}(1), \\ \frac{d\beta^{32}}{dt}(t) &= kr_3^{32}(t) \frac{d_3(p - \beta^{32}(t) + P_c^{32}(t))}{d^{32}(t, p - \beta^{32}(t) + P_c^{32}(t))} P_c^{32'}(t). \end{cases} \quad (3.26)$$

3.4.3 Determination of β^{13} along the *water-gas* side $\partial\mathbb{T}_{13}$

Based on the conditions formulated in section 3.2, the first initial value is given by the global capillary pressure at $s_1 = 1$ i.e. $\beta^{13}(0) = \beta^{12}(0) = 0$

$$\begin{cases} \beta^{13}(0) &= 0, \\ \frac{d\beta^{13}}{dt}(t) &= -f_1^{data}(1-t, t, p - \beta^{13}(t)) P_c^{12'}(1-t) + f_3^{data}(1-t, t, p - \beta^{13}(t)) P_c^{32'}(t). \end{cases} \quad (3.27)$$

Here $f_1^{data}(1-t, t, p)$ and $f_3^{data} = 1 - f_1^{data}$ are the water and gas fractional flows derived from the data on the water-gas side. Thus the *water-gas* ODE system can be expressed by :

$$\begin{cases} \beta^{13}(0) &= 0, \\ \frac{d\beta^{13}}{dt}(t) &= -\frac{kr_1^{13}(1-t) P_c^{12'}(1-t)}{\mu_1 d^{13}(1-t, p - \beta^{13}(t) + P_c^{32}(t))} + \frac{kr_3^{13}(1-t) d_3(p - \beta^{13}(t) + P_c^{32}(t)) P_c^{32'}(t)}{d^{13}(1-t, p - \beta^{13}(t) + P_c^{32}(t))}. \end{cases} \quad (3.28)$$

In order to solve the given three ODE's system, we used a multistep predictor-corrector scheme.

3.4.4 Computing $\beta = P_c^g$ on $\partial\mathbb{T}$ with a predictor-corrector scheme $P(EC)_\mu^m E$

Let β_k^{ij} denotes the global capillary pressure computed on side (ij) at node t_k . A multistep predictor-corrector is used to compute $\beta = P_c^g$ on $\partial\mathbb{T}$. Practically, only initial point (t_0, β_0^{ij}) is used to compute (t_1, β_1^{ij}) , and in general, β_k^{ij} is needed to compute β_{k+1}^{ij} . After several points found, it is feasible to use several prior points in the calculation. In our case, we used an Adams four-step method [Quarteroni et al. 2007] to solve ODE's system on $\partial\mathbb{T}_{12}$ (3.23), on $\partial\mathbb{T}_{23}$ (3.25) and on $\partial\mathbb{T}_{13}$ (3.27). It requires $\beta_{k-3}^{ij}, \beta_{k-2}^{ij}, \beta_{k-1}^{ij}$, and β_k^{ij} in the calculation of β_{k+1}^{ij} . The chosen method is not self-starting; four initial points $(t_0, \beta_0^{ij}), (t_1, \beta_1^{ij}), (t_2, \beta_2^{ij})$, and (t_3, β_3^{ij}) , must be given in advance in order to generate the points $[(t_k, \beta_k^{ij}) : k \geq 4]$. We used a fourth order Runge-Kutta scheme. A desirable feature of the multistep scheme is the determination of the local truncation error (LTE). Hence, a correction term is added, which improves the accuracy of the solution at each step. A grid parameter μ is used to determine how many times each step is divided and controls that for each refined step, the *local truncature error* (LTE) is reached and β_{k+1}^{ij} converges after m linearized loops. Using combinations of a predictor (P) and corrector (C), one requires only two function evaluations (E) of the right hand side per step. Basically, predictor-corrector methods proceed by extrapolating of a polynomial fit (Adams-Bashforth scheme) to the derivative from the previous points to the new point (the predictor step) and then use it to interpolate (Adams-Moulton scheme) the derivative in the corrector step to take into account gas pressure at each step.

Each ODE system is built up from its first *initial* value. Numerical results are shown for case 1 and 2 in Fig. 3.4 and Fig. 3.7, respectively. In general, the ODE for β^{32} gives a value at $s_3 = 1$ which is slightly different from the one obtained on water-gas side (β^{13}). In order to satisfy the TDC condition, a correction is applied to close the boundary system on $\partial\mathbb{T}$ (see Fig. 3.3). This will be discussed in details in section 3.5.

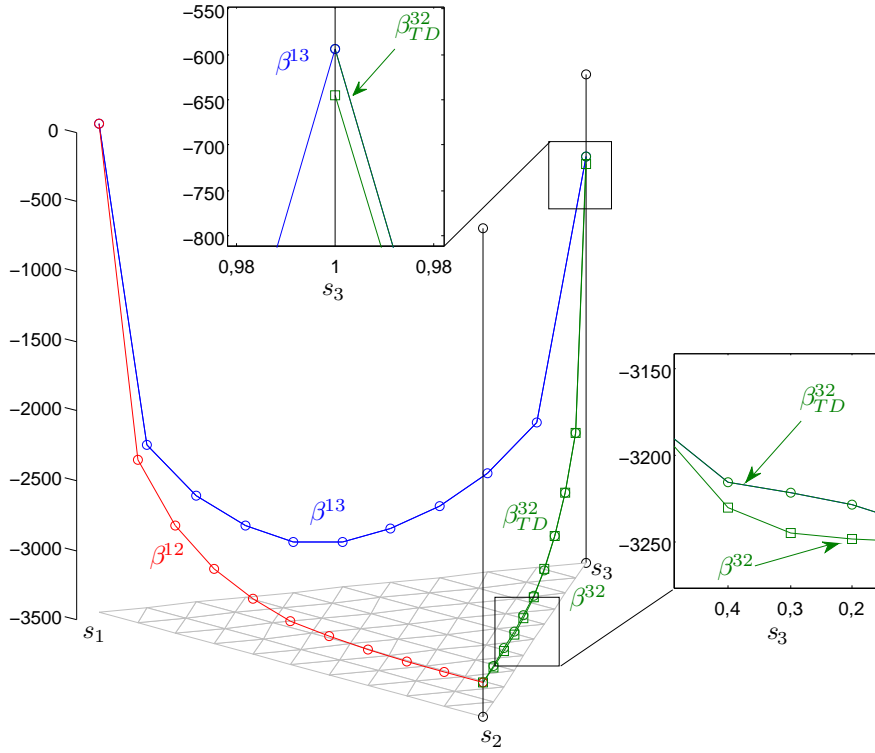


FIG. 3.4 – Numerical results for β^{ij} [Pa] over $\partial\mathbb{T}$ using $P(EC)_{10}^2 E$, case 1

3.5 Satisfying the *Total Differential Compatibility* condition (step 2)

The global capillary function P_c^g , when it exists, take a unique value at the gas vertex. It is hence necessary that β^{32} and β^{13} satisfy the *TD Compatibility condition* [Chavent 2009].

$$\beta^{32}(1) = \beta^{13}(1). \quad (3.29)$$

Based on (3.23), (3.25), (3.27), an integral expression of the global capillary pressure at $s_3 = 1$ is obtained using two different paths (see Fig. 3.1) :

- from $s_1 = 1$ to $s_1 = 0$ along the water-oil side (\mathcal{C}^1) and from $s_3 = 0$ to $s_3 = 1$ along the gas-oil side (\mathcal{C}^3)
- from $s_1 = 1$ to $s_3 = 1$ along the water-gas side

$$\int_0^1 [\nu_1^{12}(\tau, p) - \nu_1^{13}(\tau, p)] P_c^{12'}(1 - \tau) d\tau = \int_0^1 [\nu_3^{32}(\tau, p) - \nu_3^{13}(\tau, p)] P_c^{32'}(\tau) d\tau. \quad (3.30)$$

This shows that for example the simple fractional flow model which satisfies $\nu_1^{12} = \nu_1^{13}$ and $\nu_3^{32} = \nu_3^{13}$, respects the TDC condition. But in general, the functions β^{32} and β^{13} computed from the data will not satisfy the TDC condition (3.29). So we enforce this condition by modifying slightly one of the beta functions, for example β^{32} :

$$\beta_{TD}^{32}(t) = \beta^{32}(t) - t^2(\beta^{32}(1) - \beta^{13}(1)). \quad (3.31)$$

An illustration of the corrected values β_{TD}^{32} is given below in Fig. 3.3. This correction leads to a new permeability model $kr_2^{32}(s, p - \beta_{TD}^{32} + P_c^{32})$, $kr_3^{32}(s, p - \beta_{TD}^{32} + P_c^{32})$ on the gas-oil side which is quite similar to the initial one.

Once corrected for TDC condition, the functions β^{12} , β^{23} and β^{13} give a Dirichlet condition for P_c^g . Some rules must be checked to ensure a correct calculation of the solution. Using equations (3.4), (3.15) and (3.27), one can see that :

$$\begin{aligned}
 \beta^{13}(t) &= \int_0^t \frac{\partial P_c^g}{\partial s_3}(1-t, \tau, p) d\tau + \beta^{12}(t), \\
 \beta^{13}(t) - \beta^{12}(t) &= \int_0^t \underbrace{f_3(1-t, \tau, p_2)}_{0 \leq \cdot \leq 1} \underbrace{\frac{dP_c^{32}}{ds_3}(\tau)}_{\geq 0} d\tau, \\
 \Rightarrow |\beta^{13}(t) - \beta^{12}(t)| &\leq \underbrace{P_c^{32}(t)}_{\geq 0} - \underbrace{P_c^{32}(0)}_{=0}, \\
 \Leftrightarrow \beta^{13}(t) - P_c^{32}(t) &\leq \beta^{12}(t) \leq \beta^{13}(t).
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

We get a similar relation for $\beta^{32}(t)$ on gas-oil side $\partial\mathbb{T}_{23}$. Hence a necessary condition for the fractional flows f_1 and f_3 associated to the function P_c^g under determination to range between 0 and 1 is :

$$\begin{cases} \beta^{13}(t) - (P_c^{12}(1-t) - P_c^{12}(0)) \leq \beta_{TD}^{32}(t) \leq \beta^{13}(t), \\ \beta^{13}(t) - P_c^{32}(t) \leq \beta^{12}(t) \leq \beta^{13}(t). \end{cases} \tag{3.33}$$

Right hand side of these two inequalities are respected for both β_{TD}^{32} and β^{12} (cf. Fig. 3.4) and ensure that fractional flows will vary from zero to one.

3.6 Determination of $d(s, p)$ on $\partial\mathbb{T}$ and \mathbb{T} (step 3 and 4)

3.6.1 Dirichlet boundary condition on $d(s, p)$ over $\partial\mathbb{T}$ (step 3)

The global capillary pressure is known on $\partial\mathbb{T}$ (sections 3.4, 3.5). It is hence possible to compute the value d^{data} of the global mobility associated to the data :

$$d^{data} = \begin{cases} d^{12} = kr_1^{12}d_1 + kr_2^{12}d_2 & (water - oil), \\ d^{13} = kr_1^{13}d_1 + kr_3^{13}d_3(p - \beta^{13} + P_c^{32}) & (water - gas), \\ d^{32} = kr_2^{32}d_2 + kr_3^{32}d_3(p - \beta_{TD}^{32} + P_c^{32}) & (gas - oil). \end{cases} \tag{3.34}$$

This function will serve as Dirichlet boundary condition for the determination of d over \mathbb{T} . Values of d^{12} , d^{32} and d^{13} are shown as part of the complete solution over \mathbb{T} in Figs. 3.5, 3.6.

3.6.2 C^0 finite element for Laplace problem on $d(s, p)$ over \mathbb{T} (step 4)

In this TD interpolation algorithm, d is chosen as the smoothest function which interpolates the boundary conditions d^{data} , by solving an harmonic problem. This problem is solved by standard finite elements C^0 . The resulting global mobility is presented for case 1 and case 2 in Figs. 3.5, 3.6 respectively. The red-dotted line is the value of d^{12} on water-oil side, the green one stands for d^{32} on gas-oil side and the blue d^{13} for water-gas side.

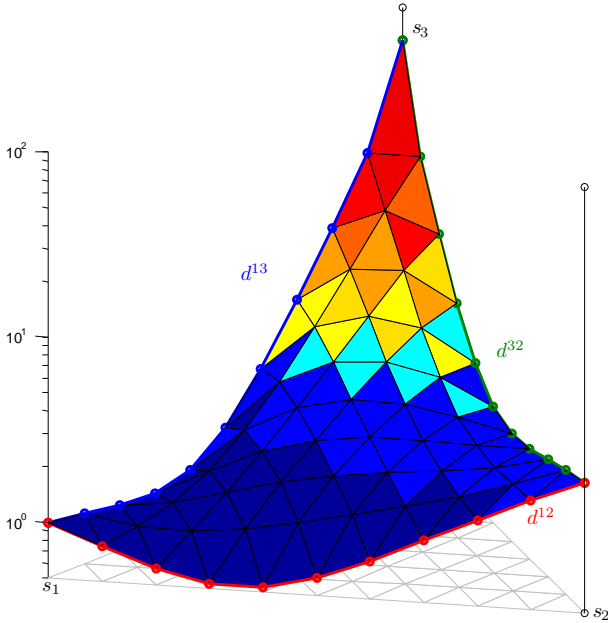


FIG. 3.5 – Global mobility solution d of the Laplace problem, case 1

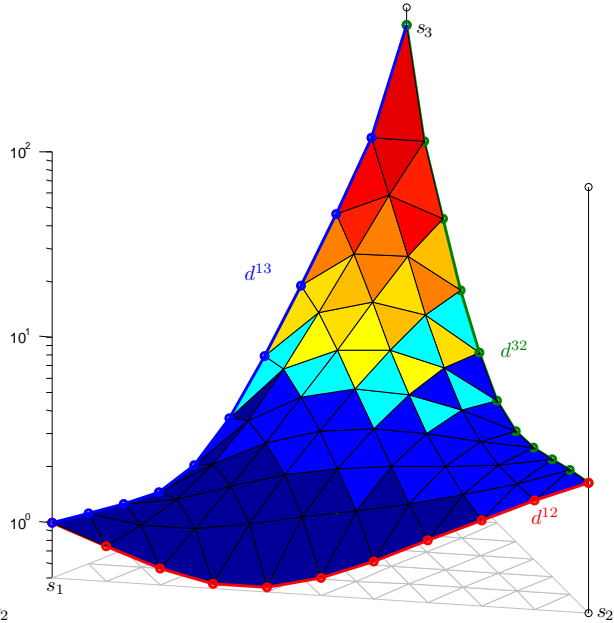


FIG. 3.6 – Global mobility solution d of the Laplace problem, case 2

3.7 Determination of $P_c^g(s, p)$ on \mathbb{T} (step 5)

In order to obtain fractional flow functions which are continuous over \mathbb{T} , it is necessary (see (3.15)) to represent P_c^g by a piecewise polynomial where both the function and the derivatives meet at the boundary between elements. Those finite elements are called H^2 -conforming finite elements, and therefore can be used for the approximation of the fourth-order problem of step 5 [Bernadou and Hassan 1980, Bernadou et al. 1980]. For triangular finite elements, there exist two popular families of polynomial spaces. *Argyris* finite element [Argyris et al. 1968] uses complete quintic polynomial expansion with five degrees of freedom on each vertex (its value, first and second derivatives) and one on the middle of each side (normal derivatives). Deleting the normal mid-nodes, one have *Bell* triangular finite elements [Bell 1969].

The high approximation qualities of these elements are well known but need some regularity for data and solution to solve fourth-order problems. Therefore we use another popular family of C^1 triangular finite element called the *complete Hsieh-Clough-Tocher* (HCT) finite element described by [Bernadou et al. 1980, Clough and Tocher 1965].

In the HCT finite element approach, an elementary triangle is subdivided in three subtriangles using the center of gravity [Bell 1969]. This element has three degrees of freedom at each node located at a vertex of the triangle (value of the function and of its two derivatives), plus the normal derivatives at the mid-side nodes. The choice of the interior node as barycenter does not influence the solution [Ciarlet 1978]. On each subtriangles, a complete cubic polynomial expansion is used. The resulting function is C^1 - class on the assembled element. System solved in step 5 is similar to the problem solved in the case of the deflexion of a thin elastic plate, *clamped* at its boundaries with a zero loading.

3.7.1 Boundary condition over $\partial\mathbb{T}$

The value of P_c^g at a node s of $\partial\mathbb{T}_{ij}$ is using the results of step 1 :

$$(P_c^g(s))^{data} = \beta^{ij}(t) \text{ where } t \text{ is such that } \mathcal{C}^{ij}(t) = s. \quad (3.35)$$

Then the derivatives $\partial P_c^g / \partial s_1$ and $\partial P_c^g / \partial s_3$ at the same node s are given, using (3.15), by :

$$\left(\frac{\partial P_c^g}{\partial s_j}(s) \right)^{data} = f_j(s, p - (P_c^g)^{data}) P_c^{j2'}(s_j) \text{ for } j = 1, 3. \quad (3.36)$$

So we require in our interpolation code that the global capillary pressure P_c^g satisfies :

- at each node s of $\partial\mathbb{T}$ which is a vertex of an element :

$$P_c^g(s) = (P_c^g(s))^{data} \quad (3.37)$$

$$\frac{\partial P_c^g}{\partial s_j}(s) = \left(\frac{\partial P_c^g}{\partial s_j}(s) \right)^{data} \text{ for } j = 1, 3. \quad (3.38)$$

- at each node s of $\partial\mathbb{T}$ which is the middle of an edge :

$$\left(\frac{\partial P_c^g}{\partial \mathbf{n}}(s) \right) = \left(\frac{\partial P_c^g}{\partial \mathbf{n}}(s) \right)^{data} \quad (3.39)$$

where the normal derivative $\left(\frac{\partial P_c^g}{\partial \mathbf{n}}(s) \right)^{data}$ is computed by combination of $\left(\frac{\partial P_c^g}{\partial s_1}(s) \right)^{data}$ and $\left(\frac{\partial P_c^g}{\partial s_3}(s) \right)^{data}$.

In order to interpret these conditions, one notices that conditions in equation (3.38) are equivalent to :

$$\left(\frac{\partial P_c^g}{\partial t}(s) \right) = \left(\frac{\partial P_c^g}{\partial t}(s) \right)^{data} \quad (3.40)$$

$$\left(\frac{\partial P_c^g}{\partial \mathbf{n}}(s) \right) = \left(\frac{\partial P_c^g}{\partial \mathbf{n}}(s) \right)^{data} \quad (3.41)$$

where the tangential derivative $\left(\frac{\partial P_c^g}{\partial t}(s) \right)^{data}$ is computed by combination of $\left(\frac{\partial P_c^g}{\partial s_1}(s) \right)^{data}$ and $\left(\frac{\partial P_c^g}{\partial s_3}(s) \right)^{data}$.

Conditions in equations (3.37), (3.40) at vertex nodes constrain the value of P_c^g on $\partial\mathbb{T}$: they constitute a Dirichlet condition ; conditions in equation (3.39) at mid-edge nodes and (3.41) at vertex nodes, which constrain the normal derivative of P_c^g , constitute a Neumann condition.

3.7.2 Solving the biharmonic problem for $P_c^g(s, p)$ using \mathbf{C}^1 finite elements

The biharmonic problem of step 5 is solved using the HCT finite elements at the given global pressure level $P_{min} \leq p \leq P_{max}$. It produces, at each node s of \mathbb{T} , a value of the global capillary pressure $P_c^g(s, p)$ and two derivatives $\partial P_c^g / \partial s_1(s, p)$ and $\partial P_c^g / \partial s_3(s, p)$.

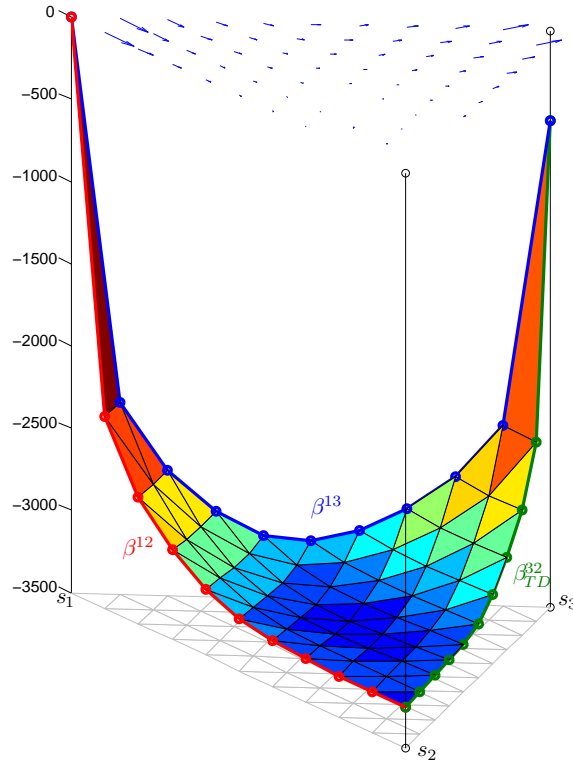


FIG. 3.7 – Numerical results for β^{ij} [Pa] over $\partial\mathbb{T}$ using $P(EC)_{10}^2E$ from step 1, global capillary pressure $p - p_2 = P_c^g(s, p)$ and $(\partial P_c^g/\partial s_1; \partial P_c^g/\partial s_3)$ (blue arrows) computed from step 5, case 2

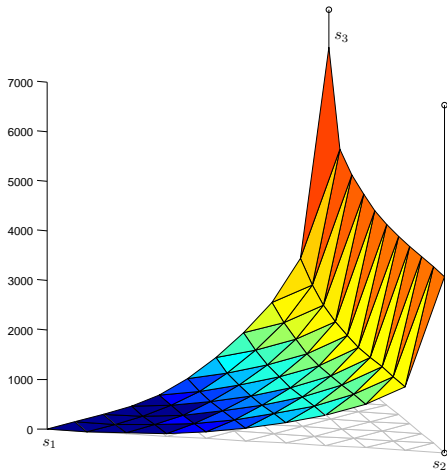


FIG. 3.8 – Relation of global pressure to water pressure : $p - p_1 = P_c^g(s, p) - P_c^{12}(s_1)$, case 2

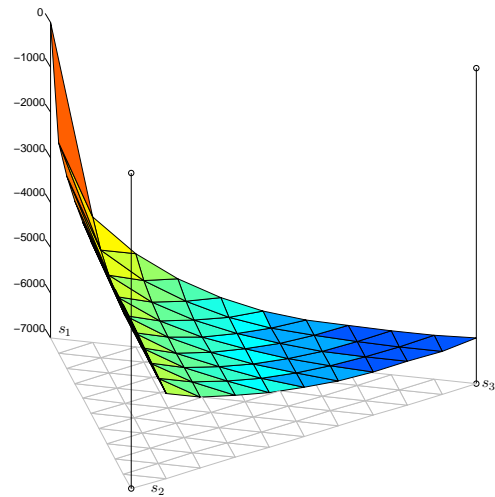


FIG. 3.9 – Relation of global pressure to gas pressure : $p - p_3 = P_c^g(s, p) - P_c^{32}(s_3)$, case 2

We have plotted in figures 3.7, 3.8 and 3.9 resp. the functions $P_c^g = p - p_2$, $P_c^g - P_c^{12} = p - p_1$ and $P_c^g - P_c^{32} = p - p_3$, which give the relation of the global pressure p with each individual phase pressure over the ternary diagram. One sees that for each phase j , the relation between

p and p_j is smooth near the j th vertex of \mathbb{T} , i.e. where the j th phase represents the main part of the flow and the j th phase pressure distribution P_j is expected to vary smoothly over the flow domain. Hence the global pressure distribution P is expected to be smooth all over the flow domain. On the contrary, in the classical formulation where the numerical unknown is the oil pressure (for example), the variation of $p_2 - p_1 = P_c^{21}$ and $p_2 - p_3 = P_c^{32}$ with saturation is given by the capillary pressure functions of figure 3.3, where it is seen that $p_2 - p_j$ is singular near the j th vertex for $j = 1, 3$: the oil pressure distribution P_2 is expected to exhibit steep variations at flow locations where the saturations are close to the water or gas vertex. This shows the global pressure is a smoother unknown than the oil pressure, and is hence best fitted for numerical approximation.

As one can see on figures 3.7, 3.8 and 3.9, conditions (3.33) are verified for both case 1 and 2. Once P_c^g has been determined, the associated fractional flow $\nu_i(s, p)$ with $i = 1, 2, 3$ are defined by :

$$\begin{cases} \nu_1(s, p) = \left(\frac{\partial P_c^g}{\partial s_1}(s, p) \right) \left(\frac{dP_c^{12}}{ds_1}(s_1) \right)^{-1}, \\ \nu_3(s, p) = \left(\frac{\partial P_c^g}{\partial s_3}(s, p) \right) \left(\frac{dP_c^{32}}{ds_3}(s_3) \right)^{-1}, \\ \nu_2(s, p) = 1 - \nu_1(s, p) - \nu_3(s, p). \end{cases} \quad (3.42)$$

By construction, these fractional flow satisfy the TD condition (3.15).

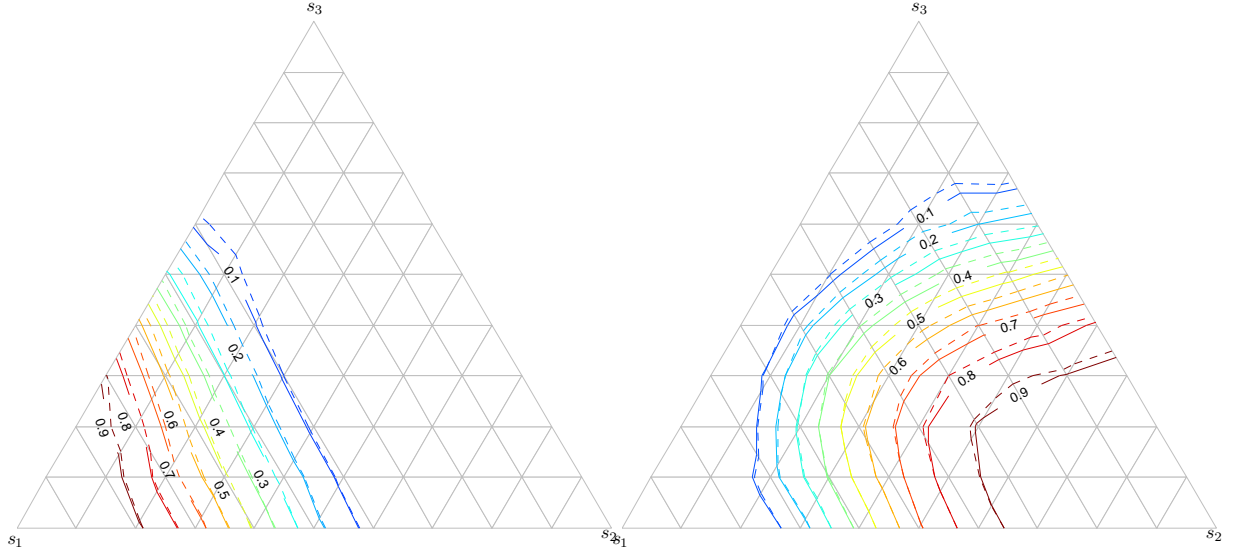


FIG. 3.10 – Water fractional flow $\nu_1(s, p)$ for case 1 (dashed line) and case 2 (solid line) on $\mathbb{T}1$ (dashed line) and case 2 (solid line) on \mathbb{T}

Figures 3.10, 3.11 and 3.12 show the resulting phase fractional flow obtained in case 1 and 2. One can see that the water fractional flow ν_1 and oil fractional flow ν_2 are the same on the water-oil side in both cases due to their respective volume factors $B_1 = B_2 = 1$ (cf. Figs. 3.10, 3.11). However, the compressibility effect is visible on the two gas/liquid sides i.e. the gas-oil edge and the water-gas edge in Fig. 3.12 : remember that the gas mobility d_3 is computed using the gas volume factor B_3 evaluated at the gas pressure.

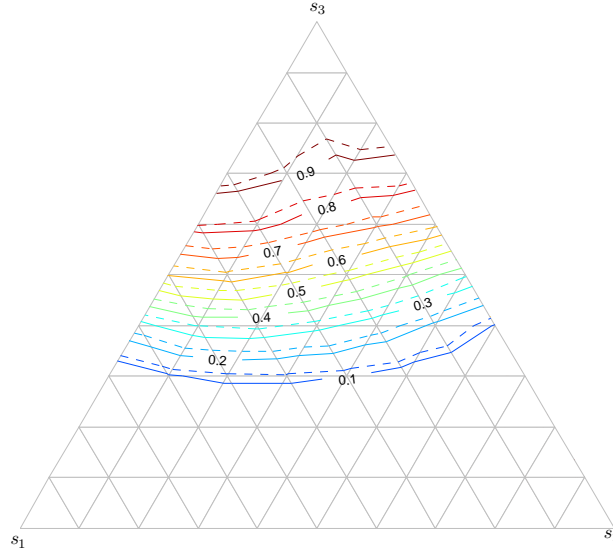


FIG. 3.12 – Gas fractional flow $\nu_3(s, p)$ for case 1 (dashed line) and case 2 (solid line) on \mathbb{T}

Note that the global algebraic system is symmetric, while local bending stiffness HCT matrix is unsymmetric. These two linear systems are respectively solved by an iterative preconditioned conjugate gradient (PCG) solver and a direct solver based on both unifrontal/multifrontal methods well suited for solving sparse linear systems (UMFPACK) [Davis and Duff 1997]. The Eisenstat trick [Eisenstat 1981] is applied to the preconditioned matrix (PCG) and allows saving a significant part of computation. Integrals are computed with a twelve-order Hammer-Gauss quadrature.

3.8 Determination of kr_1 , kr_2 , kr_3 and $\partial P_c^g / \partial p$ on \mathbb{T} (step 6)

Figures 3.13, 3.14 and 3.15 show the three-phase relative permeabilities $kr_i(s, p)$ deduced from the fractional flow $\nu_i(s, p)$ from step 5, the global mobility $d(s, p)$ from step 4 and the individual phase mobility d_i by the formulas :

$$\begin{cases} kr_1(s, p) = \frac{\nu_1(s, p)}{d_1} d(s, p), \\ kr_2(s, p) = \frac{\nu_2(s, p)}{d_2} d(s, p), \\ kr_3(s, p) = \frac{\nu_3(s, p)}{d_3(p - P_c^g(s, p) + P_c^{32}(s_3))} d(s, p). \end{cases} \quad (3.43)$$

By construction, these relative permeabilities coincide with the two phase data on the boundary $\partial\mathbb{T}$. To discuss differences between cases 1 and 2, relative error $|kr_i - kr_i^*| / kr_i$ (* stand for case 1), $i = 1, 2, 3$ is calculated at $s_1 = 10\%$, $s_3 = 40\%$. At this point, water relative permeability of case 2 is 15% higher than incompressible case 1 and relative permeabilities of the gas resp. oil phase are 5% higher and 7% lower in case 2, respectively. Hence, with the interpolation scheme used by the algorithm, the gas compressibility allows water to achieve higher water relative permeabilities at higher gas saturations.

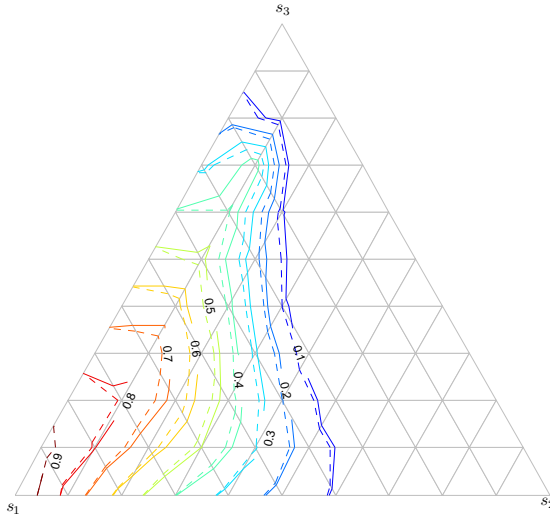


FIG. 3.13 – Relative permeability of water $kr_1(s, p)$ for case 1 (dashed line) and case 2 (solid line) on \mathbb{T}

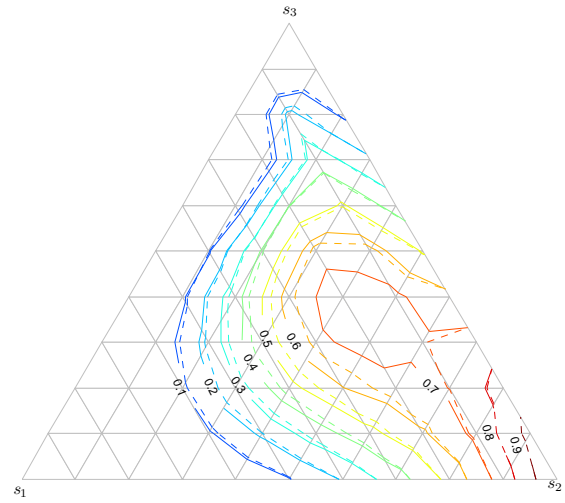


FIG. 3.14 – Relative permeability of oil $kr_2(s, p)$ for case 1 (dashed line) and case 2 (solid line) on \mathbb{T}

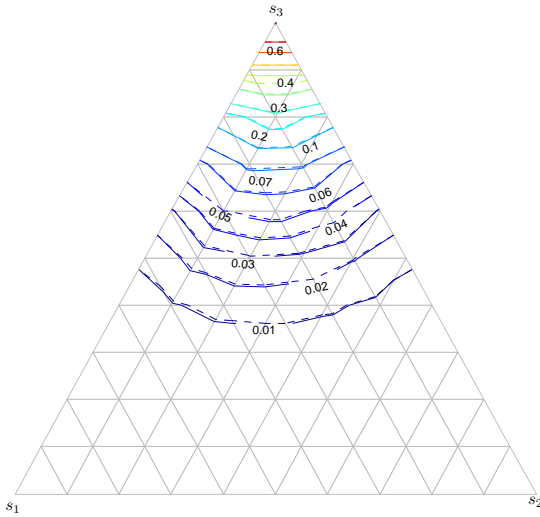


FIG. 3.15 – Relative permeability of gas $kr_3(s, p)$ for case 1 (dashed line) and case 2 (solid line) on \mathbb{T}

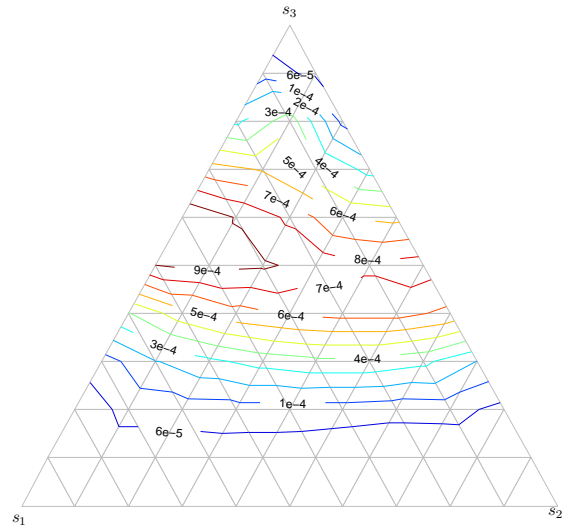


FIG. 3.16 – Compressibility factor $\partial P_c^g / \partial p$ for case 2

An expression of the compressibility factor $\partial P_c^g / \partial p$ appearing in formula (3.12) for the global volumetric flow can be derived from equation (3.21) in the case of a single compressible phase :

$$\frac{\partial P_c^g}{\partial p}(s, p) = 1 - \exp \left(- \int_0^1 \underbrace{\frac{kr_3 d_3' (kr_1 d_1 + kr_2 d_2)}{(kr_1 d_1 + kr_2 d_2 + kr_3 d_3)^2} P_c'^{32} s_3}_{\alpha^3(\tau)} d\tau \right). \quad (3.44)$$

With a convenient Simpson integration rule, one gets for each interior node (s_1, s_3) of \mathbb{T} :

$$\frac{\partial P_c^g}{\partial p}(s, p) \simeq 1 - \exp\left(-\frac{\alpha^3(1)}{2}\right), \quad (3.45)$$

with here $\alpha^3(0) = \partial f_3 / \partial p_2(\mathcal{C}^3(0), p - \beta^3(0)) = 0$. The compressibility factor $\partial P_c^g / \partial p$ obtained on \mathbb{T} for case 2 is shown in Fig. 3.16. The maximum value calculated is about 10^{-3} . Numerical results show that it vanishes at the water, oil and gas vertex, and that it remains small compared to one over the ternary diagram. Of course, for case 1, $d'_3 = 0$ and hence $\partial P_c^g / \partial p = 0$. On the water-gas system, the compressibility factor is significantly higher than the one determined on the oil-gas side. However, on the water-oil side, the compressibility factor is zero due to $B_1 = B_2 = 1$.

3.9 Conclusion

We develop in this paper, a new Total Differential (TD) interpolation algorithm for the determination of three-phase flow in the case of a single compressible phase (gas). This algorithm takes as input a classical collection of two-phase data, corrects them in order to ensure the existence of a global capillary pressure $P_c^g(s, p)$, from which the three phase fractional flows and relative permeabilities are derived. By construction, these relative permeabilities satisfy the TD condition, and allow to replace the classical compressible flow formulation by the fully equivalent global pressure formulation [Chavent 2009], where the global pressure is defined by $P = P_2 + P_c^g(S, P)$. The algorithm involves the resolution of an harmonic and a biharmonic problem over the ternary diagram by C^0 and C^1 finite elements. Numerical experiments show the high efficiency of the new algorithm, which opens the way to its incorporation in a numerical flow simulator using the global pressure formulation. The correction compressibility factor $(1 - \partial P_c^g / \partial p(s, p))$ in the Darcy law for the global volumetric flow \mathbf{q} as been shown to satisfy $0 \leq \partial P_c^g / \partial p \lll 1$ in the case of a single compressible phase. Further research will focus on some optimization algorithm trying to match some experimental datas or a-priori given three-phase target permeability model such as [Stone 1970] on the interior of \mathbb{T} .

Bibliographie

- [Amaziane and Jurak 2008] B. Amaziane, M. Jurak, A new formulation of immiscible compressible two-phase flow in porous media. *C. R. Mécanique*, (2008) **336** :600–605.
- [Antoncev and Monahov 1978] S.N. Antoncev, V.N. Monahov, Three-dimensional problems of time-dependant two-phase filtration in non-homogeneous anisotropic porous media. *Soviet Math. Doklady*, (1978) **19** :1354-1358
- [Argyris et al. 1968] J. Argyris, I. Fried, D. Scharpf, The tuba family of plate elements for the matrix displacement method. *J. Roy. Aeronaut. Soc.*, (1968) **72** :701–709
- [Bear 1972] J. Bear, *Dynamics of Fluids in Porous Media*, Elsevier, New York, 1972
- [Bell 1969] K. Bell, A refined triangular plate bending finite element. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* (1969) **1** :101–122
- [Bernadou et al. 1980] M. Bernadou, J.M. Boisserie, K. Hassan, Sur l'implémentation des éléments finis de Hsieh-Clough-Tocher complet et réduit. *Inria Research Report RR-4* 1980.
- [Bernadou and Hassan 1980] M. Bernadou, K. Hassan, Basis functions for general Hsieh-Clough-Tocher triangles complete or reduced. *Inria Research Report RR-5* 1980.
- [Chavent 1976] G. Chavent, A new formulation of diphasic incompressible flows in porous media, in Applications of Methods of Functional Analysis to Problems in Mechanics. Dold A and Eckman B (Eds). *Lecture Notes in Mathematics 503*, Springer, Berlin, 1976
- [Chavent and Salzano 1985] G. Chavent, G. Salzano, Un algorithme pour la détermination de perméabilités relatives triphasiques satisfaisant une condition de différentielle totale. *Inria Research Report RR-0355* 1985.
- [Chavent and Jaffré 1986] G. Chavent, J. Jaffré *Mathematical Models and Finite Elements for Reservoir Simulation*. North-Holland : Amsterdam, 1986.
- [Chavent et al. 2008] G. Chavent, R. di Chiara Roupert, G. Schäfer, A Fully Equivalent Global Pressure Formulation for Three-Phase Compressible Flows. *Conference Scaling'Up 08*, Dubrovnik, October 13-16 2008.
- [Chavent 2009] G. Chavent, A Fully Equivalent Global Pressure Formulation for Three-Phase Compressible Flow. *Applicable Analysis*, (2009) **00** :1–14
- [Chen et al. 1997] Chen Z, Ewing R. Comparison of Various Formulations of Three-Phase Flows in Porous Media. *Journal of Computational Physics*, 1997 **132** :362–373.

- [Chen 2005] Z. Chen, *Finite Element Methods and Their Applications*. Scientific Computation, Springer, Berlin, 2005.
- [Ciarlet 1978] P. Ciarlet, The Finite Element Method for Elliptic Problems, Society for Industrial and Applied Mathematics. *Journal of Computational Physics*, (1978) **132** :362-373.
- [Clough and Tocher 1965] R.W. Clough, J.L. Tocher, Finite element stiffness matrices for analysis of plate bending. in *Proceedings of the Conference on Matrix Methods in Structural Mechanics*, 1965 Wright Patterson A.F.B Ohio.
- [Davis and Duff 1997] T.A. Davis, I.S. Duff, A combined unifrontal/multifrontal method for unsymmetric sparse matrices. *Technical Report TR-97-016*, 1997 Computer and Information Science and Engineering Department, University of Florida.
- [Eisenstat 1981] S.C. Eisenstat, Efficient implementation of a class of preconditioned conjugate gradient methods. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, (1981) **2** :1-4
- [Jégou 1997] S. Jégou, Estimation des perméabilités relatives dans des expériences de déplacements triphasiques en milieu poreux. *Thèse, Université Paris IX Dauphine*, 1997.
- [Novikov 1992] EA. Novikov Application of explicit Runge-Kutta methods to solve stiff ODE's. *Advances in Modeling & Analysis*, 1992 ; A, AMSE Press. **16** :23–35
- [Novikov 1993] EA. Novikov Construction of the (m, k) –methods for the solution of linear systems of ordinary differential equations. *Mathematical models and tools for Chemical Kinetics*, *AMSE Transactions 'Scientific Siberian'*, 1993 ; **9** :88–103
- [Peano 1976] Peano A. Hierarchies of conforming finite elements fo plane elasticity and plate bending. *Comp. Maths. with Appls.*, 1976 ; **2** :211–224
- [Quarteroni et al. 2007] Quarteroni A, Sacco R, Saleri F. *Méthodes Numériques - Algorithmes, analyse et applications*. Springer, Italia, 2007.
- [Stone 1970] Stone HM. Probability model for estimating three-phase relative permeability. *Journal of Petroleum Technology*, 1970 ; **22** :214–218
- [Younes et Fontaine 2008] A. Younes and V. Fontaine, Efficiency of mixed hybrid finite element and multipoint flux approximation methods on quadrangles grids and highly anisotropic media. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2008 ; **76** :314–336

Formulation du modèle d'écoulement - pression globale revisitée

Par rapport à l'approche présentée dans le chapitre 2, l'approche proposée par [Chavent 2009] (chapitre 3) permet d'imposer les trois modèles de perméabilité relatives et de pressions capillaires sur chacune des trois frontières de diagramme \mathbb{T} . L'interpolation a été menée pour un sable identique au sable H1F (chapitre 2). Les pressions capillaires globales obtenues dans les deux cas sont dans des gammes de pression identiques (voir figures 2.8 et 3.7). Des différences apparaissent néanmoins vers le sommet en gaz. Cet écart peut s'expliquer par les différences entre les modèles de perméabilité eau/gaz et par le respect de la condition de compatibilité décrite précédemment (cf. Section 3.5). L'approche développée dans le chapitre 3 a cependant été retenue dans la validation des écoulements présentés ici pour sa praticité. Par ailleurs elle permet d'exprimer les facteurs de volume B_j à la pression de la phase j et donc que $\partial P_c^g / \partial p \ll 1$.

L'analyse des résultats obtenus en pression capillaire globale (chapitre 3) permet de justifier le choix de la pression globale comme variable primaire de l'écoulement. En effet, la pression capillaire apparente obtenue par soustraction entre la pression capillaire globale et la pression capillaire eau-huile est lissée pour une saturation en eau croissante. D'autres approches classiques aboutissent à des singularités aux sommets en eau et en gaz pénalisant ainsi le temps de calcul [Nayagum 2001; Helmig 1997]. Contrairement au modèle de Stone [?] couramment utilisé, les perméabilités triphasiques associées à cette interpolation tiennent explicitement compte des propriétés de chacun des trois fluides ainsi que de la pression de chacune des phases. Les perméabilités obtenues sont donc des variables de la saturation en eau, en gaz, des viscosités, de la pression en gaz, des tensions interfaciales, des pressions capillaires. En outre, les résultats obtenus, concernant le facteur de compressibilité, garantissent la stabilité du schéma reformulé en pression globale/saturation discuté dans le premier chapitre [Chavent *et al.* 2008; Chavent 2009]. Nous décrivons les méthodes numériques appliquées à la discrétisation des équation de l'écoulement et présentons les premiers cas test de validation des différents modules (convection, diffusion, gravité).

4.1 Equation en pression globale

Nous définissons la pression globale P [Chavent and Jaffré 1986] par :

$$\begin{cases} P(\mathbf{x}, t) = P_2(\mathbf{x}, t) + P_c^g(S(\mathbf{x}, t), P(\mathbf{x}, t)) \\ \forall \mathbf{x} \in \Omega, \forall t > 0 \end{cases} \quad (4.1)$$

La condition de stabilité (3.14) assure l'existence d'une seule et unique solution P dans l'intervalle $[P_{min}, P_{max}]$. En sommant sur les trois phases l'équation de conservation de la masse pour $j = 1, 2, 3$, on obtient, en utilisant la condition de différentielle totale évoquée dans le chapitre 3 :

$$\begin{cases} \phi \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_j (B_j S_j) \right) + \nabla \cdot (\mathbf{q}) = Q_t \\ \mathbf{q} = -d\mathbf{K} \cdot \left[\left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \right) \nabla P - \bar{\rho} \mathbf{g} \right] \\ \rho(s, p_2) = \sum_{j=1}^3 f_j(s, p_2) \rho_j \end{cases} \quad (4.2)$$

qui montre que l'équation de pression globale en système triphasique à travers l'expression de \mathbf{q} s'exprime uniquement à l'aide d'un gradient de pression. Si l'hypothèse de différentielle totale n'avait pas été faite sur la forme des perméabilités triphasiques et des pressions capillaires, le membre de droite de l'équation de pression aurait comporté des termes ∇S_1 et ∇S_3 et le couplage entre équations de saturation et de pression aurait été plus important [Chavent and Salzano 1985].

On donne ici l'équation de pression globale appliquée à un système triphasique eau/huile/air avec comme seule phase compressible l'air ($B_1 = B_2 = 1$). Par convention, nous notons $P_c^{j2} = P_c^{j2} - P_c^g$ et $\omega = 1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p}$. En écrivant que $S_2 = 1 - S_1 - S_3$, il vient

$$\phi \frac{\partial}{\partial t} ((B_3 - 1)S_3) + \nabla \cdot (\mathbf{q}) = Q_t \quad (4.3)$$

ainsi que l'expression du flux total

$$\mathbf{q} = -d\mathbf{K} \cdot [\omega \nabla P - \bar{\rho} \mathbf{g}] \quad (4.4)$$

Compte tenu de la définition de la pression globale (4.1), on peut écrire que $P_2 = P - P_c^g$ et $P_3 = P + P_c^{32} - P_c^g$. Donc, à partir de :

$$\phi S_3 B_3' \frac{\partial P_3}{\partial t} + \phi (B_3 - 1) \frac{\partial S_3}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q}) = Q_t \quad (4.5)$$

il vient :

$$\phi S_3 B_3' \omega \frac{\partial P}{\partial t} + \phi S_3 B_3' \omega \frac{\partial P_c^{32}}{\partial t} + \phi (B_3 - 1) \frac{\partial S_3}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q}) = Q_t \quad (4.6)$$

avec $B_3' = \frac{\partial B_3}{\partial P_3}$. Finalement, en considérant que la variation de la pression capillaire gaz/huile est petite par rapport à celle de la pression globale [Nayagum 2001], le terme temporel en pression capillaire P_c^{32} peut être négligé, l'équation en pression globale se réécrit alors sous la forme :

$$\phi S_3 B_3' \omega \frac{\partial P}{\partial t} + \phi (B_3 - 1) \frac{\partial S_3}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q}) = Q_t \quad (4.7)$$

4.2 Equations en saturation

Nous allons déterminer l'expression de l'équation de saturation en eau en sachant que les développements sont identiques pour le gaz (au facteur de volume B_3 près). L'objectif est de décrire la conservation de la masse pour l'eau en tenant compte de l'expression du flux total \mathbf{q} dégagée précédemment. Considérons l'identité suivante :

$$\begin{aligned} f_1 \mathbf{q}_1 &\Rightarrow f_1 \underbrace{(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3)}_{\mathbf{q}} - f_1 \mathbf{q}_2 - f_1 \mathbf{q}_3 = \underbrace{(f_1 + f_2 + f_3)}_{=1} \mathbf{q}_1 - f_2 \mathbf{q}_1 - f_3 \mathbf{q}_1 \\ &\Leftrightarrow \mathbf{q}_1 = f_1 \mathbf{q} - f_1 \mathbf{q}_2 - f_1 \mathbf{q}_3 + f_2 \mathbf{q}_1 + f_3 \mathbf{q}_1 \end{aligned}$$

En ré-injectant l'expression des flux par phase et en mettant en facteur la mobilité totale et la perméabilité intrinsèque :

$$\mathbf{q}_1 = f_1 \mathbf{q} + d\mathbf{K} \cdot [f_1 f_2 (\nabla P_2 - \rho_2 \mathbf{g}) + f_1 f_3 (\nabla P_3 - \rho_3 \mathbf{g}) - f_1 (f_2 + f_3) (\nabla P_1 - \rho_1 \mathbf{g})]$$

soit

$$\mathbf{q}_1 = f_1 \mathbf{q} + d\mathbf{K} \cdot \left[f_1 f_2 \underbrace{\nabla(P_2 - P_1)}_{-P_c^{12}} + f_1 f_3 \underbrace{\nabla(P_3 - P_1)}_{P_c^{32} - P_c^{12}} - \mathbf{g} [f_1 f_2 \rho_2 + f_1 f_3 \rho_3 - f_1 (1 - f_1) \rho_1] \right]$$

En exprimant le produit $f_1 f_2 = f_1 (1 - f_1 - f_3)$, il vient :

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_1 &= f_1 \mathbf{q} - d\mathbf{K} \cdot [f_1 (1 - f_1) \nabla P_c^{12} - f_1 f_3 \nabla P_c^{32}] \\ &\quad - d\mathbf{K} \cdot [f_1 (1 - f_1) (\rho_2 - \rho_1) + f_1 f_3 (\rho_3 - \rho_2)] \mathbf{g} \end{aligned}$$

Ainsi, l'équation de saturation pour l'eau a la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \frac{\partial}{\partial t} (B_1 S_1) + \nabla \cdot (\mathbf{q}_1) = Q_1 \\ \mathbf{q}_1 = f_1 \mathbf{q} - d\mathbf{K} \cdot [f_1 (1 - f_1) \nabla P_c^{12} - f_1 f_3 \nabla P_c^{32}] - d\mathbf{K} \cdot f_1 \Delta \rho_1 \mathbf{g} \\ \Delta \rho_1 = [(1 - f_1) (\rho_2 - \rho_1) + f_3 (\rho_3 - \rho_2)] \end{array} \right. \quad (4.8)$$

En faisant l'hypothèse de différentielle totale (2.8), les gradients de pression capillaire sont exprimés en fonction de la pression capillaire globale, soit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \frac{\partial}{\partial t} (B_1 S_1) + \nabla \cdot (\mathbf{q}_1) = Q_1 \\ \mathbf{q}_1 = f_1 \mathbf{q} - d\mathbf{K} \cdot f_1 [\nabla(P_c^{12}) - (f_1 \nabla P_c^{12} + f_3 \nabla P_c^{32})] - d\mathbf{K} \cdot f_1 \Delta \rho_1 \mathbf{g} \\ \Leftrightarrow f_1 \mathbf{q} - df_1 \mathbf{K} \cdot \left[\nabla(P_c^{12} - P_c^g) + \Delta \rho_1 \mathbf{g} + \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \nabla P \right] \end{array} \right.$$

Enfin, le gradient de la pression globale est exprimé à partir de l'expression de la vitesse totale (4.2), soit :

$$\nabla P = \left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \right)^{-1} \left[\bar{\rho} \mathbf{g} - \frac{\mathbf{q}}{d\mathbf{K}} \right]$$

ainsi, il vient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \frac{\partial}{\partial t} (B_1 S_1) + \nabla \cdot (\mathbf{q}_1) = Q_1 \\ \\ \mathbf{q}_1 = f_1 \mathbf{q} - df_1 \mathbf{K} \cdot \left[\nabla P_c^{1g} + \Delta \rho_1 \mathbf{g} + \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \right)^{-1} \left[\bar{\rho} \mathbf{g} - \frac{\mathbf{q}}{d\mathbf{K}} \right] \right] \\ \\ \Leftrightarrow \underbrace{\left[1 + \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \right)^{-1} \right]}_{\left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \right)^{-1}} f_1 \mathbf{q} - df_1 \mathbf{K} \cdot \left[\nabla (P_c^{12} - P_c^g) + \mathbf{g} \left[\Delta \rho_1 + \bar{\rho} \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \right)^{-1} \right] \right] \end{array} \right.$$

Ainsi, les équations de saturation respectant la condition de différentielle totale sont pour $j = 1, 3$:

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial}{\partial t} (B_j S_j) + \nabla \cdot (\mathbf{q}_j) &= Q_j \\ \\ \mathbf{q}_j &= \left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \right)^{-1} f_j \mathbf{q} - df_j \mathbf{K} \cdot \left[\nabla P_c^{jg} + \left[\Delta \rho_j + \bar{\rho} \frac{1 - \omega}{\omega} \right] \mathbf{g} \nabla Z \right] \end{aligned} \quad (4.9)$$

avec

$$\bar{\rho} = \sum_{i=1}^3 f_i \rho_i$$

$$\Delta \rho_j = [(1 - f_j)(\rho_2 - \rho_j) + f_{j+1}(\rho_{j+1} - \rho_2)]$$

En ne faisant pas l'hypothèse de différentielle totale, l'équation de saturation de l'eau et du gaz (4.8) comporte des gradients des deux pressions capillaires pondérés par des coefficients fractionnels différents. La résolution des termes de diffusion des deux équations de saturation nécessitera la résolution de quatre système linéaires : deux pour l'eau ($f_1(1 - f_1)\nabla P_c^{12}$), ($f_1 f_3 \nabla P_c^{12}$) et deux pour la phase gaz ($f_3(1 - f_3)\nabla P_c^{32}$), ($f_1 f_3 \nabla P_c^{32}$). Faire l'hypothèse de différentielle totale basée sur la détermination des perméabilités relatives triphasiques (cf. Section 2.2) nécessite de ne calculer que ($f_1 \nabla P_c^{12} - P_c^g$), ($f_3 \nabla P_c^{32} - P_c^g$) et permet donc de diviser les coûts de calculs par deux [Chavent and Salzano 1985].

Remarque : Dans le cas de Buckley-Leverett (incompressible), les flux fractionnaires ne dépendent que de S_1 et S_3 (pas de la pression). Ainsi, la pression capillaire globale P_c^g ne dépend que de S_1 et S_3 soit

$$\mathbf{q}_1 = f_1 \mathbf{q} - df_1 \mathbf{K} \cdot [\nabla (P_c^{12} - P_c^g) + \Delta \rho_1 \mathbf{g} \nabla Z] \quad (4.10)$$

4.3 Préliminaires à la méthode des éléments finis mixtes

Soit un domaine $\Omega \in \mathbb{R}^2$ (2D). Considérons une partition de Ω en éléments notés E . Ainsi, $\cup_k E = \mathcal{T}_h$ constitue une triangulation du domaine Ω . Dans la suite, le flux volumique total ser

noté \mathbf{q} .

Nous noterons ε_h l'ensemble des facettes (sens large) du domaine discret tel que $\cup_k \zeta_k = \varepsilon_h$. Les frontières du domaine seront notées $\partial\Omega_{N,D,M}$ traitant respectivement d'une condition à la limite de type Neumann, Dirichlet ou Mixte (Cauchy).

Posons l'espace de Raviart Thomas de plus petit degré $\mathbb{RT}_0|_E$ sur l'élément E . L'espace vectoriel des polynômes de Raviart-Thomas $\mathbb{RT}_0|_E$ est généré par trois ou quatre fonctions suivant que l'élément considéré est triangulaire ou quadrangulaire. Nous noterons ces fonctions de base w_j . Le champ de vitesse discret $\tilde{\mathbf{q}}_E \in \mathbb{RT}_0|_E$ sur l'élément E s'exprime comme une combinaison linéaire des vecteurs de bases \mathbf{w}_j de $\mathbb{RT}_0|_E$ soit :

$$\tilde{\mathbf{q}}_E = \sum_j Q_{E,\partial E_j} \mathbf{w}_j \quad (4.11)$$

Avec $Q_{E,\partial E_j}$ qui est défini comme le flux à travers la facette ∂E_j appartenant à l'élément E . Les fonctions vectorielles \mathbf{w}_i ont des propriétés attachées à leur espace de référence $\mathbb{RT}_0|_E$ soit :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{w}_i &= \frac{1}{|\zeta|} \text{ sur } E, & \text{et} & \int_E \nabla \cdot \mathbf{w}_i \, dx = 1 \\ (\mathbf{w}_i \cdot \mathbf{n}_{\partial E_j})|_E &= \begin{cases} \frac{1}{|\partial E_i|} & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} & \text{et} & \int_{\partial E_j} (\mathbf{w}_i \cdot \mathbf{n}_{\partial E_j}) \, ds_{\partial E_j} = \delta_{ij} \end{aligned} \quad (4.12)$$

Ici δ_{ij} est le symbole de Kronecker, (i, j) variant avec le nombre de sommet de l'élément. On note $|\partial E_j|$ et $|\zeta|$ respectivement l'aire (ou la longueur) de la facette ∂E_j et le volume (ou la surface) de l'élément E . La normale sortante est notée $\mathbf{n}_{\partial E_j}$. La formulation mixte permet de décrire la pression moyenne à partir des fonctions de forme de $L^2(\Omega)$ alors que l'expression constitutive de la vitesse totale est décrite à partir de $H(\text{div}; \Omega)$.

4.4 Application des éléments finis mixtes dans la résolution de l'équation de pression globale

4.4.1 Discrétisation du flux total

L'approximation mixte consiste à approcher simultanément le champ de vitesse totale et la pression globale.

Nous posons dans la suite du développement P_E comme étant l'approximation de la pression globale sur E . De même, nous introduisons un terme de valeur moyenne (ou trace) de la pression globale et de la saturation (eau et gaz) sur la facette ∂E_j noté $\text{TP}_{E,\partial E_j}$ et $\text{TS}_{1E,\partial E_j}$, $\text{TS}_{3E,\partial E_j}$.

En posant $\Lambda_\rho = g\bar{\rho}/\omega$, on peut écrire le flux total sous la forme suivante :

$$[d\omega \mathbf{K}]^{-1} \cdot \mathbf{q} = (\nabla P - \Lambda_\rho \nabla z)$$

La formulation faible du problème est obtenue par produit scalaire de l'équation de la vitesse totale par un vecteur $\mathbf{u} \in H(\text{div}; \Omega)$ de l'espace test puis par intégration sur l'élément E et transformation de Green (théorème de flux-divergence) :

$$\int_E [d\omega \mathbf{K}]^{-1} \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{u} \, d\mathcal{E} = \int_E P \nabla \cdot \mathbf{u} \, d\mathcal{E} - \int_{\partial E} P \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{\partial E} \, d\Gamma_{\mathcal{E}} + \int_E \Lambda_\rho \nabla z \cdot \mathbf{u} \, d\mathcal{E} \quad (4.13)$$

En introduisant les approximations des variables P , \mathbf{q} et respectivement la pression globale la vitesse totale tel que $(\mathbf{q}_E; P_E) \in (\mathbb{RT}_0|_E \times \nabla\mathbb{RT}_0|_E)$, ainsi que d_E resp. $\Lambda_{\rho E}$ et ω_E l'approximation de d resp. Λ_ρ et ω sur E on a :

$$\int_E [d_E \mathbf{K} \omega_E]^{-1} \cdot \mathbf{q}_E \cdot \mathbf{u}_E \, d\mathcal{E} = \int_E P_E \nabla \cdot \mathbf{u}_E \, d\mathcal{E} - \sum_{\partial E_j \in \partial E} \int_{\partial E_j} \text{TP}_{E, \partial E_j} \mathbf{u}_E \cdot \mathbf{n}_{\partial E_j} \, d\Gamma_{\partial E_j} + \Lambda_{\rho E} \int_E \nabla z \cdot \mathbf{u}_E \, d\mathcal{E} \quad (4.14)$$

Ainsi, en introduisant l'expression approchée de la vitesse totale comme la somme des flux traversant l'élément E , $\mathbf{q}_E = \sum_j Q_{E, \partial E_j} \mathbf{w}_j$, en prenant comme fonction test $\mathbf{w}_i \in \mathbb{RT}_0|_E$ (4.12), nous obtenons l'expression suivante :

$$\sum_{\partial E_j \in \partial E} Q_{E, \partial E_j} \underbrace{\int_E \frac{1}{\omega_E d_E} \mathbf{w}_i \cdot \mathbf{K} \cdot^{-1} \mathbf{w}_j \, d\mathcal{E}}_{B_{Eij}} = P_E \int_E \nabla \cdot \mathbf{w}_i \, d\mathcal{E} - \sum_{\partial E_j \in \partial E} \text{TP}_{E, \partial E_j} \int_{\partial E_j} \mathbf{n}_{\partial E_j} \cdot \mathbf{w}_i \, d\Gamma_{\partial E_j} + \Lambda_{\rho E} \underbrace{\int_E \nabla z \cdot \mathbf{w}_i \, d\mathcal{E}}_{G_{Ei}}$$

Avec les propriétés dégagées précédemment (4.12), et en notant $(\cdot)_{E, \partial E_j} = (\cdot)_{E_j}$, nous obtenons :

$$\sum_{j \in \partial E} Q_{E, j} B_{Eij} = P_E - \text{TP}_{Ei} + \Lambda_{\rho E} G_{Ei}$$

Avec la matrice B_E inversible, l'expression du flux total traversant la facette ∂E_i (notée i) de l'élément E (noté E) s'obtient facilement :

$$Q_{Ei} = \sum_{j \in \partial E} B_{Eij}^{-1} (P_E - \text{TP}_{Ej}) + \Lambda_{\rho E} \sum_{j \in \partial E} B_{Eij}^{-1} G_{Ej} \quad (4.15)$$

4.4.2 Discrétisation de l'équation de pression globale

Le terme variationnel en saturation en gaz n'a pas été pris en compte. La forme variationnelle est obtenue en multipliant l'équation de pression globale (4.7) par une fonction test constante sur l'élément $\mathbf{v} \in L^2(E)$, $\mathbf{q}_E \in \mathbb{R}$, avec $P_E \in \mathbb{R}$ et $\mathbf{q}_E \in \mathbb{RT}_0|_E$ les approximations respectives de la pression globale et du flux total sur E , puis en intégrant sur l'élément :

$$\phi \int_E B'_3 \omega \frac{\partial P}{\partial t} \mathbf{v} \, d\mathcal{E} - \int_E \nabla \cdot (\mathbf{q}) \mathbf{v} \, d\mathcal{E} + \int_E Q_t \mathbf{v} \, d\mathcal{E} = 0 \quad (4.16)$$

En remarquant que P_E est la valeur de pression globale moyenne sur l'élément E et compte tenu de (4.11), (4.12), $\nabla \cdot (\mathbf{q}_E) = \frac{1}{|E|} \sum_{i \in \partial E} Q_{Ei}$ est également constant sur E ($|E|$ étant l'aire de l'élément E), les fonctions tests \mathbf{v} doivent nécessairement être constantes sur E (non nulles) :

$$\phi \int_E B'_3 \omega \frac{\partial P_E}{\partial t} \mathbf{v}_E \, d\mathcal{E} - \int_E \nabla \cdot (\mathbf{q}_E) \mathbf{v}_E \, d\mathcal{E} + \int_E Q_t \mathbf{v}_E \, d\mathcal{E} = 0. \quad (4.17)$$

L'équation de conservation de la masse donne après intégration :

$$\phi |E| B'_3 \omega \frac{\partial P_E}{\partial t} + \sum_{i \in \partial E} Q_{Ei} = |E| Q_{tE}. \quad (4.18)$$

Le terme variationnel est discrétisé suivant un schéma d'Euler implicite en suivant les notations courantes suivante :

$$t \in]0, T], \Delta t = \frac{T}{N} \text{ et } t_n = n\Delta t \forall n \in \llbracket 0, N \rrbracket \quad (4.19)$$

L'équation (4.18) s'écrit en tenant compte de (4.19) :

$$\phi|E|B'_3\omega \frac{P_E^{n+1} - P_E^n}{\Delta t} + \sum_{i \in \partial E} Q_{Ei}^{n+1} = |E|Q_{tE}^n, \quad (4.20)$$

soit en remplaçant l'expression du flux total par son expression discrète (4.15)

$$\phi|E|B'_3\omega \frac{P_E^{n+1} - P_E^n}{\Delta t} + \sum_{i,j \in \partial E} B_{Eij}^{-1} (P_E^{n+1} - \text{TP}_{Ej}^{n+1}) + \Lambda_{\rho E} \sum_{i,j \in \partial E} B_{Eij}^{-1} G_{Ej} = |E|Q_{tE}^n \quad (4.21)$$

En regroupant les termes de pression globale formulés à t_{n+1} , il vient :

$$P_E^{n+1} = \left(\frac{\phi|E|B'_3\omega}{\Delta t} P_E^n - \sum_{i,j \in \partial E} B_{Eij}^{-1} \text{TP}_{Ej}^{n+1} + \Lambda_{\rho E} \sum_{i,j \in \partial E} B_{Eij}^{-1} G_{Ej} + |E|Q_{tE}^n \right) / \left[\frac{\phi|E|B'_3\omega}{\Delta t} + \alpha_E \right] \quad (4.22)$$

avec $\alpha_E = \sum_{i,j \in \partial E} B_{Eij}^{-1}$.

4.4.3 Hybridisation et construction du système algébrique en traces de pression globale

L'hybridisation de la méthode mixte est obtenue en remplaçant l'expression de la pression globale (4.22) au temps t_{n+1} dans l'expression du flux total discret (4.15). En exprimant la continuité du flux à travers chaque facette sur l'ensemble des facettes ε_h , la continuité du flux à travers la facette $\partial E_i \in \varepsilon_h$ (notée i) commune au deux éléments E et E' (i.e. $\partial E_i \subset (\partial E \cap \partial E')$) donne :

$$\begin{aligned} Q_{Ei}^{n+1} + Q_{E'i}^{n+1} = 0 &\Leftrightarrow \\ \alpha_{Ei} P_E^{n+1} - \sum_j (B_{Eij})^{-1} \text{TP}_{Ej}^{n+1} + \Lambda_{\rho E} \sum_{j \in \partial E} (B_{Eij})^{-1} G_{Ej} & \\ + \alpha_{E'i} P_{E'}^{n+1} - \sum_j (B_{E'ij})^{-1} \text{TP}_{E'j}^{n+1} + \Lambda_{\rho E} \sum_{j \in \partial E'} (B_{E'ij})^{-1} G_{E'j} &= 0 \end{aligned} \quad (4.23)$$

avec $\alpha_{Ei} = \sum_{j \in \partial E} (B_{Eij})^{-1}$. Les conditions aux limites de type Neumann consiste à imposer le flux sur la facette appartenant à la frontière Γ_N . La continuité du flux à travers la facette ∂E_i s'exprimera simplement par $Q_{Ei}^{n+1} = Q_N$ sur $\Omega \subset \Gamma_N$. De la même manière, on exprimera la continuité des traces de pression sur chaque facette $\text{TP}_{Ei}^{n+1} = \text{TP}_{E'i}^{n+1}$. Les conditions aux limites de type Dirichlet s'exprime donc naturellement $\text{TP}_{Ej}^{n+1} = \text{TP}_D$ sur $\Omega \subset \Gamma_D$.

Dans l'expression (4.23), le résultat de la substitution (4.22) dans (4.15) conduit à un système algébrique (non linéaire) sur les facettes appartenant à ε_h et dont les inconnues sont les traces de pression globales TP_{Ei}^{n+1} . Nous introduisons d'ores et déjà l'itéré courante k de l'étape de linéarisation. Le choix de la méthode ainsi que les critères de convergence seront discuté dans la section 4.6. En notant $N_f = \text{card}(\varepsilon_h)$ (le nombre total de facette), le système algébrique s'écrit sous forme matricielle soit :

$$\mathbf{M}_{N_f \times N_f} \text{TP}_{N_f}^{n+1, k+1} = \mathbf{F}_{N_f} - \mathbf{R}_{N_f} \quad (4.24)$$

Nous noterons $\gamma_{Ei}^{n+1, k} = \frac{\Delta t (\alpha_{Ei}^{n+1, k})}{\phi|E|B'_3\omega^{n+1, k} + \Delta t \alpha_E^{n+1, k}}$

- Matrice mixte-hybride $\mathbf{M}_{N_f \times N_f}$
 – Termes diagonaux m_{xx}

$$m_{xx} = m_{Eii} + m_{E'j,j} : m_{Eii} = \left(B_{Eii}^{n+1,k} \right)^{-1} - \gamma_{Ei}^{n+1,k} \alpha_{Ei}^{n+1,k} \quad (4.25)$$

- Termes spérique m_{xy}

$$\begin{aligned} m_{xy} &= m_{Eij} = 0 \text{ si la facette } i \in E \text{ et } j \notin E, \text{ sinon} \\ m_{xy} &= m_{Eij} : m_{Eij} = \left(B_{Eij}^{n+1,k} \right)^{-1} - \gamma_{Ei}^{n+1,k} \alpha_{Ej}^{n+1,k} \end{aligned} \quad (4.26)$$

- Membre de droite \mathbf{F}_{N_f}

$$\begin{aligned} f_x = f_{Ei} + f_{E',j} : f_{Ei} &= |E| Q_{t,E} \gamma_{Ei}^{n+1,k} - \Lambda_{\rho E}^{n+1,k} \left[\left(B_{Eij}^{n+1,k} \right)^{-1} - \gamma_{Ei}^{n+1,k} \alpha_{Ej}^{n+1,k} \right] G_{Ei} \\ &+ \gamma_{Ei}^{n+1,k} B_3^{n+1,k} \omega^{n+1,k} \frac{\phi |E|}{\Delta t} P_E^n \end{aligned} \quad (4.27)$$

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 tel que

$$\begin{cases} r_{Ei} = -Q_N \text{ si la facette } i \subset \Gamma_N \\ r_{Ei} = 0 \text{ sinon} \end{cases} \quad (4.28)$$

Si, lors de la construction du système matriciel global, la facette considérée est imposée avec un trace de pression globale (condition de Dirichlet), il faudra mettre à jour le membre de droite \mathbf{F}_{N_f} tel que :

$$f_{Ei} = f_{Ei} - \left[\left(B_{Eij}^{n+1,k} \right)^{-1} - \gamma_{Ei}^{n+1,k} \alpha_{Ej}^{n+1,k} \right] \text{TP}_{Ej} \text{ si la facette } j \subset \Gamma_D \quad (4.29)$$

4.5 Approche découplée pour la résolution de l'équation de saturation

L'équation de saturation pour l'eau (4.10) et le gaz comporte un terme diffusif et un terme convectif. Nous utiliserons la méthodes des éléments finis mixtes pour discrétiser le terme diffusif dans les deux équations de saturations (eau/gaz).

4.5.1 Application des éléments finis mixtes à la résolution du terme diffusif : formulation variationnelle

Discrétisation du flux diffusif

Nous rappelons ici la partie diffusive des équations de saturation de l'eau et du gaz associant les effets gravitaires, capillaires et les termes « puits-sources » et $l = 1, 3$.

$$\phi \frac{\partial}{\partial t} (B_l S_l) = \nabla \cdot [\mathbf{h}_l \nabla S_l] + \nabla \cdot \mathbf{G}_l + Q_l \quad (4.30)$$

Le produit du coefficient de diffusion $\mathbf{h}_l = -df_l \frac{dP_c^{lg}}{dS_l} \mathbf{K}$, en notant $\mathbf{h}_l(s, p_2) = \sigma(s, p_2) \mathbf{K}$, et du vecteur ∇S_l détermine un flux diffusif $\tilde{\mathbf{q}}_l = -\sigma \mathbf{K} \cdot \nabla S_l$. Nous avons défini de telle sorte que

$\sigma_l(s, p_2) > 0$. Néanmoins, on remarque que par construction, le terme h_l peut être annulé si f_l est nul et donc poser un problème lors de la formulation mixte classique (4.33). Ce point sera discuter dans la section suivante lors de la détermination du coefficient de diffusion. Par ailleurs, le terme \mathcal{G}_l est introduit :

$$\mathcal{G}_l = df_l \mathbf{K} \cdot \left[\Delta \rho_l + \bar{\rho} \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p} \right)^{-1} \right] \mathbf{g} = df_l \left[\Delta \rho_l + \bar{\rho} \frac{1 - \omega}{\omega} \right] g \mathbf{K} \cdot \nabla z \quad (4.31)$$

Nous poserons dans la suite du développement S_{lE} comme étant l'approximation de la saturation moyenne de la phase l sur E . De même, nous introduisons un terme de valeur moyenne (ou trace) de la saturation sur la facette ∂E_j de E noté TS_{lE_j} . Enfin, le flux diffusif sera approché par $\tilde{\mathbf{q}}_{l,E}$ associant la valeur moyenne de $\sigma_{l,E} > 0$. Sa valeur est entièrement déterminé par la somme des flux élémentaires traversant les facettes ∂E_j de E , ainsi :

$$\tilde{\mathbf{q}}_{l,E} = \sum_j \tilde{Q}_{l,E_j} \mathbf{w}_j \quad (4.32)$$

avec \mathbf{w}_i étant définies comme étant les fonctions de bases de \mathbb{RT}_0 (4.12).

La formulation faible du problème est obtenue par produit scalaire de l'équation de flux diffusif par un vecteur $\mathbf{u} \in H(\text{div}; \Omega)$ de l'espace test,

$$- \left(\frac{\tilde{\mathbf{q}}_l}{\sigma_l \mathbf{K}} \right) \cdot \mathbf{u} = \nabla S_l \cdot \mathbf{u} \quad (4.33)$$

puis intégration sur l'élément E et transformation de Green (théorème de flux-divergence), en prenant les approximations adéquates sur E :

$$\int_E \left(\frac{\tilde{\mathbf{q}}_{l,E}}{\sigma_{l,E} \mathbf{K}} \right) \cdot \mathbf{u}_E d\mathcal{E} = \int_E S_{lE} \nabla \cdot \mathbf{u}_E d\mathcal{E} - \sum_{j \in \partial E} \int_{\partial E_j} \text{TS}_{lE_j} \mathbf{u}_E \cdot \mathbf{n}_{\partial E_j} d\Gamma_{\partial E_j}$$

En prenant comme fonctions test \mathbf{u}_E , les fonctions de bases de l'élément soit \mathbf{w}_i , on a :

$$\int_E \frac{1}{\sigma_{l,E}} \tilde{\mathbf{q}}_{l,E} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{w}_i d\mathcal{E} = \int_E S_{lE} \nabla \cdot \mathbf{w}_i d\mathcal{E} - \sum_{j \in \partial E} \int_{\partial E_j} \text{TS}_{lE_j} \mathbf{w}_i \cdot \mathbf{n}_{\partial E_j} d\Gamma_{\partial E_j}$$

Les traces des saturations sont constantes sur chaque facettes et la saturation est une valeur moyenne sur l'élément E , en exprimant les propriétés de \mathbb{RT}_0 (4.12) et en utilisant l'expression du flux diffusif associé à la phase l (4.32), on exprime les intégrales du membre de droite et on exprime le flux diffusif \tilde{Q}_{l,E_i} traversant la facette ∂E_i de l'élément E soit :

$$\tilde{Q}_{l,E_i} = \tilde{\alpha}_{l,E_i} S_{lE} - \sum_j (A_{l,E_{ij}})^{-1} \text{TS}_{lE_j} \quad (4.34)$$

avec $\tilde{\alpha}_{l,E_i} = \sum_j (A_{l,E_{ij}})^{-1} = \int_E \frac{1}{\sigma_{l,E}} (\mathbf{K}^{-1} \mathbf{w}_j) \cdot \mathbf{w}_i d\mathcal{E}$

Discrétisation de l'équation de conservation de la masse

Le terme diffusif de l'équation de conservation de la masse de la phase α est obtenue en multipliant l'équation précédente (4.30) par une fonction test constante sur l'élément $v \in L^2(E)$,

avec $S_{lE} \in \mathbb{R}$ et $\tilde{\mathbf{q}}_{\alpha,E} \in \mathbb{RT}_0|_E$ les approximations respectives de la saturation moyenne (phase l) et du flux diffusif sur E . En intégrant sur l'élément, on a :

$$\phi \int_E \frac{\partial}{\partial t} (B_l S_{lE}) \mathbf{v}_E \, d\mathcal{E} + \int_E \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{q}}_{l,E}) \mathbf{v}_E \, d\mathcal{E} + \int_E \nabla \cdot (\mathbf{g}_l) \mathbf{v}_E \, d\mathcal{E} = \int_E Q_l \mathbf{v}_E \, d\mathcal{E}$$

or

$$\nabla \cdot (\tilde{\mathbf{q}}_{l,E}) = \nabla \cdot \left(\sum_j \tilde{Q}_{l,E_j} \mathbf{w}_j \right) = \sum_j \tilde{Q}_{l,E_j} \nabla \cdot (\mathbf{w}_j) = \frac{1}{|E|} \sum_i \tilde{Q}_{l,E_i}$$

Le milieu poreux est supposé incompressible. Le facteur de volume B_l est supposé constant sur la maille E . Son expression dépend de la pression de la phase l . On peut donc écrire que $B_{l,E} = \tilde{c}_{l,E} P_{l,E}$. On remarque que l'équation de saturation pour l'eau $l = 1$ est simplifiée car $B_1 = 1$. Pour le gaz, en tenant compte de la définition de la pression globale $B_{3,E} = \tilde{c}_{3,E} P_{3,E} = \tilde{c}_{3,E} (P_E + P_{c,E}^{32} - P_{c,E}^g)$. Ainsi, nous pouvons exprimer l'intégrale de la divergence du flux diffusif sur l'élément tel que :

$$\phi \tilde{c}_{l,E} P_{l,E} \int_E \frac{\partial}{\partial t} S_{l,E} \mathbf{v}_E \, d\mathcal{E} + \frac{1}{|E|} \sum_i \tilde{Q}_{l,E_i} \int_E \mathbf{v}_E \, d\mathcal{E} + \int_E \nabla \cdot (\mathbf{g}_l) \mathbf{v}_E \, d\mathcal{E} = \int_E Q_l \mathbf{v}_E \, d\mathcal{E}$$

Les fonctions tests ont été prises constantes sur l'élément, ce qui nous permet de diviser à gauche et à droite par \mathbf{v}_E et donc d'écrire, suivant un schéma d'Euler implicite en temps que :

$$\begin{aligned} \phi |E| \tilde{c}_{l,E}^{n+1} P_{l,E}^{n+1} \frac{S_{l,E}^{n+1} - S_{l,E}^n}{\Delta t} + \sum_i \left[\tilde{\alpha}_{l,E_i}^{n+1} S_{l,E}^{n+1} - \sum_j \left(A_{l,E_{ij}}^{n+1} \right)^{-1} \text{TS}_{l,E_j}^{n+1} \right] \\ + \int_{\partial E} \mathbf{g}_l^{n+1} \cdot \mathbf{n}_{\partial E} \, d\Gamma_{\mathcal{E}} = \int_E Q_l^n \, d\mathcal{E} \end{aligned}$$

en ayant pris soin d'exprimer l'intégrale élémentaire du terme gravitaire en une intégrale de frontière. En posant $\tilde{\alpha}_{l,E} = \sum_i \tilde{\alpha}_{l,E_i}$ ainsi que $F_{l,E}^n = \int_E Q_l^n \, d\mathcal{E}$

$$\phi |E| \tilde{c}_{l,E}^{n+1} P_{l,E}^{n+1} \frac{S_{l,E}^{n+1} - S_{l,E}^n}{\Delta t} + \tilde{\alpha}_{l,E}^{n+1} S_{l,E}^{n+1} - \sum_{i,j} \left(\tilde{A}_{l,E_{ij}}^{n+1} \right)^{-1} \text{TS}_{l,E_j}^{n+1} + \int_{\partial E} \mathbf{g}_l^{n+1} \cdot \mathbf{n}_{\partial E} \, d\Gamma_{\mathcal{E}} = F_{l,E}^n$$

Choix et détermination du coefficient de diffusion

Nous venons de voir que le coefficient de diffusion σ_l dépend de la saturation de la phase étudiée. La formulation du terme diffusif de l'équation de saturation à l'aide des éléments finis mixtes hybrides introduit une valeur moyenne sur l'élément $\sigma_{l,E}$. Sa détermination peut être réalisée soit à partir de la valeur moyenne de la saturation sur l'élément $\sigma_{l,E} = \sigma_{l,E}(S_{lE})$ soit de la moyenne arithmétique des traces sur E tel que

$$\sigma_{l,E} = \frac{1}{N_{f|E}} \sum_i \sigma_{l,E}(\text{TS}_{l,E_i}), \quad (4.35)$$

avec $N_{f|E}$ le nombre de facette sur l'élément E . Nous retiendrons cette dernière approche dans la suite de notre démarche pour évaluer l'ensemble des variables secondaires [Nayagum 2001]. Il a été montré sur des cas diphasiques purement diffusif que la première approche ne permettait pas de reproduire le front de saturation (écoulement bidirectionnel de McWhorter-Sunada).

Traitement de l'intégrale du flux gravitaire

Le traitement du terme de flux gravitaire fait l'objet d'un traitement particulier. En effet, l'intégrale de frontière est décomposée en une somme d'intégrales sur les facettes de l'élément. Le flux gravitaire a été exprimé localement comme suit à partir de son expression (4.31) :

$$\mathcal{G}_l^{n+1} = d_E^{n+1} f_{l,E}^{n+1} \left[\Delta \rho_l^{n+1} + \bar{\rho}_E^{n+1} \frac{1 - \omega_E^{n+1}}{\omega_E^{n+1}} \right] g \mathbf{K} \cdot \nabla z = \text{TG}_{l,E}^{n+1} \mathbf{K} \cdot \nabla z$$

Ici, le terme $\text{TG}_{l,E}^{n+1}$ exprime la valeur moyenne du terme de gravité évalué à partir des traces de saturation. Le flux gravitaire est exprimé à l'aide du théorème de la divergence $\int_E \nabla \cdot (\mathcal{G}_l^{n+1}) = \int_{\partial E} \mathcal{G}_l^{n+1} \cdot \mathbf{n}_{\partial E}$, avec $\mathbf{n}_{\partial E}$ le vecteur normal (sortant) à la facette :

$$\mathbf{G}_{l,E}^{n+1} = \int_{\partial E} \mathcal{G}_l^{n+1} \cdot \mathbf{n}_{\partial E} \, d\Gamma_{\mathcal{E}} = \sum_i \text{TG}_{l,E_i}^{n+1} \int_{\partial E_i} (\mathbf{K} \cdot \nabla z) \cdot \mathbf{n}_{\partial E_i} \, d\Gamma_{\partial E_i}$$

Considérations pratiques : Le traitement numérique du terme $\int_{\partial E_i} (\mathbf{K} \cdot \nabla z) \cdot \mathbf{n}_{\partial E_i} \, d\Gamma_{\partial E_i}$ tient compte de l'anisotropie du tenseur \mathbf{K} . Prenons un exemple en dimension 2 avec un axe y orienté dans le sens opposé au vecteur \mathbf{g} . Le calcul des deux composantes du vecteur normal issu de la facette ∂E_i conduit à :

$$n_{\partial E_i}^x = -(y_p - y_{p+}) / \|\partial E_i\|$$

$$n_{\partial E_i}^y = (x_p - x_{p+}) / \|\partial E_i\|$$

avec x_p, y_p les coordonnées du point p appartenant à la facette ∂E_i constitué par les points $p, p+$ et $\|\partial E_i\|$ la norme de la facette ∂E_i . Ainsi, après intégration, il vient :

$$\mathbf{G}_{l,E}^{n+1} = \sum_i |\partial E_i| (K_E^{xy} n_{\partial E_i}^x + K_E^{yy} n_{\partial E_i}^y) \text{TG}_{l,E_i}^{n+1}$$

Remarque : En système diphasique (eau/huile) incompressible $\omega = 1$, le terme de flux gravitaire associé à l'unique équation de saturation en eau s'exprime sur l'élément E à l'instant $(n+1)$:

$$\mathbf{G}_{1,E}^{n+1} = \sum_i d_E^{n+1} f_{1,E}^{n+1} (\rho_1 - \rho_2) g \int_{\partial E_i} (\mathbf{K} \cdot \nabla z) \cdot \mathbf{n}_{\partial E_i} \, d\Gamma_{\partial E_i} \quad (4.36)$$

Expression du flux à travers une facette ∂E_i

Nous avons une expression de l'équation de conservation de la masse de la phase α qui s'écrit :

$$\phi|E| \tilde{c}_{l,E}^{n+1} P_{l,E}^{n+1} \frac{S_{l,E}^{n+1} - S_{l,E}^n}{\Delta t} + \tilde{\alpha}_{l,E}^{n+1} S_{l,E}^{n+1} - \sum_{i,j} \left(\tilde{A}_{l,E_{ij}}^{n+1} \right)^{-1} \text{TS}_{l,E_j}^{n+1} + \mathbf{G}_{l,E}^{n+1} = F_{l,E}^n$$

En regroupant les termes en saturation à l'instant $(n+1)$, l'équation précédente s'écrit :

$$\tilde{S}_{l,E}^{n+1} = \left(S_{l,E}^n \frac{\phi|E| \tilde{c}_{l,E}^{n+1} P_{l,E}^{n+1}}{\Delta t} + \sum_{i,j} \left(\tilde{A}_{l,E_{ij}}^{n+1} \right)^{-1} \text{TS}_{l,E_j}^{n+1} + (F_{l,E}^n - \mathbf{G}_{l,E}^{n+1}) \right) / \left[\frac{\phi|E| \tilde{c}_{l,E}^{n+1} P_{l,E}^{n+1}}{\Delta t} + \tilde{\alpha}_{l,E}^{n+1} \right] \quad (4.37)$$

En ré-injectant l'équation précédente dans l'expression du flux prise au temps t_{n+1} (4.34), on a une équation du flux à travers la facette ∂E_i à t_{n+1} en fonction des saturations à t_n , et des traces de saturation à t_{n+1} . On obtient donc :

$$\tilde{Q}_{l,Ei}^{n+1} = \frac{\phi|E|\tilde{c}_{l,E}^{n+1}P_{l,E}^{n+1}}{\Delta t} \tilde{\gamma}_{l,Ei}^{n+1} S_{l,E}^n + \tilde{\gamma}_{l,Ei}^{n+1} \sum_j \tilde{\alpha}_{l,Ej}^{n+1} \text{TS}_{l,Ej}^{n+1} + \tilde{\gamma}_{l,Ei}^{n+1} (F_{l,E}^n - \mathbf{G}_{l,E}^{n+1}) - \sum_j \left(\tilde{A}_{l,Eij}^{n+1} \right)^{-1} \text{TS}_{l,Ej}^{n+1} \quad (4.38)$$

$$\text{avec } \tilde{\gamma}_{l,Ei}^{n+1} = \frac{\Delta t \tilde{\alpha}_{l,Ei}^{n+1}}{\phi|E|\tilde{c}_{l,E}^{n+1}P_{l,E}^{n+1} + \Delta t \tilde{\alpha}_{l,E}^{n+1}}$$

Hybridisation en milieu poreux homogène

Le système mixte est ensuite hybridé de la même manière que pour l'équation de pression globale (cf. Section 4.4.3) en exprimant la continuité du flux diffusif à travers chaque facette $\tilde{Q}_{l,Ei}^{n+1}$ ainsi que la continuité des traces de saturation $\text{TS}_{l,Ej}^{n+1}$ en milieu poreux homogène. En milieu poreux hétérogène, la condition de pression étendue [Duijn and de Neef 1998] doit être imposée sur les facettes situées à l'interface de deux milieux poreux (cf. Section 1.3) On exprime donc la continuité du flux sur les facettes i et j appartenant respectivement aux éléments E et E' . On introduit également l'itéré k relatif à l'étape de linéarisation qui sera discuté dans les sections suivantes (cf. Section 4.6). L'approximation mixte hybride s'écrit finalement :

$$\tilde{\mathbf{M}}_{lN_f \times N_f} \text{TS}_{lN_f}^{n+1,k+1} = \tilde{\mathbf{F}}_{lN_f} - \tilde{\mathbf{R}}_{lN_f} \quad (4.39)$$

- Matrice mixte-hybride $\tilde{\mathbf{M}}_{lN_f \times N_f}$
 - Termes diagonaux $\tilde{m}_{l,xx}$

$$\tilde{m}_{l,xx} = \tilde{m}_{l,Eii} + \tilde{m}_{l,E'jj} : \tilde{m}_{l,Eii} = \left(\tilde{A}_{l,Eii}^{n+1,k} \right)^{-1} - \tilde{\gamma}_{l,Ei}^{n+1,k} \tilde{\alpha}_{l,Ei}^{n+1,k} \quad (4.40)$$

- Termes sphériques $\tilde{m}_{l,xy}$

$$\begin{aligned} \tilde{m}_{l,xy} &= \tilde{m}_{l,Eij} = 0 \text{ si la facette } i \in E \text{ et } j \notin E, \text{ sinon} \\ \tilde{m}_{l,xy} &= \tilde{m}_{l,Eij} : \tilde{m}_{l,Eij} = \left(\tilde{A}_{l,Eij}^{n+1,k} \right)^{-1} - \tilde{\gamma}_{l,Ei}^{n+1,k} \tilde{\alpha}_{l,Ej}^{n+1,k} \end{aligned} \quad (4.41)$$

- Membre de droite $\tilde{\mathbf{F}}_{lN_f}$

$$f_x = f_{l,Ei} + f_{l,E'j} : f_{Ei} = \tilde{\gamma}_{l,Ei}^{n+1,k} \left(F_{l,E}^n - \mathbf{G}_{l,E}^{n+1} \right) + \tilde{\gamma}_{l,Ei}^{n+1,k} \tilde{c}_{l,E}^{n+1,k} P_{l,E}^{n+1,k} \frac{\phi|E|}{\Delta t} S_{l,E}^n \quad (4.42)$$

Remarque : La résolution du système précédent permet de trouver les traces de saturation sur les facettes. Connaissant les traces des saturations $\text{TS}_{l,Ei}^{n+1}$ à l'issue de la résolution du système hybridé, nous pouvons calculer les flux diffusifs associés $\tilde{Q}_{l,Ei}^{n+1}$ à partir de (4.38) et donc déterminer les saturations moyennes sur chaque élément $S_{l,E}$ à t^{n+1} suivante (4.37). Le traitement des conditions de Dirichlet est analogue à celui présenté lors de la présolution de la pression globale soit :

$$\tilde{f}_{l,Ei} = \tilde{f}_{l,Ei} - \left[\left(\tilde{A}_{l,Eij}^{n+1,k} \right)^{-1} - \tilde{\gamma}_{l,Ei}^{n+1,k} \tilde{\alpha}_{l,Ej}^{n+1,k} \right] \text{TS}_{l,Ej} \text{ si la facette } j \subset \Gamma_D \quad (4.43)$$

Quant aux conditions de Neumann, le vecteur $\tilde{\mathbf{R}}_l$ sera tel que sa composante $\tilde{r}_{l,Ei} = -Q_N$ si la facette $i \in \Gamma_N$ et $\tilde{r}_{l,Ei} = 0$ sinon.

4.5.2 Application des éléments finis discontinus à la résolution du terme convectif

Après avoir traité le terme de diffusion de l'équation de saturation avec effet de gravité par éléments finis mixtes hybrides (EFMH), nous allons traiter la partie convective par éléments finis discontinus (EFD) particulièrement bien adaptés aux problèmes d'advection dominante. Nous rappelons brièvement comment nous allons construire un espace d'approximation acceptable avec une discrétisation géométrique du domaine Ω

Formulation variationnelle du terme de convection

Le terme convectif de l'équation de saturation s'écrit :

$$\phi \frac{\partial}{\partial t} (B_l S_l) + \nabla \cdot (\mathbf{q} f_l(S_l)) = 0 \quad (4.44)$$

ou f_l est le flux fractionnaire associé à la phase l et fonction de la saturation S_l . Le flux total \mathbf{q} est calculé lors de la résolution de l'équation de pression globale. La nature hyperbolique de cette équation non-linéaire nous conduit à utiliser les éléments finis discontinus [Chavent and Jaffré 1986], [Nayagum 2001] et [Younes *et al.* 2009]. Le domaine Ω est discrétisé avec des éléments finis triangulaire noté E . La formulation faible du problème est obtenu en utilisant l'espace $\mathbf{V}_h = \{v \in L^\infty(\Omega) : \mathbf{v}_{h|E} \in V(E)\}$ avec $V(E)$ représentant l'espace d'approximation sur E . Les fonctions de bases peuvent être discontinues à l'interface de deux éléments. L'approximation par élément finis discontinus P^1 est retenu. L'approche par élément finis discontinus présentée ici considère les saturation aux noeuds (ici noté i) comme inconnue contrairement à l'approche classique dont les inconnues sont prises sur les facettes. Une approximation de la saturation $S_{h,l}(\mathbf{x}, t)$ s'exprime à partir des fonctions de formes w_i^E sur E soit :

$$S_{h,l}(\mathbf{x}, t)|_E = \sum_j S_{l,j}^E(t) w_j^E(\mathbf{x})$$

Ici $S_{l,j}^E$ correspond aux trois valeurs de saturation de la phase l sur chacun des trois noeuds de E . En suivant l'approche proposée par [Younes *et al.* 2009], les trois inconnues sont la valeur moyenne de la saturation notée $\bar{S}_{h,l}^E$ et ses deux déviations suivant chaque direction de l'espace soit $\frac{\partial S_{h,l}^E}{\partial x}$ et $\frac{\partial S_{h,l}^E}{\partial y}$ avec les fonctions d'interpolation P^1 qui conviennent :

$$\begin{aligned} S_{l,1}^E(t) &= \bar{S}_{h,l}^E(t), & w_1^E(x, y) &= 1 \\ S_{l,2}^E(t) &= \frac{\partial S_{h,l}^E}{\partial x}, & w_2^E(x, y) &= x - \bar{x}_E \\ S_{l,3}^E(t) &= \frac{\partial S_{h,l}^E}{\partial y}, & w_3^E(x, y) &= y - \bar{y}_E \end{aligned} \quad (4.45)$$

La formulation variationnelle est obtenue en multipliant (4.44) par la fonction test w_i^E puis en intégrant par partie sur E :

$$\phi \sum_j \left[\frac{\partial}{\partial t} (B_l S_{l,j}^E) \int_E w_j^E \cdot w_i^E d\mathcal{E} \right] = \sum_j \int_E f_{l,j}^E \mathbf{q} \cdot \nabla w_i^E d\mathcal{E} - \sum_{j \in \partial E} \int_{\partial E_j} f_{l,E_j}^+ w_i^E \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_{\partial E_j} d\Gamma_{\partial E_j}$$

avec $\mathbf{n}_{\partial E_j}$ la normale sortante à la facette ∂E_j . Nous noterons dans la suite $|\partial E_j|$ la longueur de la facette ∂E_j et S_{l,E_j}^+ la saturation amont prise sur la facette ∂E_j . En considérant que le flux

est constant à travers la facette ∂E_j , on peut écrire que

$$\int_{\partial E_j} f_{l,E_j}^+ w_i^E \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_{\partial E_j} d\Gamma_{\partial E_j} = \frac{Q_{E_j}}{|\partial E_j|} \int_{\partial E_j} f_{l,E_j}^+ w_i^E d\Gamma_{\partial E_j} \quad (4.46)$$

avec Q_{E_j} le flux total à travers la facette ∂E_j . La saturation amont dans le terme de flux fractionnaire f_{l,E_j}^+ est défini en utilisant un solveur de Riemann [Toro 1997] soit :

$$f_{l,E_j}^+ = \theta_{\partial E_j} f_{l,E_j}^E + (1 - \theta_{\partial E_j}) f_{l,E_j}^{E'} \quad (4.47)$$

ou ici l'exposant du flux fractionnaire indique si la saturation prise en compte est celle de l'élément E ou de l'élément voisin E' partageant ensemble la facette ∂E_j . En définissant la variable $\theta_{\partial E_j}$ tel que :

$$\theta_{\partial E_j} = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_{\partial E_j} \geq 0 \\ 0 & \text{si } \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_{\partial E_j} < 0 \end{cases} \quad (4.48)$$

On obtient un système de trois équation différentielles ordinaires en substituant les fonctions de formes (4.45) dans (4.49). En notant E^1 , E^2 et E^3 les trois éléments adjacents à l'élément courant E et en exprimant la saturation dans le terme de flux fractionnaire f_{l,E_j} , on a :

$$\begin{aligned} \sum_j \frac{\partial}{\partial t} S_{l,j}^E \phi_{B_l}^E \underbrace{\int_E w_j^E w_i^E d\mathcal{E}}_{\mathcal{M}_{ij}} &= \sum_j \int_E f_{l,j}^E \mathbf{q} \cdot \nabla w_i^E d\mathcal{E} - \sum_{m=1}^3 \theta_{\partial E_m} \frac{Q_{E_m}}{|\partial E_m|} \int_{\partial E_m} w_i^E f_{l,E_j}^E d\Gamma_{\partial E_j} \\ &- \sum_{m=1}^3 (1 - \theta_{\partial E_m}) \frac{Q_{E_m}}{|\partial E_m|} \int_{\partial E_m} w_i^E f_{l,E_j}^{E_m} d\Gamma_{\partial E_j} \end{aligned} \quad (4.49)$$

Toutes les intégrales sont calculées analytiquement [Leer 1979]. La discrétisation temporelle de l'équation (4.44) est explicite. Nous renvoyons le lecteur vers [Younes *et al.* 2009] pour le détail des matrices associées. Notons que la matrice de masse \mathcal{M}_{ij} associe le facteur de volume de la phase l qui est pris moyen sur l'élément E (cf. Section 4.5.1). Dans un deuxième temps, on cherche à limiter les oscillations des valeurs de saturations issu du schéma explicite du terme de convection en écrivant que la valeur de la saturation intérieur à l'élément E est bornée. Le critère de courant (CFL) doit être vérifié sur l'ensemble des éléments composant E et un schéma de limitation de pente est utilisé pour supprimer les oscillations non physiques de la solution.

Approche géométrique pour résoudre le problème de limitation de pente

Ici, nous considérons le schéma de limitation de pente introduit par [Chavent and Jaffré 1986] qui est une généralisation du schéma MUSCL de Van Leer. Ce schéma nécessite la résolution d'un problème de minimisation avec de contraintes linéaires de manière à obtenir une solution optimale. L'efficacité du schéma a été montré pour des mailles triangulaires en résolvant le problème de minimisation de manière itérative. Récemment, une nouvelle approche a été développée basée uniquement sur des considérations géométriques [Younes *et al.* 2009]. Nous renvoyons le lecteur vers [Younes *et al.* 2009] pour les détails de l'algorithme de limitation de pente et donnons ici quelques éléments de compréhension. Notons \tilde{S}_l la saturation avant limitation et S_l la saturation après limitation de pente. Le schéma est rendu stable par l'utilisation des limiteurs

de pentes multidimensionnels en posant que \tilde{S}_{l,m_i} est la valeur de saturation au point (x_{m_i}, y_{m_i}) , milieu de la facette ∂E_i soit :

$$\tilde{S}_{l,m_i} = \bar{S}_{h,l}^E + \frac{\partial \tilde{S}_{h,l}^E}{\partial x}(x_{m_i} - \bar{x}_E) + \frac{\partial \tilde{S}_{h,l}^E}{\partial y}(y_{m_i} - \bar{y}_E) \quad (4.50)$$

La limitation de pente en 2D est menée uniquement sur les termes $\frac{\partial \tilde{S}_{h,l}^E}{\partial x}$ et $\frac{\partial \tilde{S}_{h,l}^E}{\partial y}$ de manière à reconstruire les valeurs $\frac{\partial S_{h,l}^E}{\partial x}$ et $\frac{\partial S_{h,l}^E}{\partial y}$ et en remarquant que la valeur $\bar{S}_{h,l}^E$ reste inchangée pour préserver la conservation de la masse. Les valeurs reconstruites \tilde{S}_{l,m_i} doivent satisfaire deux conditions :

1. si \tilde{S}_{l,m_i} est la saturation au milieu de la facette ∂E_i : facette commune aux éléments E et E' alors nécessairement $\tilde{S}_{l,m_i} \in [\bar{S}_{h,l}^E, \bar{S}_{h,l}^{E'}]$ (saturations moyennes de E et E')
2. \tilde{S}_{l,m_i} soit la plus proche possible de S_{l,m_i}

En partant des trois valeurs de saturation (avant limitation) des facettes composant l'élément E soit \tilde{S}_{l,m_1} , \tilde{S}_{l,m_2} et \tilde{S}_{l,m_3} , on cherche le triplet $(S_{l,m_1}, S_{l,m_2}, S_{l,m_3})$ tel que :

$$\begin{cases} \min(\bar{S}_{h,l}^E, \bar{S}_{h,l}^{E^i}) \leq S_{l,m_i} \leq \max(\bar{S}_{h,l}^E, \bar{S}_{h,l}^{E^i}) \text{ pour } i = 1, 2, 3 \\ \sum_{i=1}^3 S_{l,m_i} = 3\bar{S}_{h,l}^E \\ \sum_{i=1}^3 (\tilde{S}_{l,m_i} - S_{l,m_i}) \text{ est minimum} \end{cases} \quad (4.51)$$

Le problème de minimisation avec contraintes linéaires est classiquement résolu de manière itérative « active set algorithm » [Bjorck 1996]. Une solution géométrique du problème classique (4.51) peut être reformulée en posant

$$\begin{cases} \min(\bar{S}_{h,l}^E, \bar{S}_{h,l}^{E^i}) - \bar{S}_{h,l}^E \leq TC_i \leq \max(\bar{S}_{h,l}^E, \bar{S}_{h,l}^{E^i}) - \bar{S}_{h,l}^E \text{ pour } i = 1, 2, 3 \\ \sum_{i=1}^3 TC_i = 0 \\ \|(TC_E - \tilde{TC}_E)\|_2 \text{ est minimum pour } i = 1, 2, 3 \end{cases} \quad (4.52)$$

avec $\tilde{TC}_E = (\tilde{TC}_1, \tilde{TC}_2, \tilde{TC}_3)$ et $\tilde{TC}_i = S_{l,m_i} - \bar{S}_{h,l}^E = \frac{\partial \tilde{S}_{h,l}^E}{\partial x}(x_{m_i} - \bar{x}_E) + \frac{\partial \tilde{S}_{h,l}^E}{\partial y}(y_{m_i} - \bar{y}_E)$ En exprimant $TC_3 = -TC_1 - TC_2$, le problème (4.52) est réécrit suivant deux variables uniquement TC_1 et TC_2 :

$$\begin{cases} \min(\bar{S}_{h,l}^E, \bar{S}_{h,l}^{E^1}) - \bar{S}_{h,l}^E \leq TC_1 \leq \max(\bar{S}_{h,l}^E, \bar{S}_{h,l}^{E^1}) - \bar{S}_{h,l}^E \\ \min(\bar{S}_{h,l}^E, \bar{S}_{h,l}^{E^2}) - \bar{S}_{h,l}^E \leq TC_2 \leq \max(\bar{S}_{h,l}^E, \bar{S}_{h,l}^{E^2}) - \bar{S}_{h,l}^E \\ -\min(\bar{S}_{h,l}^E, \bar{S}_{h,l}^{E^3}) - \bar{S}_{h,l}^E \leq TC_1 + TC_2 \leq -\max(\bar{S}_{h,l}^E, \bar{S}_{h,l}^{E^3}) - \bar{S}_{h,l}^E \\ [(\tilde{TC}_1 - TC_1)^2 + (\tilde{TC}_2 - TC_2)^2] \text{ est minimum} \end{cases} \quad (4.53)$$

Ce problème est résolu géométriquement en dimension deux sur des triangle. Il a été montré que cette approche permet de traiter le problème de limitation de pente avec des temps CPU deux fois moindre comparé à une limitation de type Minmod. Cette approche géométrique conduit à des solutions numériques identique à celles obtenues par une approche itérative avec des temps CPU trois fois moindre.

4.6 Résolution des systèmes d'équations couplées

4.6.1 Schéma IMPES et interpolation

Nous utilisons la méthode IMPES, i.e. implicite en pression et explicite en saturation. L'idée est d'éliminer le terme d'accumulation en saturation dans l'équation implicite en pression en utilisant l'équation explicite en saturation et après avoir résolu l'équation en pression de mettre à jour la saturation explicitement. Ce type de schéma est 40 fois plus rapide que des schémas *tout explicite* et beaucoup moins diffusif que des schémas *fully-implicit*. L'inconvénient réside dans la taille des pas de temps imposés par le respect du critère de courant afin de garantir la stabilité du schéma [Helmig 1997; Huber and Helmig 1999]. L'ensemble des variables secondaires requises lors de la simulation : flux fractionnaires, perméabilités triphasiques, mobilité globale, facteur de compressibilité sont générés en amont de la simulation pour une gamme de pression globale et pour un champ de saturation effectif *i.e.* pour un niveau de pression globale correspond un diagramme ternaire T . L'intervalle de pression globale a été fixé pour une gamme de pression allant de 0,9 bar à 1,5 bar (pas de pression de 0,01 bar), le pas de saturation a été fixé à 0.1 (égal pour l'eau et le gaz). En système diphasique eau/huile, on procède par interpolation linéaire en pression/saturation sur le coté du diagramme \mathbb{T} noté \mathbb{T}^{12} .

4.6.2 Résolution de l'équation de saturation complète

L'équation de saturation en eau et en gaz sont séparées en deux parties : un terme convectif (cf. Section 4.5.2) et un terme diffusif. Ces deux processus physiques sont associés à des équations aux dérivées partielles de nature différentes. Un traitement séparé des deux termes est appliqué ou *operator splitting* [Dawson and Wheeler 1992]. Dans la section 4.5.1, le terme de diffusion est résolu par éléments finis mixtes hybrides avec un schéma implicite en temps (4.30). Le système matriciel obtenu est symétrique et peut être résolu grâce à une méthode itérative de type gradient conjugué préconditionné (PCG) [Eisenstat 1981]. La discrétisation du terme variationnel de l'équation de convection est explicite en temps (4.44) ; sa résolution doit tenir compte du strict respect du critère de courant (CFL). Chaque pas de temps diffusif est décomposé en n pas de temps convectif déterminé sur la base du CFL soit $\Delta t = \Delta t_d = n\Delta t_k$ où l'indice d désigne le processus de diffusion et k celui de convection. Ainsi, la résolution de l'équation de saturation en eau est obtenue tel que :

1. Résolution implicite par éléments finis mixtes hybrides de l'équation présentée dans la section 4.5.1. Calcul des traces de saturation sur les facettes de la triangulation en résolvant le système (4.39), calcul du flux diffusif associé suivant (4.34) puis de la saturation moyenne sur l'élément (4.37)
2. Calcul de la saturation moyenne $S_1^{E,n+1}$ sur chaque élément E en résolvant l'équation (4.44) par éléments finis discontinus. Stabilisation de la solution avec un schéma de limitation de pente (cf. Section 4.5.2). L'opération est répétée pour les n pas de temps convectif.
3. Mise à jour des saturations aux noeuds en ajoutant la contribution du terme de diffusion soit

$$S_{1,E}^{i,n+1} = S_{1,E}^{k,i,n+1} - \frac{\Delta t}{\phi|E|\tilde{c}_{1,E}^{n+1}P_{1,E}^{n+1}} \left(\sum_{i=1}^{N_f} \tilde{Q}_{1,Ei} + G_{1,E}^{n+1} \right)$$

4.6.3 Traitements des non linéarités et gestion du pas de temps

Les systèmes d'équations obtenus en pression globale, en saturation en eau et saturation en gaz sont fortement non-linéaires. Ces non linéarités sont associées à l'existence de variables secondaires fonctions des variables primaires (P, S_1, S_3). La résolution des deux systèmes algébriques (4.23) et (4.39) nécessite l'emploi d'une méthode itérative de linéarisation. Il en existe plusieurs comme celle de Picard, de Picard modifiée [Celia *et al.* 1990] ou bien celle de Newton-Raphson. Les deux premières ont l'avantage d'être simple à mettre en oeuvre mais ne convergent que linéairement vers la solution du système couplé. La méthode de Newton-Raphson propose une convergence quadratique mais nécessite le calcul des dérivées premières composant la Jacobienne [Helmig 1997]. Leur calcul par une méthode de perturbation peut être avantageusement mis en oeuvre [Forsyth *et al.* 1995; Helmig 1997]. La technique de Picard a été retenue pour linéariser les systèmes d'équations (4.23) et (4.39) en raison de sa simplicité d'implémentation. Le test de convergence retenu est effectué sur la pression globale et les saturations en eau et en gaz. Il est formulé de manière classique

$$\max \left(\text{TC}_{N_f}^{n+1,k+1} - \text{TC}_{N_f}^{n+1,k} \right) < \varepsilon_a + \varepsilon_r |\text{TC}_{N_f}^{n+1,k+1}|$$

avec $TC = \{TP, TS_1, TS_3\}$.

La gestion du pas de temps est dynamique (critère heuristique) et basé sur le respect du bilan de masse globale. On peut résumer la gestion du pas de temps ainsi :

- Si le nombre d'itération k est compris entre $Niter_{min} \leq k \leq Niter_{max}$, alors on conserve le pas de temps $\Delta t_{n+1} = \Delta t_n$
- Si le nombre d'itération k est $k < Niter_{min}$, alors on augmente le pas de temps $\Delta t_{n+1} = \tau_{croi} \Delta t_n$, avec le facteur de croissance fixé à $\tau_{croi} = 1.6$
- Si le nombre d'itération k est $k > Niter_{max}$, alors on augmente le pas de temps $\Delta t_{n+1} = \tau_{decroi} \Delta t_n$, avec le facteur de décroissance fixé à $\tau_{decroi} = 2$.

4.7 Cas tests d'écoulement

Nous venons de voir que les équations aux dérivées partielles associées à la pression globale et aux saturations ont des natures différentes : deux équations de type « transport » non linéaires pour la saturation en eau et en gaz et une équation de type « diffusion » non linéaire pour l'équation de pression. Dans cette partie, nous nous intéressons à la validation du modèle d'écoulement. L'objectif des différents tests numériques proposés est de voir si le modèle numérique est capable de décrire fidèlement les processus physique mis en jeu ainsi que la prise en compte des variables secondaires au cours du temps et de l'espace. Cette étape permet également de vérifier l'imbrication correcte des différents modules notamment le couplage entre la résolution des équations de pression globale et de saturation. Plusieurs tests numériques ont été menés en milieu poreux homogène. Les premiers tests mettent en jeu différents systèmes diphasiques eau/huile puis eau/gaz permettant de valider la résolution séparée des modules de diffusion par éléments finis mixtes et de convection par éléments finis discontinus. Des solutions analytiques existent pour chacun des écoulements associés : unidirectionnel (convection dominant) et bidirectionnel (diffusion dominant). Les deux derniers cas tests traitent de l'écoulement radial horizontal de Buckley-Leverett dans un domaine bidimensionnel carré. L'écoulement est celui d'un fluide incompressible sans effet de gravité et sans forces de capillarité. Enfin, un cas de drainage inspiré du cas A1 du benchmark MACAOH est étudié avec effet de gravité, forces capillaires et effet

de compressibilité. L'objectif est d'initialiser un milieu poreux 2D homogène avec un champ de saturation en eau par un effet de drainage. Des premiers essais numériques sont donnés concernant le cas du drainage. Le cas triphasique sera testé ultérieurement. Au terme de ce premier calcul du champ de saturation en eau, une troisième phase fluide : le TCE, sera injectée dans la zone non saturé.

4.7.1 Écoulement unidirectionnel 1D de Buckley-Leverett

Le premier essai numérique met en jeu un déplacement unidirectionnel diphasique eau/huile horizontal (sans gravité) et unidimensionnel. Le front de déplacement est donné par la solution analytique de [Buckley and Leverett 1942] et permettra de vérifier le module de convection du modèle d'écoulement (cf. Section 4.5.2). La construction de la solution analytique est donnée en annexe (cf. Section D.2). Les effets capillaires sont négligés, l'écoulement est dominé par les forces de convection.

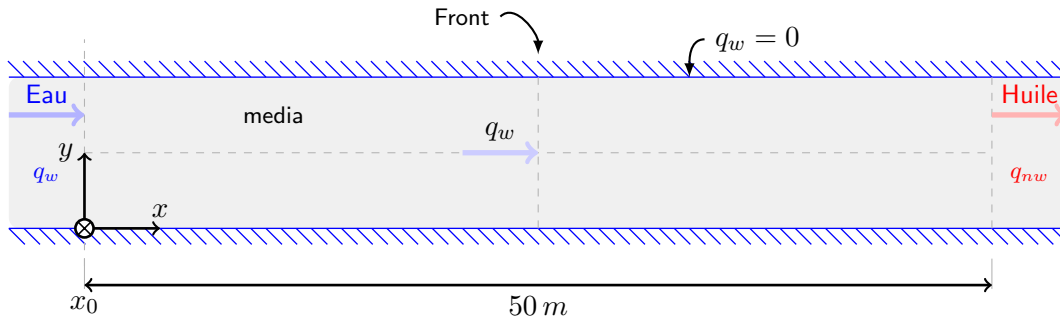


FIG. 4.1 – Géométrie du domaine proposé pour modéliser l'écoulement unidirectionnel de Buckley-Leverett

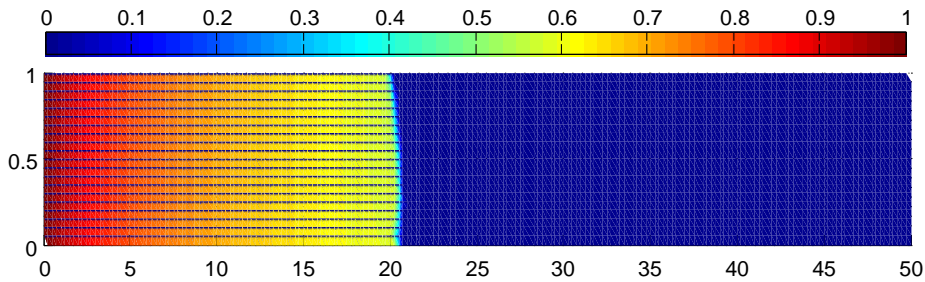


FIG. 4.2 – Champ de saturation en eau obtenu au bout de 10 000 secondes

Le domaine simulé a une longueur de 50 m pour une section de 1 m^2 (cf. Fig. 4.1). Le milieu poreux est supposé homogène et isotrope de perméabilité intrinsèque $k = 10^{-6} \text{ m}^2$, de porosité $\phi = 0.2$. Le modèle de Brooks-Corey est utilisé pour construire le flux fractionnaire en eau associé au terme de convection. Les paramètres $\lambda = 2$ et pression de déplacement $P_d = 2000 \text{ Pa}$ sont fixe dans l'espace et dans le temps. Le milieu est initialement saturé en huile $S_1 = 0$.

Les conditions aux limites sont de type Dirichlet sur la section d'entrée soit $P_1 = 1.10^5 \text{ Pa}$ et $S_1 = 1$. Le flux d'huile est imposé à l'extrémité du domaine soit $q_2 = 1.10^{-3} \text{ kg/s}$. La masse volumique de l'huile est prise égale à celle de l'eau $\rho_1 = \rho_2 = 1000 \text{ kg/m}^3$. Les viscosités

dynamique associée sont $\mu_1 = 10^{-3} \text{kg/ms}$ et $\mu_2 = 4.10^{-3} \text{kg/ms}$. Le domaine est discrétisé avec des éléments triangulaires de manière uniforme $\Omega = 500 \text{ m} \times 20 \text{ m}$.

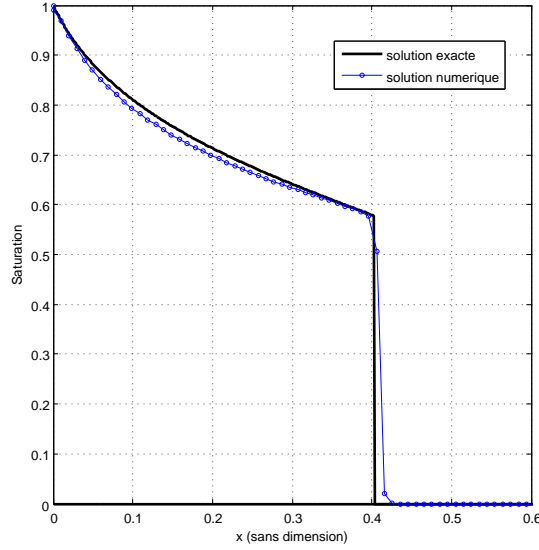


FIG. 4.3 – Résultats numériques obtenus avec l'approche en pression globale au bout de 10000 secondes suivant la section $y = 0.5$

Résultats : Le profil de saturation en eau est calculé au bout de 10 000 secondes (cf. Fig. 4.3) pour un temps total de simulation de 37 secondes (temps CPU). La saturation en eau au front est correctement reproduite par le modèle numérique (cf. Fig. 4.2). Le profil calculé avec le maillage proposé ($\Delta x = 0,1 \text{ m}$) est numériquement peu diffusif. Des expériences numériques comparant l'utilisation des éléments finis mixtes/éléments finis discontinus avec d'autres éléments finis standard (Petrov-Galerkin) et différences finis ont montré leur performance dans l'approximation de problème à front raides pour des écoulements à convection dominante [Helmig 1997; Huber and Helmig 1999; Nayagum 2001; Chen 2005].

4.7.2 Écoulement bidirectionnel 1D de McWhorter-Sunada

Après avoir vérifié le module de convection, nous adoptons la même démarche en analysant un cas purement diffusif afin de comparer la solution pseudo analytique du front de déplacement proposée par [McWhorter and Sunada 1990] avec celle issue du module de diffusion résolu par éléments finis mixtes hybrides (cf. Section 4.4). La construction de la solution pseudo analytique est donnée en annexe (cf. Section D.3). Ce problème est purement diffusif car le flux total égal à la somme du flux d'eau et de gaz est nul en tout point du domaine. Les fluides sont supposés incompressibles, sans effet de gravité. Le coefficient de diffusion pris constant sur la maille considérée est approché à partir des valeurs de saturation provenant des facettes de l'élément [Nayagum 2001]. Contrairement à l'approche consistant à prendre la saturation moyenne sur la maille, cette approche permet de reproduire correctement le déplacement contre-courant de McWhorter-Sunada.

Le domaine considéré est horizontal de longueur 50 m (cf. Fig. 4.4). Seules les forces de capillarités sont considérées. Les parois sont imperméables sauf sur la section d'entrée où la pression de l'eau est imposée $P_1 = 1.10^5 \text{ Pa}$ et la saturation $S_1 = 0.99$ [Helmig 1997]. Sur

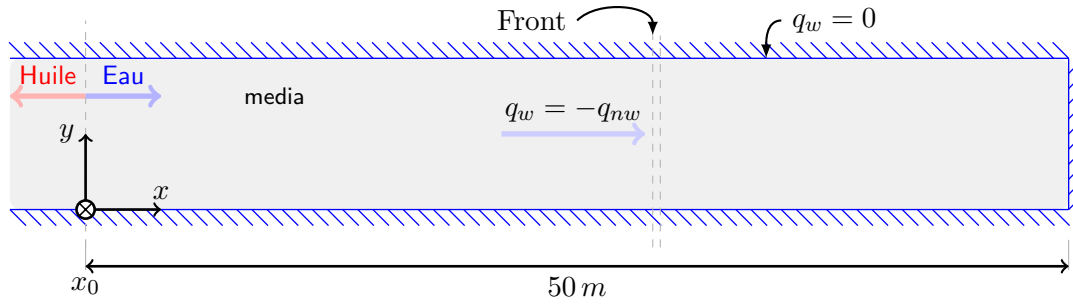


FIG. 4.4 – Géométrie du domaine proposé pour modéliser l'écoulement bidirectionnel de McWhorter et Sunada

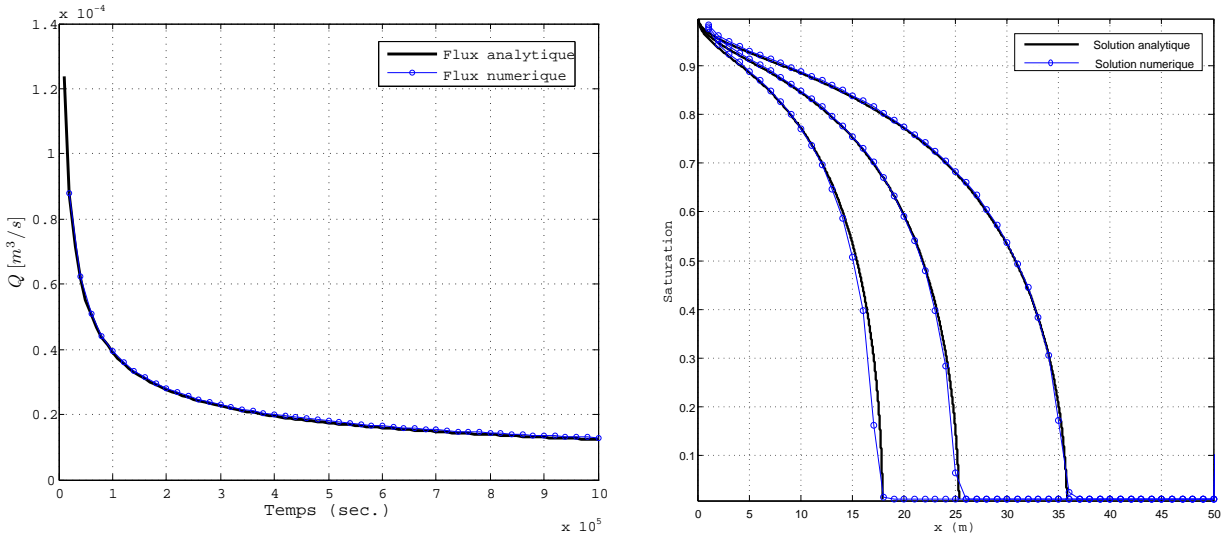


FIG. 4.5 – Solutions numériques du front de saturation en eau (droite) et du flux diffusif (gauche) comparées avec la solution pseudo analytique de McWhorter-Sunada au bout de 250, 500 et 1000 secondes

la section de sortie, les conditions aux limites sont de type Dirichlet - La saturation en gaz est imposé à l'extrémité du domaine soit $S_3 = 0$. Le domaine simulé a une longueur de 50 m Fig. 4.4. Le milieu poreux est supposé homogène et isotrope de perméabilité intrinsèque $k = 10^{-6} m^2$, de porosité $\phi = 0.2$. Le modèle de Brooks-Corey est utilisé pour construire le coefficient de diffusion associé au terme de diffusion. Les paramètres $\lambda = 2$ et pression de déplacement $P_d = 2000$ Pa sont fixes dans l'espace et dans le temps. Le milieu est initialement saturé en huile $S_1 = 0$. La masse volumique du gaz est $\rho_3 = 1 kg/m^3$ et celle de l'eau $\rho_1 = 1000 kg/m^3$. Les viscosités dynamique associée sont $\mu_1 = 10^{-3} kg/ms$ et $\mu_1 = 1.10^{-5} kg/ms$. Le domaine est discrétisé avec des éléments triangulaires de manière uniforme $\Omega = 50 \times 20$.

Résultats : Le profil de saturation en eau est calculé pour trois temps différents soit 250, 500 et 1000 secondes. Le temps total de simulation est de 49 secondes (temps CPU). La saturation en eau au front est correctement reproduite par le modèle numérique. On remarque que la solution à 250 secondes montre un front numérique légèrement en retard par rapport à

la solution pseudo analytique. En affinant le maillage cet écart diminue rapidement. D'autres modèles comme SWANFLOW [Faust 1985] conduisent à des fronts de saturation avec une diffusion numérique importante [Faust 1985; Nayagum 2001; Nayagum *et al.* 2004]. Ici, le profil calculé avec le maillage proposé ($\Delta x = 0,1m$) est numériquement peu diffusif. Des expériences numériques comparant l'utilisation des éléments finis mixtes/éléments finis discontinus avec d'autres éléments finis standard (Petrov-Galerkin) et différences finis ont montré leur performance dans l'approximation de problème à front raides pour des écoulements à convection dominante [Helmig 1997; Huber and Helmig 1999; Nayagum 2001; Chen 2005]. Le flux diffusif au cours du temps est également comparé avec la solution de McWhorter-Sunada et la solution numérique reste très proche de la solution pseudo analytique (cf. Fig. 4.5) (gauche).

4.7.3 Ecoulement radial bidimensionnel de Buckley-Leverett (Five-Spot)

Le problème dit *Five-spot* décrit par [Spivak *et al.* 1977] propose deux cas. Comme le déplacement de Buckley-Leverett, il concerne les écoulements de fluides incompressibles sans effets capillaires ; sans gravité avec un déplacement de l'huile (cf. Figs. 4.6, 4.7). Initialement, le

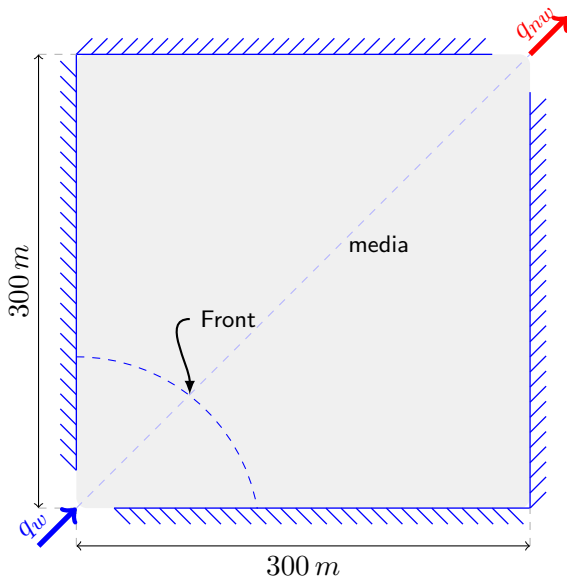


FIG. 4.6 – *Five Spot - Cas diagonal*

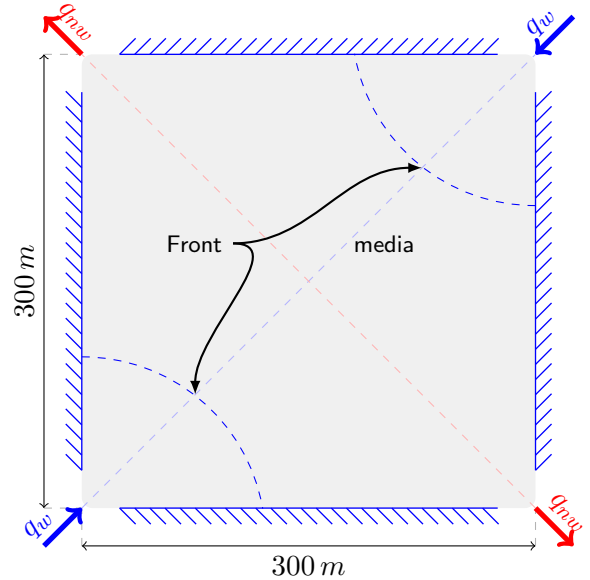


FIG. 4.7 – *Five Spot - Cas parallèle*

domaine est entièrement saturé en huile. Le domaine est discrétisé avec un maillage triangulaire régulier. Différentes configurations de maillage ont été testées en étudiant notamment l'effet de l'orientation des facettes suivant la diagonale décrivant le domaine [Jaffré 1980]. Deux tailles de mailles 16×16 et 32×32 ont été choisies afin de reproduire les solutions numériques obtenues par [Huber and Helmig 1999]. Le test *Five-spot* permet de voir l'influence du maillage sur la résolution numérique du front. En outre, il permet de tester le couplage entre l'équation de pression globale et le terme convectif de l'équation de saturation. En effet, la détermination du champ de pression dépend du champ de saturation à travers le terme de mobilité globale. En outre, contrairement au cas 1D présenté plus haut (cf. Section 4.7.1), le flux total varie suivant la diagonale.

Dans le premier cas du problème du *Five-spot*, l'eau est injectée dans le coin inférieur gauche

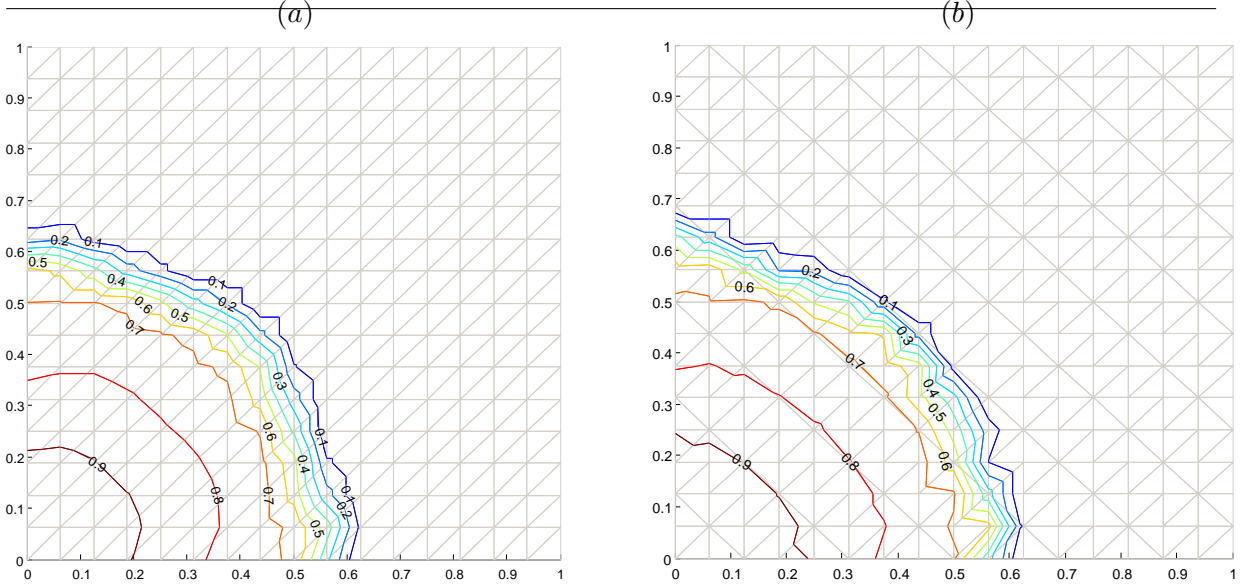


FIG. 4.8 – Résultats numériques obtenus avec l'approche en pression globale au bout de 200 jours et pour différentes configurations de maillage : (a) maillage 16×16 en diagonal, (b) maillage 16×16 en croix

et déplace l'huile que s'échappe dans le coin supérieur droit (cf. Fig. 4.6). L'orientation principalement de l'écoulement est suivant la diagonale du maillage. Le second cas est similaire au premier mais l'eau est ici injectée à la fois dans le coin inférieur gauche et dans le coin supérieur droit. L'huile peut ainsi sortir dans les coins inférieur droit et supérieur gauche (cf. Fig. 4.7). L'écoulement principal est parallèle au maillage, le cas test est également appelé *cas parallèle*. Pour chacun de ces deux cas, la solution numérique idéale donne une série de quarts de cercle retracant l'évolution du front de saturation en eau injectée au cours du temps. Comme [Spivak *et al.* 1977; Huber and Helmig 1999], nous prenons le modèle de perméabilité relative de Todd donné par :

$$kr_1(S_1) = S_1^2, \quad kr_2(S_1) = (1 - S_1)^2 \quad (4.54)$$

avec un ratio $\mu_2/\mu_1 = 4$ sur les viscosités. La condition initiale est une distribution uniforme de la saturation en eau dans le domaine $S_1 = 0$. La pression en eau est imposée sur les facettes composant le coin concerné (soit deux facettes) et $P_1 = 1.10^5$ Pa (condition de Dirichlet). Le milieu poreux est caractérisé par sa perméabilité intrinsèque $k = 10^{-7} m^2$ et sa porosité $\phi = 0.2$. Au niveau du coin matérialisant le puit de production en huile soit $S_1 = 0$, le flux sortant en huile est imposée à $P_2 = 2.10^5$ Pa (condition de Neumann). La cas diagonal est analysé en premier au bout de 200 jours et le profil de saturation est extrait suivant la diagonale $y = x$ (cf. Fig. 4.9).

Résultats : Les solutions numériques obtenues sont comparées directement aux solutions obtenues par [Helmig 1996; Huber and Helmig 1999] (cf. Fig. 4.9). Concernant le cas diagonal, la géométrie du front est correctement reproduite ; la solution est symétrique par rapport à la droite $y = x$. Les trois configurations testées (a), (b), (d) montrent une légère diffusion numérique due à l'orientation du maillage dans la résolution (de l'ordre de 3%) qui n'a pas d'impact significative sur les dates de percée au puit de production - soit 684 jours pour (c), 636 jours pour (b) et 622 jours pour (a).

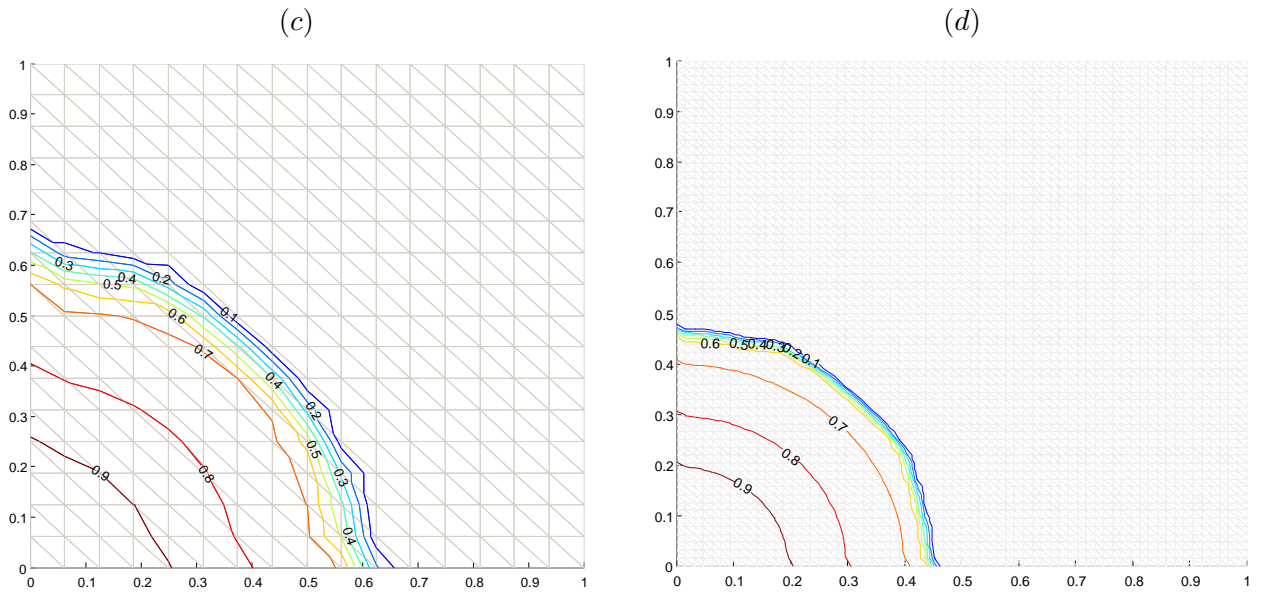


FIG. 4.9 – Résultats numériques (cas diagonal) obtenus avec l'approche en pression globale au bout de 200 jours et pour différentes configurations de maillage : (c) maillage 16×16 antidiagonal, (d) maillage 32×32 antidiagonal

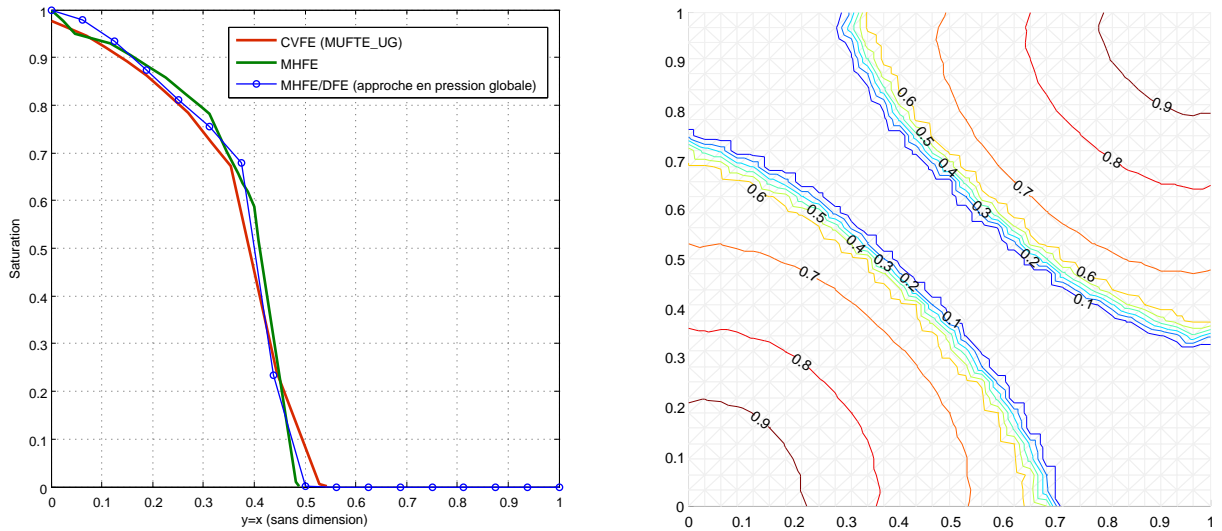


FIG. 4.10 – Problème du Five-spot (cas diagonal) - Section suivant $y = x$ du profil de saturation en eau comparé avec les solutions numériques obtenues par [Helmig 1997] au bout de 200 jours (figure gauche), solution numérique du cas parallèle au bout de 200 jours (figure de droite)

En effet, le maillage (a) (cf. Fig. 4.9) diffuse plus que le maillage (c) (cf. Fig. 4.10) ; le maillage (b) représentant une configuration intermédiaire (cf. Fig. 4.9). Des essais numériques menés sur le cas diagonal et parallèle ont montré que pour un maillage 16×16 toute configuration confondu (a, b, c), le front de saturation se propage plus rapidement sur les bords du domaine que sur l'axe principal : la diagonale. En augmentant la taille du maillage pour la configuration (c), le phénomène disparaît complètement Fig. 4.9 (droite). La solution illustrée dans le cas parallèle (cf. Fig. 4.10) (figure de droite) présente deux fronts d'injection symétriques. Le champ de vitesse totale s'annule sur la diagonale $y = -x$; les valeurs de saturation en eau y restent nulles. La comparaison des solutions numériques obtenues avec l'approche en pression globale montre une bonne reproduction du front de saturation Fig. 4.9 (gauche). Les deux méthodes numériques de références utilisées sont des *Volume finis-Eléments finis* (CVFE) et les éléments finis mixtes hybrides (MHFE) [Helmig 1996] formulées en pression moyenne et saturation en eau.

4.7.4 Cas test 2D d'écoulement triphasique en milieu poreux homogène inspiré du cas A1 du benchmark MACAOH

Description : Le test correspond à la migration d'un produit non miscible à l'eau en zones non saturée et zone saturée d'un milieu poreux 2D homogène. Le but du test est d'évaluer la qualité numérique des simulations triphasiques effectuées. Il s'agit notamment de calculer les champs de saturation en eau (drainage) et de prédire la mise en place d'une zone source monocomposée (TCE) considérée comme non miscible à l'eau (et peu volatil) en zone saturée/non saturée (ZS/ZNS) à partir d'une quantité injectée près de la surface du sol. Initialement (à $t=0$),

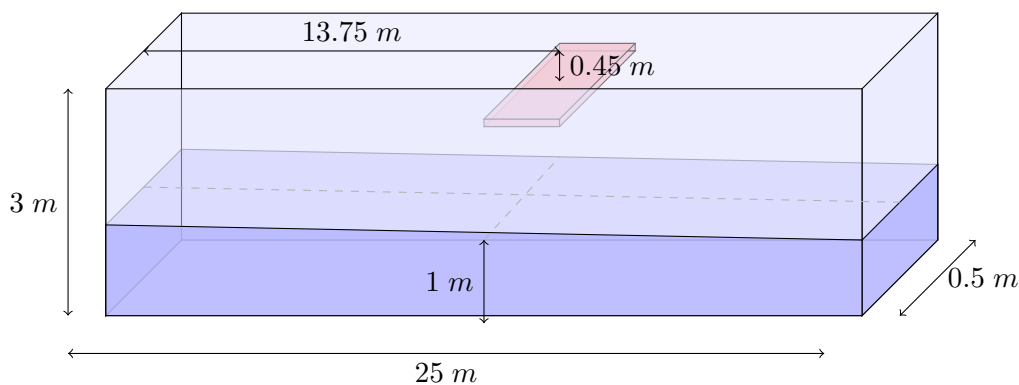


FIG. 4.11 – Schéma du domaine de simulation et conditions aux limites du cas test

l'aquifère de dimensions $25m \times 0.5m \times 3m$ est complètement saturé en eau. Il est constitué d'un sable moyen de conductivité hydraulique de $8 \times 10^{-4}m/s$. La porosité du milieu poreux est égale à 0.4.

A $t= 1h$, le toit de la nappe est abaissé à $-2m$ par rapport à la surface du sol et un gradient hydraulique est imposé. Des charges hydrauliques de $1,04m$ et de $0,97m$ par rapport au fond du substratum sont imposées respectivement au niveau de la limite amont et de la limite aval pour fixer un gradient hydraulique de 0.28%. A la surface du sol, la pression dans la phase gazeuse est égale à 1 atm (10^5 Pa).

A $t= 10$ jours, 9 litres de TCE sont injectés à $45cm$ de profondeur sous la surface du sol sur une aire carrée de $50cm$ de côté à un débit pendant 21 minutes dans un aquifère poreux de $25m$ de longueur, de $0.5m$ de largeur et de $3m$ de profondeur (cf. Fig. 4.11). L'aquifère est constitué

d'un sable moyen (homogène et isotrope) de porosité égale à 0.4 et de conductivité hydraulique égale à $8 \times 10^{-4} m/s$. Le toit de la nappe est situé à une profondeur de 2 m. Le centre de l'injection se trouve à 6.25m de distance par rapport aux limites latérales imperméables. Des charges hydrauliques de 1.04 m et de 0.97 m par rapport au fond du substratum sont imposées en pression globale respectivement au niveau de la limite amont et de la limite aval pour fixer un gradient hydraulique de 0.28 %. A la surface du sol, la pression dans la phase gazeuse est égale à 1 atm (10^5 Pa). Le sommet du domaine est affecté avec une condition de Dirichlet en saturation en eau dont la valeur est donnée par la courbe de pression capillaire ainsi que du gradient hydraulique imposé

Dans les simulations, on utilise les propriétés physico-chimiques du TCE, de l'eau et de l'air présentées ci-dessous (cf. Tab. 4.1). On note également les caractéristiques suivantes : saturation « résiduelle » en eau $S_{1r} = 0.13$ saturation résiduelle de TCE en zone saturée $S_{2r1} = 0.06$ saturation résiduelle de TCE en zone non saturée $S_{2r3} = 0.025$. Dans les calculs, l'accéléra-

Propriétés	Unité	TCE	Eau	Air
Masse molaire	[g/mol]	131.39	18	28.75
Masse volumique	[g/cm ³]	1.46	1	1.29×10^{-3}
Viscosité dynamique	[N.s.m ⁻²]	0.537×10^{-3}	1×10^{-3}	0.01728×10^{-3}

TAB. 4.1 – Propriétés physico-chimiques des fluides

tion gravitationnelle est supposée être égale à $10ms^{-2}$. L'objectif du cas test présenté ici est de rechercher l'évolution spatiale du corps d'imprégnation de TCE en fonction du temps. Afin de permettre une inter-comparaison des résultats, on calcule d'abord le champ de saturation en eau à différents instants ($t = 10s, 3600s, 10800s$), puis les saturations en TCE à 21 minutes, 1h, 2h, 3h, 10 h et 24 h après le début d'infiltration du TCE.

Nous nous intéressons à la première étape consistant à initialiser le domaine en modélisant le drainage du bassin suivant le plan xz soit $\Omega = 25m \times 3m$. Le champ de saturation en eau est analysé au cours du temps. Afin de pouvoir comparer fidèlement les deux solutions obtenues par les deux modèles, les variables utilisées dans le code MPTRACES lors de l'interpolation des variables secondaire sont également entrées dans le code SIMUSCOPP [Ducreux *et al.* 1994; Côme *et al.* 1998; Le Thiez 1999]. Les modèles de perméabilité en eau, en gaz ainsi que la pression capillaire eau/gaz P_c^{13} sont générés pour un pas de saturation en eau de 10%. Le modèle de pression capillaire utilisé est celui de Brooks-Corey avec $\lambda = 2$ et une pression d'entrée $P_d = 2000$ Pa. Les flux fractionnaires en eau et en gaz utilisés dans le code MPTRACES respectent la condition de différentielle totale formulée dans le chapitre 3. Seules les variables appartenant au côté \mathbb{T}^{13} sont utilisées (voir la section 4.6).

Résultats : Le cas de drainage présenté ici permet de vérifier le couplage entre la résolution de l'équation de pression globale et l'équation de saturation en eau. Il permet également de tester l'implémentation des termes de gravité dans l'équation de pression globale et des flux gravitaires dans l'équation de saturation. Le temps CPU associé à la résolution du problème par le code MPTRACES (maillage ~ 10000 mailles) est de 480 secondes pour 3h de temps simulé. Pour un maillage de taille 125×30 (soit ~ 3000 mailles) et un temps simulé identique, le code SIMUSCOPP donne un temps CPU de 300 secondes. La figure (cf. Fig. 4.12) (droite) donne le champ de saturation en eau et de pression globale au bout de 3 heures (proche du profil d'équilibre). Le dôme hydraulique semble correctement reproduit. Cependant le champ de pression globale

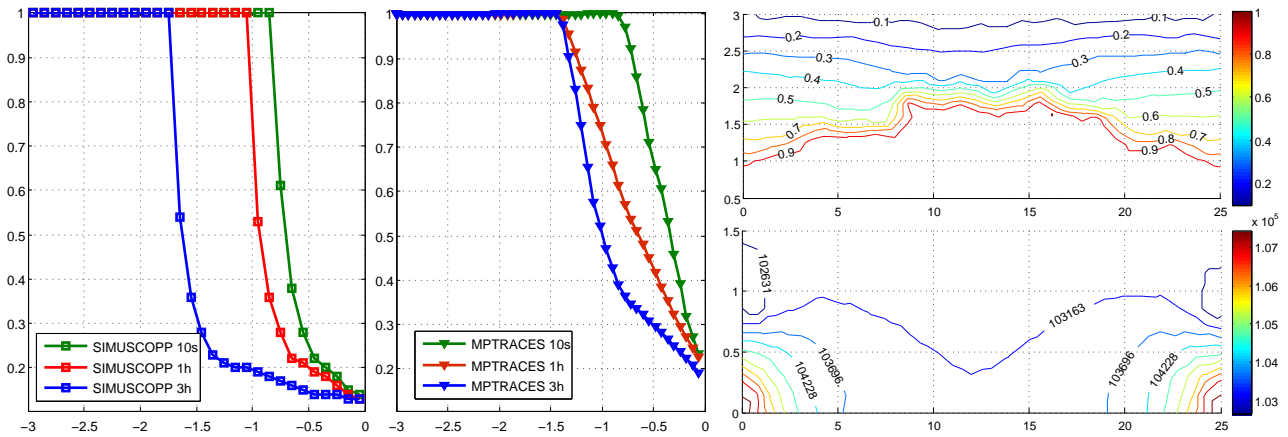


FIG. 4.12 – Solutions numériques obtenues par deux modèles numériques (*SIMUSCOPP* et *MPTRACES*) lors du drainage, évolution du profil de saturation en eau au cours du temps suivant l'axe central à $x = 12.5\text{m}$ (figure de gauche) et champ de saturation et de pression globale au bout de 3 heures (figure de droite)

semble faible en comparaison des conditions aux limites imposées en pression. En outre, les fronts de saturation calculés sont en retard par rapport à ceux issus du code *SIMUSCOPP* (cf. Fig. 4.12) (gauche). Une explication avancée concernant le retard du front par rapport aux solutions *SIMUSCOPP* vient probablement de la condition imposée en saturation au sommet du domaine. En imposant à la fois la pression globale et la saturation, des tests numériques ultérieurs permettront de voir si le front de saturation migre plus rapidement. Lorsque la résolution du champ de saturation sera validé par des tests numériques, l'écoulement triphasique sera simulé avec l'injection de la phase *TCE*.

Remarque : Le bilan de masse relatif retourné par le code *MPTRACES* est inférieur à 1%. Le critère d'adaptation du pas de temps basé sur le respect ou non du bilan de masse peuvent conduire à des temps de simulation longs. A noter que pour un problème similaire d'écoulement 1D en pression moyenne, le temps CPU nécessaire pour obtenir un profil d'équilibre peuvent atteindre 750000 secondes [Nayagum 2001]. L'utilisation de la méthode de Newton-Raphson pour l'étape de linéarisation permettra de gagner significativement en temps de calcul.

4.8 Conclusions

L'approche en pression globale associée à l'algorithme d'interpolation présenté dans le chapitre 3 a été numériquement testé sur des écoulements diphasiques classiques. La résolution de l'équation en pression globale par les éléments finis mixtes hybrides fournissent simultanément un champ de pression et de vitesse. La résolution d'un problème purement diffusif comme l'écoulement contre-courant eau/air de McWorther-Sunada a montré la reproduction correcte du front de diffusion ainsi que du flux diffusif.

Concernant la mise en oeuvre des éléments finis discontinus, nous avons pu tester leur robustesse dans l'approximation numérique de fronts raides purement convectif (écoulement unidirectionnel de Buckley-Leverett, Ecoulement bidimensionnel « Five-spot »). Cependant la dis-

crétisation explicite en temps du terme convectif des équations de saturation nécessite le strict respect du critère de courant afin de garantir la stabilité du schéma numérique.

Enfin le couplage pression/saturation a été testé et comparé sur la base du cas test numérique du *Five-spot*. En conclusion, des travaux de validation restent à mener dans le cas du drainage afin de pouvoir correctement reproduire la cas MACAOH A1 triphasique proposé ici. Les tests numériques précédents ont cependant montré la robustesse du schéma numérique proposé en pression globale.

5

Modules et formalismes d'un modèle de transport multiconstituant

Cette section traite des perspectives de couplage entre le modèle d'écoulement multiphasique développé et le modèle de transport multiconstituants.

On s'intéresse dans un premier temps au transport de composés organo-chlorés dans la zone non-saturée du sol (cf. Section 5.1) en considérant uniquement le transport dans la phase gazeuse (les échanges entre phases ne sont pas étudiés ici). La phase gazeuse est constituée de *TCE*, de *PCE*, (et dérivés), de vapeur d'eau et de l'ensemble des composants de l'air. Lors du transport, chacun de ces constituants influencent le transport des autres constituants. Les détails sur la théorie du transport multiconstituant sont analysés par [Taylor and Krishna 1993; Quintard *et al.* 2006]. La première partie de ce chapitre est consacrée à l'évaluation des coefficients de diffusion ainsi qu'aux paramètres caractérisant le mélange tels que la température, composition massique.

La deuxième partie traite essentiellement des processus de dissolution et des phénomènes de transport de solvants chlorés dans la zone saturée d'un sol. La première section est consacrée à la description et à la formulation du modèle et des phénomènes en jeu, la deuxième concerne l'estimation des paramètres.

L'ensemble de ces interactions rendent la simulation du transport délicate puisque les bilans de toutes les espèces sont fortement non-linéaires et couplés. Les conclusions et résultats présentés ici sont tirés des travaux de [Chastanet 2007].

5.1 Flux diffusif en phase gazeuse

5.1.1 Mélange à N constituants.

Pour un mélange à N constituants, le transport de chacun des constituants du mélange est régi par une équation bilan de la forme ($i = 1, \dots, N$) :

$$\frac{\partial \rho \omega_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \omega_i \mathbf{v} + \mathbf{j}_i) = 0 \quad (5.1)$$

où ρ_i est la masse volumique (ou concentration massique) de i (kg/m^3), \mathbf{v} est la vitesse massique moyenne du mélange binaire (m/s), \mathbf{j}_i est le flux diffusif massique de i ($kg\ m^2/s$) et ω_i est la

fraction massique du constituant i . Le flux diffusif massique \mathbf{j}_i associé au constituant i ne vérifie la loi de Fick que dans des cas très particuliers (mélange binaire, fluide idéal). De manière générale, ce flux s'écrit :

$$\mathbf{j}_i = \rho_i(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}) \quad (5.2)$$

avec \mathbf{v}_i la vitesse associée au constituant i . Notons que l'équation bilan (5.1) est définie avec les quantités massiques du mélange. Elle peut également s'écrire avec les quantités molaires A partir des équations de Stefan-Maxwell caractérisant le mouvement des constituant les uns par rapport aux autres introduites dans l'expression du flux diffusif massique (5.2), on obtient la loi de Fick généralisée [Quintard *et al.* 2006] :

$$\mathbf{j}_i = - \sum_{j=1}^{N-1} \rho D_{ij} \nabla \omega_j \quad (5.3)$$

On constate que le flux diffusif massique dépend étroitement de la constitution du mélange. Il est ainsi nécessaire de résoudre simultanément tous les bilans d'espèces. Notons à ce sujet que seuls $N - 1$ bilans sont nécessaires, la fraction massique du dernier constituant pouvant être déduite des précédentes ($\omega_N = 1 - \sum_{i=1}^{N-1} \omega_i$). Le dernier constituant est généralement appelé *solvant*. Les coefficients de diffusion massique de la loi de Fick généralisée, D_{ij} , sont fonction des coefficients de diffusion binaire \mathcal{D}_{ij} , des coefficients d'activité γ_i et des fractions massiques ω_i et molaires x_i [Quintard *et al.* 2006; Chastanet 2007].

Le transport de N constituants est décrit l'équation de quantité de mouvement associé à $N - 1$ équations de bilan pour $N - 1$ constituants du mélange (5.1), le transport du dernier constituants étant déduit de celui des $N - 1$ premiers. Le flux est donné par la loi de Fick généralisée (5.3)). Les équations bilans de masse de chaque constituant sont fortement non linéaires et couplées à travers le terme de flux diffusif ; elles doivent être résolues simultanément.

5.1.2 Expression du coefficient de diffusion

Le calcul de la matrice de diffusion de la loi de Fick généralisée, $[\mathbf{D}]$, nécessite de déterminer les coefficients de diffusion binaire \mathcal{D}_{ij} et les coefficients d'activité γ_i des espèces considérées.

Calcul des coefficients binaires \mathcal{D}_{ij} . De nombreuses lois empiriques ont été proposées dans la littérature pour le calcul des coefficients de diffusion binaires [Reid *et al.* 1987]. On retient l'expression de [Fuller *et al.* 1966] car elle correspond relativement bien aux mesures expérimentales présentées dans la littérature :

$$\mathcal{D}_{ij} = \frac{0.00143 \times 10^{-4} T^{1.75}}{P \sqrt{M_{ij}} [(\Sigma_v)_i^{1/3} + (\Sigma_v)_j^{1/3}]^2} \quad (5.4)$$

où :

- \mathcal{D}_{ij} : coefficient de diffusion pour un mélange binaire d'espèces i et j (m^2/s);
- T : température du mélange (K);
- P : pression du mélange (bar);
- $M_{ij} = 2/[M_i^{-1} + M_j^{-1}]$;
- M_i, M_j : masses molaires des espèces i, j , respectivement (g/mol);
- $(\Sigma_v)_i, (\Sigma_v)_j$: somme des volumes de diffusion atomique [Reid *et al.* 1987].

Notons que la température et la pression du mélange influencent le calcul des coefficients binaires et, par conséquent, la matrice de diffusion $[\mathbf{D}]$.

Le calcul des coefficients de diffusion massique pour les mélanges gazeux de solvants chlorés permet les conclusions suivantes [Chastanet 2007] :

- Les constituants en faibles quantités ($\leq 30\text{mg/l}$), typiquement le DCE, le chlorure de vinyle, l'éthène, l'éthane et le méthane, ont peu d'influence sur le transport des autres espèces. Leurs flux pourront être estimés indépendamment de ceux des autres espèces. Notons néanmoins que ceci n'est pas valable lorsque l'un de ces constituants est en quantité importante.
- Les coefficients diagonaux varient peu et de façon linéaire avec la composition du mélange. Ils sont proches des coefficients binaires (par rapport au solvant N_2) à 10% près.
- Les coefficients non-diagonaux sont globalement négligeables par rapport aux coefficients diagonaux, avec une exception pour le TCE et l'oxygène, soit pour les constituants en fortes quantités.
- Tous les coefficients varient de 10 % à 20% entre 0°C et 30°C et de façon linéaire avec la température

5.1.3 Influence de l'effet multiconstituant

Le transfert des constituants du mélange est régi par l'équation de bilan de masse (5.1) où la convection est négligée. La simulation 1D de la diffusion d'un mélange de 6 constituants (*TCE*, *PCE*, *CO₂*, *O₂*, *H₂O* et *N₂*) est analysée en introduisant différentes formulations du flux diffusif massique [Chastanet 2007] :

Flux général : Le flux j_i est défini par la loi de Fick généralisée :

$$j_i = - \sum_{j=1}^{N-1} \rho D_{ij} \nabla \omega_j \quad (5.5)$$

Flux diagonal : Seuls les termes diagonaux de la matrice de diffusion $[\mathbf{D}]$ sont considérés :

$$j_i = -\rho D_{ii} \nabla \omega_i \quad (5.6)$$

Flux « lumpé » : Les gradients de fractions massiques sont du même ordre de grandeur de manière à sommer les coefficients d'une même ligne de la matrice $[\mathbf{D}]$:

$$j_i = -\rho \left[\sum_{j=1}^{N-1} D_{ij} \right] \nabla \omega_i \quad (5.7)$$

Flux fickien : Le flux donné par la loi de Fick est considéré pour chacun des constituants :

$$j_i = -\rho \mathcal{D}_{iN_2} \nabla \omega_i \quad (5.8)$$

où \mathcal{D}_{iN_2} est le coefficient de diffusion binaire de l'espèce i et du solvant N_2 . Ce flux sert de références pour la normalisation des flux (cf. Fig. 5.1).

Les résultats numériques montrent qu'en régime permanent, le flux fickien est une bonne approximation du flux diffusif général (cf. Fig. 5.1). En régime transitoire, les écarts peuvent atteindre 10% entre les flux fickien et le flux général (flux diagonal 5%). Par ailleurs, les variations thermiques induisent des variations des coefficients de diffusion de 20 % au maximum. Des fluctuations de température sont donc susceptibles d'influencer le transport des solvants chlorés dans le sol et doivent être prise en compte.

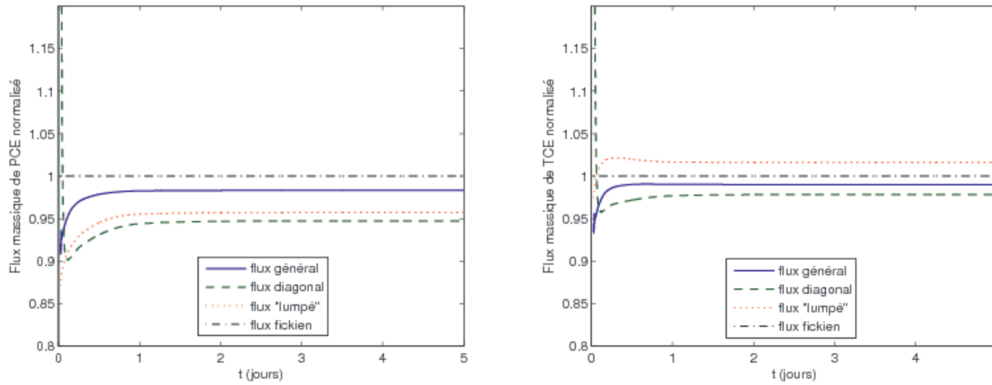


FIG. 5.1 – Evolution du flux sortant en TCE et PCE normalisé (en $x = 1$) en fonction du temps, extrait de [Chastanet 2007]

5.2 Dissolution du NAPL en zone saturée

On considère ici un milieu poreux saturé en eau et contenant une phase NAPL faiblement soluble dans l'eau composée d'un mélange de plusieurs constituants (e.g. solvants chlorés). Les phénomènes à prendre en compte dans la modélisation sont la diffusion des constituants dans la phase NAPL, l'écoulement de la phase eau, la dispersion des constituants dans cette phase et les échanges à l'interface des phases. La phase NAPL est supposée immobile. Cette hypothèse correspond aux situations où la phase NAPL est à saturation résiduelle et se présente sous forme d'amas piégé dans le milieu poreux. Dans cette situation, la dissolution peut être particulièrement lente et les simulations délicates (situation de non équilibre local). La présence d'un mélange multiconstituant dans les deux phases fluides (NAPL et eau) influence de manière complexe les processus de transport et de dissolution. À la différence du cas d'un mélange binaire, la diffusion d'un mélange multiconstituant dans la phase NAPL n'est pas instantanée et peut être un facteur limitant pour la dissolution. Pour les échanges entre phases, la loi de Raoult peut ne pas être valable et le changement de phase d'un constituant est susceptible d'influencer le changement de phase des autres constituants. Dans la littérature, la plupart des études traitant la dissolution sont consacrées aux mélanges binaires. De nombreuses questions restent encore ouvertes dans ce domaine et notamment sur l'évaluation du coefficient de transfert de masse (qui caractérise les échanges inter-phases). Le caractère multiconstituant des mélanges est la plupart du temps négligé [Khachikian and Harmon 2000]. On note cependant quelques études récentes sur le sujet [Mukherji *et al.* 1997; Coutelieris *et al.* 2006]. Nous noterons les variables macroscopiques (concentration) sur la phase β par $\langle \cdot \rangle^\beta = \frac{1}{V_\beta} \int_{V_\beta} \cdot dV$

5.2.1 Conservation de la masse pour un mélange multiconstituant

Le milieu poreux considéré est composé d'une matrice solide et de deux phases fluide : le NAPL (noté γ) et la phase eau (noté β). Nous considérerons dans la suite que la phase organique est supposée immobile et que le phénomène de diffusion de constituant y est négligé. Pour une phase NAPL composée de plusieurs constituants, la condition d'équilibre thermodynamique (égalité des potentiels chimiques) permet de traduire les échanges de chaque constituant à l'interface de deux phases (eau/huile). En supposant le mélange idéal, la loi de Raoult (dont la

validité peut être discutée, [Quintard *et al.* 2006]) a été retenue pour traduire ce phénomène de transfert de masse à l'interface. La concentration de chacun des constituants du mélange s'écrit :

$$\rho_\beta \omega_{A\beta} = C_A^{eq} x_{A\gamma}, \quad (5.9)$$

avec $\rho_\beta \omega_{A\beta}$ la concentration du constituant A dans la phase eau (β) et $x_{A\gamma}$ la fraction molaire du constituant A dans la phase NAPL (γ) et C_A^{eq} la concentration à l'équilibre à l'interface. Cette loi peut présenter certains problèmes de validité notamment lorsque les constituants interagissent au sein du mélange [Mukherji *et al.* 1997]. Deux types de comportements peut se produire :

- $\langle \rho_\beta \omega_{A\beta} \rangle^\beta \sim C_A^{eq} \langle x_{A\gamma} \rangle^\gamma$, lorsque les temps de transfert sont du même ordre de grandeur, on parle alors d'équilibre local.
- $\langle \rho_\beta \omega_{A\beta} \rangle^\beta < C_A^{eq} \langle x_{A\gamma} \rangle^\gamma$, lorsque les gradients de concentrations sont importants.

Dans le premier processus, le transfert de constituant n'est pas limité par la dissolution et ne dépend que du temps de transfert des constituants au sein du NAPL dû au coefficient de diffusion. Le second cas conduit à une dissolution lente. Les équations régissant le non équilibre local associent une équation de transport pour chaque constituant ($A = 1 \dots N$) pour chacune des phases β, γ ainsi qu'une équation de conservation de la masse pour la phase γ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\epsilon_\beta \langle \rho_\beta \omega_{A\beta} \rangle^\beta \right) + \langle \mathbf{V}_\beta \rangle^\beta \cdot \nabla \langle \rho_\beta \omega_{A\beta} \rangle^\beta - \nabla \cdot \left(\mathbf{D}_{A\beta}^* \nabla \langle \rho_\beta \omega_{A\beta} \rangle^\beta \right) \\ + \alpha_A \left(\langle \rho_\beta \omega_{A\beta} \rangle^\beta - C_A^{eq} \langle x_{A\gamma} \rangle^\gamma \right) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \omega_{A\gamma} \rangle^\gamma \right) - \nabla \cdot \left(\mathbf{D}_{A\gamma}^* \nabla \langle \rho_\gamma \omega_{A\gamma} \rangle^\gamma \right) + \alpha_A \left(\langle \rho_\beta \omega_{A\beta} \rangle^\beta - C_A^{eq} \langle x_{A\gamma} \rangle^\gamma \right) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \right) - \sum_{E=1, N} \alpha_E \left(\langle \rho_\beta \omega_{E\beta} \rangle^\beta - C_E^{eq} \langle x_{E\gamma} \rangle^\gamma \right) = 0 \end{aligned} \quad (5.10)$$

avec $\epsilon_\beta = \frac{V_\beta}{V}$ [-] la fraction volumique de la phase β , α_A le coefficient de transfert de masse associé au constituant A [s^{-1}], ρ_β la masse volumique de la phase β [kg/m^3], ω_γ la fraction massique de la phase γ , \mathbf{V}_β la vitesse de la phase β ($\langle \mathbf{V}_\beta \rangle^\beta$ étant la vitesse de Darcy généralisée [m/s]) et $\mathbf{D}_{A\beta}^*$ le coefficient de dispersion effectif du constituant A dans la phase β [m^2/s].

Le phénomène de diffusion $\mathbf{D}_{A\gamma}^*$ dans la phase organique n'est pas pris en compte (peu de données actuellement) ; il peut donc être négligé dans l'équation de transport du constituant A dans la phase γ . L'équation de conservation de la phase NAPL est donc régit par la somme sur l'ensemble des constituants des termes de transfert de masse. Ces équations sont fortement non linéaires et couplés. L'avantage d'une telle formulation est qu'elle permet également de traiter l'équilibre local car lorsque α_E est suffisamment grand (temps caractéristiques faibles), les termes de transfert de masse disparaissent. Par rapport au cas classique d'un mélange binaire, le modèle de dissolution basé sur le non équilibre local conduit :

- au transfert de masse dans la phase organique régit par une cinétique d'ordre 1 - un bilan par espèce doit être pris en compte
- aux coefficient de dispersion et de transfert de masse qui dépendent du mélange multiconstituants (non linéarités supplémentaires)
- la saturation de la phase γ (ou fraction volumique ϵ_γ) aui dépend étroitement des différents terme de transfert de masse entre la phase organique et l'eau (par exemple).

5.2.2 Corrélation du coefficient de transfert de masse et paramètres associés au transport

Outre les paramètres liés à l'écoulement déjà introduit (perméabilités relatives), l'évaluation des paramètres de dispersion $\mathbf{D}_{E\beta}$, $\mathbf{D}_{E\gamma}$, des coefficients de transfert α_E nécessitent l'utilisation

de corrélations. Ces relations sont largement décrites dans la littérature concernant les mélanges binaires [Khachikian and Harmon 2000] mais peu pour les mélanges multiconstituants.

Expression du coefficient de dispersion active La répartition des phases et la vitesse d'écoulement ont un impact sur les coefficients de dispersion du constituant. Il dépend des concentrations des autres constituants. On parle de coefficients de dispersion active (par opposition à la dispersion passive lorsqu'il n'y a pas d'échange entre phases). Cet effet est souvent oublié dans les modélisations, pourtant il peut avoir une influence non négligeable sur le comportement du système.

La dépendance des coefficients avec la composition du mélange est donc peu décrite et souvent négligé lorsque les constituants du mélange sont en faible quantité, elle est généralement négligée. Pour une phase monoconstituant, le coefficient de dispersion dans la phase eau est estimé en fonction de la saturation en NAPL, de la porosité du milieu et de la vitesse d'écoulement. Le tableau 5.1 rassemble les expressions du coefficient de dispersion trouvées dans la littérature [Chastanet 2007]. L'expression du coefficient de dispersion correspond à

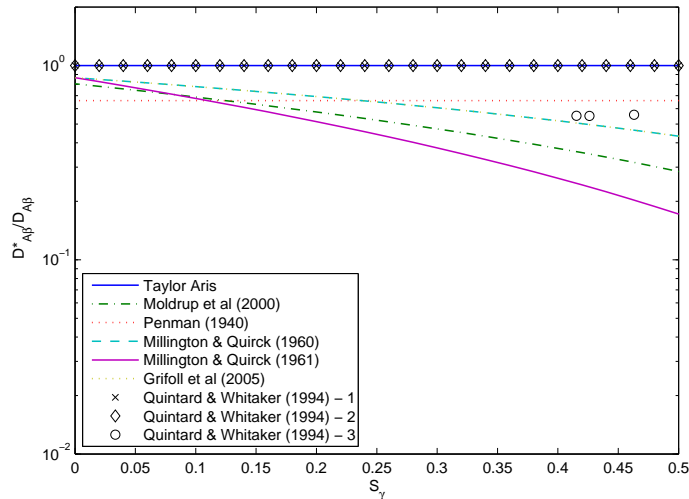


FIG. 5.2 – Corrélation pour le coefficient de diffusion en fonction de la saturation en NAPL ($\phi = 0.65$, $Pe = 0$), extrait de [Chastanet 2007].

celle du problème de Taylor Aris en l'absence de phase organique, cette expression peut servir de référence pour les autres expressions. Les corrélations proposées pour des milieux modèles (cf. Fig. 5.2) telles que celles de [Quintard and Whitaker 1994; Bekri and Adler 2002] sont issues de calculs numériques sur des géométries simplifiées tandis que les autres ont été évaluées à partir d'expériences. Certaines expressions sont valables uniquement en régime diffusif ([Penman 1940; Millington and Quirk 1960; Millington and Quirk 1961; Moldrup *et al.* 2000]) et d'autres uniquement en régime dispersif, *i.e.* $Pe > 1$, [Bekri and Adler 2002; Haga *et al.* 1999]. Enfin, les expressions proposées par [Grifoll *et al.* 2005; Nutzmann *et al.* 2002] sont issues de l'expression générale de [Bear 1972] dans laquelle la dispersivité $\bar{\alpha}_l$ dépend de la saturation (voir Tableau 5.1). Lors de l'implémentation du module de dissolution, les coefficients de dispersion seront considérés comme ne dépendant que de la saturation, de la porosité, de la vitesse d'écoulement et des concentrations des constituants. L'utilisation des corrélations présentées dans le tableau 5.1 induisent des erreurs sur l'estimation des coefficients puisque, en général, elles ne prennent pas en compte la composition des phases (caractéristique des mélanges multiconstitu-

Références	Corrélations	Milieu & remarques
Taylor-Aris	$\overline{D}_\beta^* = 1 + 1/210Pe^2$	pas de phase organique
[Bekri and Adler 2002]	$\overline{D}_\beta^* = 5S_\beta^{-0.65}Pe^{1.21}$	milieu reconstruit, régime dispersif 40% < S_β < 60%
[Grifoll <i>et al.</i> 2005]	$\overline{D}_\beta^* = S_\beta * \phi^{1/3} + \overline{\alpha}_l Pe$	sol, $\overline{\alpha}_l = \overline{\alpha}_{l0}(13.6 - 16S_\beta + 3.4S_\beta^5)^a$
[Haga <i>et al.</i> 1999]	$\overline{D}_\beta^* = 1.25Pe S_\beta^{-1.1}$	lit reconstruit, régime dispersif $S_\beta > 75\%$
[Millington and Quirk 1960]	$\overline{D}_\beta^* = S_\beta \phi^{1/3}$	sol, régime diffusif
[Millington and Quirk 1961]	$\overline{D}_\beta^* = S_\beta^{7/3} \phi^{1/3}$	sol, régime diffusif
[Moldrup <i>et al.</i> 2000]	$\overline{D}_\beta^* = S_\beta^{3/2} \phi^{1/2}$	sol reconstruit, régime diffusif $S_\beta \phi < 50\%$
[Nutzmann <i>et al.</i> 2002]	$\overline{D}_\beta^* = 0.00395 Pe(S_\beta \phi)^{-2.90}$	billes de verre, 10% < $S_\beta \phi$ < 40%
"	$\overline{D}_\beta^* = 0.00215 Pe(S_\beta \phi)^{-2.25}$	sable grossier, "
[Penman 1940]	$\overline{D}_\beta^* = 0.66$	sol, régime diffusif
[Quintard and Whitaker 1994] - 1	$\overline{D}_\beta^* = 1 + 11/2800(S_\beta \phi)^2 Pe^2$	
[Quintard and Whitaker 1994] - 2	$\overline{D}_\beta^* = 1 + 11/11200(S_\beta \phi)^2 Pe^2$	
[Quintard and Whitaker 1994] - 3	$\overline{D}_\beta^* = a + bPe^n$	a, b, n fonction de ε_β

TAB. 5.1 – Corrélations pour le coefficient de dispersion normalisé ($\overline{D}_\beta^* = D_{A\beta}^*/D_{A\beta}$ et $Pe = |\mathbf{V}_\beta|l_\beta/(\phi S_\beta D_{A\beta})$), extrait de [Chastanet 2007].

^aLa dispersivité normalisée $\overline{\alpha}_{l0} = \alpha_l/l_\beta$ sera supposé égale à 1 dans la figure 5.2. Notons néanmoins que celle-ci peut être très différente de 1 et influence fortement la valeur du coefficient de dispersion.

ants) et le caractère actif des coefficients (du aux échanges de masse) [Chastanet 2007].

5.2.3 Coefficients de transfert de masse

Les coefficients de transfert de masse dépendent des paramètres thermodynamiques, physiques et géométriques du système. En admettant la loi de Raoult, l'étude de [Coutelieris *et al.* 2006] montre que les coefficients de transfert de masse sont plus faibles en présence d'autres constituants que lorsqu'ils sont seuls dans la phase organique. Seules les estimations du coefficient pour les corps purs sont utilisées.

Les tableaux 5.2 et 5.3 regroupent plusieurs corrélations trouvées dans la littérature [Chastanet 2007]. La figure 5.3 représente certaines de ces corrélations (Tableau 5.3) en fonction du nombre de Reynolds. Sur la figure 5.3, on remarque que le coefficient de transfert de masse augmente avec le nombre de Reynolds. Les études théoriques ont permis de mettre en évidence un régime diffusif aux faibles nombres de Reynolds; le coefficient atteint alors une asymptote [Quintard and Whitaker 1994; Radilla 1997; Ahmadi *et al.* 2001]. Ceci conduit à la sur-estimation du non-équilibre-local aux faibles Reynolds.

La détermination du coefficient de transfert de masse reste difficile car fonction nombreux paramètres. La taille caractéristique matérialisant la distance entre amas de phase organique

Références	Corrélations	Remarques
[Friedlander 1957]	$Sh' = 0.89Pe^{0.33}\varepsilon_\beta^{-0.33}$	$Re < 5$; $Pe\varepsilon_\beta^{-1} > 1000$
[Bowman <i>et al.</i> 1961]	$Sh' = 2$	$Pe < 1$
"	$Sh' = 0.978Pe^{0.33}\varepsilon_\beta^{-0.33}$	$Pe > 10$
[Levich 1962]	$Sh' = 2 + 1.24Pe^{0.33}\varepsilon_\beta^{-0.33}$	$0 < Pe \ll 1000$
[Williamson <i>et al.</i> 1963]	$Sh' = 2.50Pe^{0.33}$	$0.035 < Re < 55$
"	$Sh' = 2.40Re^{0.33}Sc^{0.42}\varepsilon_\beta^{0.67}$	$0.08 < Re/\varepsilon_\beta < 125$
[Wilson and Geankoplis 1966]	$Sh' = 1.09Pe^{0.33}\varepsilon_\beta^{-1}$	$0.0016 < Re < 55$; $0.35 < \varepsilon_\beta < 0.75$ $950 < Sc < 70600$
[Sherwood <i>et al.</i> 1975]	$Sh' = (4 + 1.21Pe^{2/3}\varepsilon_\beta^{-2/3})^{1/2}$	$0 < Pe < 10000$
[Dwivedi and Updhyay 1977]	$Sh' = 1.11Re^{0.18}Sc^{0.33}\varepsilon_\beta^{-1}$	$Re < 10$
"	$Sh' = Sc^{0.33}\varepsilon_\beta^{-1}(0.76Re^{0.18} + 0.36Re^{0.61})$	all Re
[Kumar <i>et al.</i> 1977]	$Sh' = 1.110Re^{0.28}Sc^{0.33}\varepsilon_\beta^{-1}$	$0.016 < Re < 10$ $0.26 < \varepsilon_\beta < 0.63$ $123 < Sc < 70600$

TAB. 5.2 – Corrélations pour le coefficient de transfert de masse normalisé faisant intervenir la surface spécifique ($Sh' = \alpha_A l_\gamma / (D_{A\beta} a_v)$, $Sc = \mu_\beta / D_{A\beta} \rho_\beta$, $Re = |\mathbf{V}_\beta| l_\gamma \rho_\beta / (\phi S_\beta \mu_\beta)$ et $Pe = Re Sc$).

Références	Corrélations	Remarques
[Miller <i>et al.</i> 1990]	$Sh = 425\varepsilon_\beta \left(\frac{Re}{\varepsilon_\beta}\right)^{0.75} \varepsilon_\gamma^{0.60}$	$0.005 < \frac{Re}{\varepsilon_\beta} < 0.01$
[Parker 1990]	$Sh = 1240\varepsilon_\beta \left(\frac{Re}{\varepsilon_\beta}\right)^{0.75} \varepsilon_\gamma^{0.60}$	$0.1 < \frac{Re}{\varepsilon_\beta} < 0.2$
[Guarnaccia <i>et al.</i> 1992]	$Sh = 107 \left(\frac{Re}{\varepsilon_\beta}\right)^{0.98} \varepsilon_\gamma^{0.54}$	$0.002 < \frac{Re}{\varepsilon_\beta} < 0.05$
[Powers <i>et al.</i> 1992]	$Sh = 57.7Re^{0.61} d_{50}^{0.64} U_i^{0.41}$	$0.03 < Re < 0.8$
[Geller and Hunt 1993]	$Sh = 70.5Re^{1/3} \varepsilon_\gamma^{4/9} S_\gamma^{5/9} \phi^{-2/3} (d_{50}/l_\gamma)^{5/3}$	$0.002 < Re < 0.2$
[Imhoff <i>et al.</i> 1994]	$Sh = 340Re^{0.71} \varepsilon_\gamma^{0.87} (x/d_{50})^{-0.31}$	$0.007 < Re < 0.02$
[Quintard and Whitaker 1994]	$Sh = 1.13\varepsilon_\beta^{0.50} (a + b \left(\frac{Re}{Sc}\right)^n)$	

TAB. 5.3 – Corrélations pour le coefficient de transfert de masse normalisé (nombre de Sherwood) ($Sh = \alpha_A l_\gamma^2 / D_{A\beta}$ et $Re = |\mathbf{V}_\beta| l_\gamma \rho_\beta / (\phi S_\beta \mu_\beta)$), extrait de [Chastanet 2007].

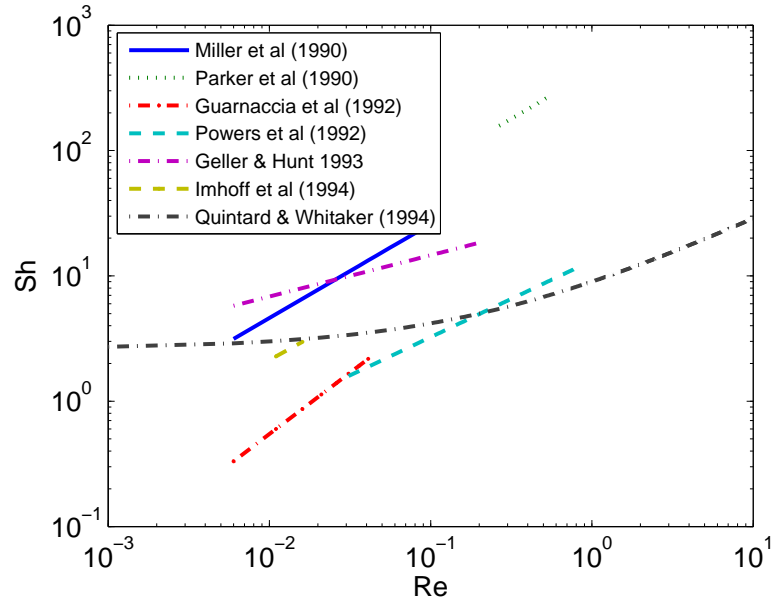


FIG. 5.3 – Corrélation pour le coefficient de transfert de masse en fonction du nombre de Reynolds ($\varepsilon_\beta = 0.373$, $d_{50} = 1$ cm, $U_i = 1$, $\phi = 0.65$, $x/d_{50} = 7$, $Sc = 1000$), extrait de [Chastanet 2007]

piégé : $\alpha_A \sim D_{A\beta}/l_{amas}^2$ peut être utilisée. Pour un milieu homogène, des amas de NAPL espacés de 10^{-6} m donne un coefficient de transfert α_A de l'ordre de 10^3 s $^{-1}$ (équilibre local). Pour un milieu hétérogène avec des distances inter-amas allant jusqu'à 10^{-2} m, le paramètre est plus faible ($\sim 10^{-4}$ s $^{-1}$), la dissolution sera plus lente (situation de non équilibre local). L'évaluation du coefficient de transfert de masse en régime diffusif donne une borne inférieure du coefficient [Quintard and Whitaker 1994; Aigueperse and Quintard 1994; Radilla 1997; Ahmadi *et al.* 2001; Ahmadi *et al.* 2001]. Si le coefficient de transfert de masse est important en régime diffusif, un modèle d'équilibre local sera utilisé quelque soit le régime (diffusif ou convectif). La mise en place du module de dissolution dans les équations de transport multiconstituants proposera une forme ouverte à la formulation du paramètre α en autorisant les variations dans l'espace ainsi que les dépendances avec la saturation et la vitesse et avec les concentrations des constituants.

5.3 Discrétisation des équations de transport

Dans le cadre du couplage écoulement/transport, une formulation analogue à l'écoulement par « operator splitting » est envisagée. Les équations de transport associées à chaque constituant ont des propriétés analogues à celles dégagées lors de l'écoulement. On retrouve un terme de diffusion (dispersion active) en zone saturée $\nabla \cdot (\mathbf{D}_{A\beta}^* \nabla \langle \rho_\beta \omega_{A\beta} \rangle^\beta)$ associé au terme de transfert de masse $\alpha_A (\langle \rho_\beta \omega_{A\beta} \rangle^\beta - C_A^{eq} \langle x_{A\gamma} \rangle^\gamma)$, un terme de diffusion en zone non saturée $\nabla \cdot (-\sum_{j=1}^{N-1} \rho D_{ij} \nabla \omega_j)$ et un terme de convection $\langle \mathbf{V}_\beta \rangle^\beta \cdot \nabla \langle \rho_\beta \omega_{A\beta} \rangle^\beta$. Une méthode de séparation des opérateurs est appliquée à l'équation de transport. Les éléments finis mixtes hybrides ont été retenus pour discrétiser le terme de diffusion. Ils sont particulièrement bien adaptés à la modélisation du transport réactifs multiconstituants [Mosé *et al.* 1994; Younes 1998]. La partie convective de l'équation de transport est de nature hyperbolique. Les schéma classiques

en éléments finis produisent des oscillations numériques au niveau des fronts. D'autres schémas peuvent être utilisés. Les fronts de migration des constituants sont alors décrits par des caractéristiques. L'utilisation naturelle des méthodes Lagrangiennes conçues pour ce type d'équation calculent la solution en fraction massique le long des caractéristiques en utilisant des pas de temps relativement grands. Certaines approches dites Euléro-Lagrangiennes permettent de résoudre les équations de transport complètes avec convection et diffusion [Espedal and Ewing 1977; Binning and Celia 1999] comme les méthodes de caractéristiques modifiées MMOC, les méthodes ELLAM [Dahle *et al.* 1995; Neubauer and Bastian 2004]. Ces méthodes posent néanmoins certains problèmes concernant le traitement de fronts d'infiltration multiples ainsi que de la prise en compte des hétérogénéités [Binning and Celia 1999]. Des schémas d'ordre supérieur utilisant des éléments finis discontinus permettent de représenter correctement les fronts issus de la discrétisation du terme de convection [Harten 1990; Roe 1986; Younes *et al.* 2009]. Les éléments finis discontinus ont été retenus pour approcher les termes de convection dans les équations de transport.

Conclusion générale

Dans le cadre de cette thèse, un modèle d'écoulement triphasique compressible en milieu poreux a été développé. Le modèle d'écoulement est basé sur une formulation dite d'écoulement fractionnel. Ce type de formulation conduit à la résolution d'une équation en pression globale et de deux équations de saturation en eau et en gaz. Le choix de la variable en pression globale permet de diminuer le couplage entre les équations de pression et de saturation. La méthode IMPES (IMplicit Pressure EXplicit saturation) a été retenue car elle permet de traiter séparément les termes de convection (termes convectifs des équations de saturation) et les termes de diffusion (pression globale et terme de diffusion des équations de saturation) avec des schémas numériques appropriés. Les éléments finis mixtes hybrides sont appliqués aux termes de diffusion et les éléments finis discontinus aux termes de convection.

Modèle d'écoulement et algorithmes d'interpolation des données triphasiques

L'approche en pression globale a été initialement introduite pour les écoulements diphasiques incompressibles [Chavent 1976; Antoncev and Monahov 1978]. Par la suite, elle fut généralisée par [Chavent and Jaffré 1986] aux écoulements di et triphasiques sous l'approximation que les facteurs de volumes étaient calculés à partir de la pression globale et non pas de leur pressions respectives. Concernant les écoulements triphasiques, cette approche en pression globale permet d'obtenir des perméabilités relatives et des pressions capillaires respectant la condition de Différentielle Totale (DT). La difficulté associée à l'obtention de données DT physiques réalistes [Chavent and Salzano 1985; Jégou 1997] a limité jusqu'à maintenant son utilisation dans des codes d'écoulement industriel. C'est cette première approche que nous avons investiguée dans le chapitre 2.

L'approche originale empruntée au milieu pétrolier en pression globale et satisfaisant la condition de « différentielle totale » est appliquée ici aux écoulements triphasiques compressibles [Chavent and Jaffré 1986]. Elle propose une interpolation des variables secondaires *DT compatibles* par optimisation. Dans le chapitre 2, des expériences numériques ont été menées sur deux sables de types H1F (sable fin) et H2F (sable moyen). L'algorithme nécessite comme données d'entrée les relations constitutives (courbes de perméabilité, pressions capillaires) de deux des trois systèmes diphasiques : eau/huile et gaz/huile. Les flux fractionnaires sont ensuite construits à partir de la condition de différentielle totale. A l'issue de cette étape, un modèle de perméabilité relative eau/gaz est déterminé par optimisation et sur la base des flux fractionnaires DT. Le diagramme ternaire \mathbb{T} est ainsi *fermé*. Enfin, les perméabilités triphasiques DT sont déterminées par optimisation en satisfaisant certaines contraintes de régularité et de monotonie. Contrairement aux données classiquement connues dans l'exploitation des gisements pétroliers (eau/huile et gaz/huile), la modélisation des écoulements dans les aquifères utilise plus couramment des don-

nées issues du système diphasique eau/gaz. Cette approche par optimisation rend donc difficile son utilisation dans la simulation des pollutions au sein des hydrosystèmes. Cette motivation a guidé Guy Chavent [Chavent 2009] vers l'élaboration d'un nouvel algorithme dont nous donnons le détail de l'implémentation en chapitre 3.

L'algorithme développé prend comme paramètres d'entrée les modèles classiques diphasiques en perméabilité relative et pression capillaire. Une correction est appliquée aux modèles initiaux de manière à respecter la condition d'existence de la pression capillaire globale $P_c^g(s, p)$ dont les flux fractionnaires et les perméabilités triphasiques sont dérivées. Par ailleurs le respect de la condition de compatibilité sur la pression capillaire globale n'affecte pas de manière significative les modèles de perméabilités en système diphasique. Par construction, ces perméabilités relatives et les flux fractionnaires associés respectent la condition de différentielle totale (DT). Elle permet de remplacer avantageusement la formulation classique par une formulation en pression globale équivalente [Chavent 2009] avec une variable primaire en pression définie comme $P = P_2 + P_c^g(S, P)$. L'algorithme est basé sur la résolution d'un problème harmonique (mobilité globale) résolu par éléments finis C^0 et d'un problème biharmonique résolu par éléments finis C^1 (pression capillaire globale) sur l'ensemble du diagramme ternaire. Les résultats numériques montrent l'efficacité de l'algorithme qui permet de son utilisation dans un code d'écoulement utilisant le formalisme de pression globale. En outre, la détermination du facteur de compressibilité $\partial P_c^g / \partial p(s, p)$ présent dans la loi de Darcy (vitesse totale) \mathbf{q} a permis de montrer que la relation $0 \leq \partial P_c^g / \partial p \ll 1$ était satisfaite dans le cas d'une seule phase gaz compressible. Contrairement à l'approche originale qui demande le *réglage* (parfois sensible) de certains paramètres d'optimisation, la nouvelle approche permet de traiter de manière « quasi-automatique » la génération des variables secondaires DT nécessaire à la résolution de l'écoulement. Des recherches ultérieures pourront se focaliser sur une optimisation du problème biharmonique afin de se rapprocher de données expérimentales ou d'un modèle de perméabilité connu sur \mathbb{T} comme celui de [Stone 1970]. Enfin des recherches complémentaires permettraient d'associer les deux éléments finis composites développés (cf. chapitre 3); de tirer partie de la rapidité des éléments finis spectraux réduits et de la précision des éléments finis complets.

Validation de l'écoulement formulés en pression globale

L'approche en pression globale associant l'algorithme d'interpolation présenté dans le chapitre 3 a été numériquement testé sur des écoulements diphasiques variés. L'interpolation des variables DT est générée pour une gamme de pression globale initiale en prenant comme paramètres les saturations. La résolution de l'équation en pression globale par les éléments finis mixtes hybrides fournissent simultanément un champ de pression et de vitesse. La résolution d'un problème purement diffusif comme l'écoulement contre-courant eau/air de McWorther-Sunada a montré la reproduction correcte du front de diffusion ainsi que du flux diffusif.

Concernant la mise en oeuvre des éléments finis discontinus, nous avons pu tester leur robustesse dans l'approximation numérique de fronts raides purement convectif (écoulement unidirectionnel de Buckley-Leverett, Ecoulement bidimensionnel « Five-spot »). Cependant la discrétisation explicite en temps du terme convectif des équations de saturation nécessite le strict respect du critère de courant afin de garantir la stabilité du schéma numérique (petit pas de temps). Enfin le couplage pression/saturation a été testé et comparé sur la base du cas test numérique du *Five-spot*. Le dernier cas A1 MACAOH a permis de vérifier l'implémentation du terme de gravité et la prise en compte de la phase fluide compressible. A noter que le terme de

gravité présent dans l'équation de saturation est résolu avec le terme de diffusion.

Le modèle d'écoulement triphasique discrétisé (chapitre 3 et 4) reste à tester dans le cas A1 MACAOH en introduisant une équation supplémentaire en saturation pour la phase gaz. Il conviendra également de tester ultérieurement le modèle dans un contexte hétérogène. L'expérience d'infiltration du TCE dans une tranche verticale de milieu poreux constitué de plusieurs sables étudié par [Kueper and Frind 1991] pourra servir de test. En milieu hétérogène, la pression capillaire (pression globale et pression capillaire globale) reste continue avec le modèle de Van Genuchten. Par contre le modèle de Brooks-Corey nécessite d'introduire une condition dite de pression étendue [Duijn and de Neef 1998] pour tenir compte de la pression d'entrée. En outre la continuité imposée par la résolution mixte hybride des traces de saturation valable en milieu homogène doit être modifiée sur les facettes se trouvant à l'interface entre deux milieux poreux [Nayagum 2001; Nayagum *et al.* 2004]. Enfin, la méthode de Picard (convergence linéaire) utilisée dans la résolution du système couplé pression/saturation pourra être remplacée par une méthode de Newton-Raphson plus performante (convergence quadratique).

Perspectives concernant le transport multiconstituant

Dissolution

Le modèle théorique pour décrire ces processus est formé d'équations de conservation de la masse non linéaires et fortement couplés entre elles et avec le modèle d'écoulement. Dans le modèle de transport proposé en chapitre 5, d'une part, l'évolution de la phase organique dépend du transfert inter-phases de tous les constituants et, d'autre part, le transfert diffusif dans la phase organique peut être un critère limitant pour la dissolution ; ces deux points sont des caractéristiques spécifiques liées à la présence de plusieurs composés organo-chlorés dans les phases. Dans le modèle proposé, les échanges inter-phases sont traités à partir de la loi de Raoult pour chaque constituant. Celle-ci conduit à une cinétique de dissolution d'ordre un. Il est important de noter que la loi de Raoult n'est valable que pour des mélanges idéaux.

Par ailleurs, les coefficients effectifs du modèle tels que la perméabilité relative, les coefficients de dispersion et les coefficients de transfert de masse dépendent de nombreux paramètres du système. Les estimations des coefficients sont souvent spécifiques à un milieu ou une situation précise et ne peuvent pas toujours être généralisées. Une forme relativement ouverte sera proposée pour la formulation de ces coefficients dans le code multiphasique multiconstituant. On retiendra que :

- la perméabilité relative varie avec la saturation ;
- les coefficients de dispersion varient avec la saturation du NAPL, la vitesse de l'écoulement et la composition du mélange. Les corrélations présentées prennent rarement en compte le caractère actif de ces coefficients (c'est-à-dire qu'ils sont influencés par les échanges entre phases). Cet oubli conduit à sur-estimer les coefficients ;
- les coefficients de transfert de masse sont des paramètres clefs puisqu'il peuvent conduire à une situation d'équilibre locale (α_A élevé) ou de non équilibre locale (α_A faible). Ces coefficients varient dans l'espace ; ils dépendent de la saturation, de la vitesse de filtration et de la composition des mélanges.

Biodégradation des organo-chlorés

La représentation mathématique de la biodégradation séquentielle des organo-chlorés est basée sur une cinétique de type hyperbolique de Michaelis-Menten. L'objectif est de tenir compte de trois concepts clefs : la notion de réactif limitant dans la cadre d'une réaction d'oxydo-réduction, le phénomène de compétition entre accepteur et donneur d'électron et enfin de tenir compte d'un phénomène de consommation des accepteurs/donneurs d'électron à travers des termes d'inhibition (rôle des ions sulfates). L'ensemble des formalisme retenu pour l'implémentation de la dégradation séquentielle des organo-chlorés se basera sur les travaux de [Nex 2004]. L'intégration d'un module de biodégradation permettra de modéliser l'ensemble des processus d'atténuation naturelle d'une pollution dans un milieu poreux souterrain, en particulier une pollution par des composés organo-chlorés. En effet, la prise en compte de l'ensemble des mécanismes de volatilisation et de dissolution et de biodégradation (séquentielle et non séquentielle) permet de mieux représenter l'ensemble des mécanismes d'atténuation naturelle de la pollution. Une extension du modèle de biodégradation aux deux autres familles de composés organo-chlorés aliphatiques sera proposé (schéma de dégradation analogue à ceux des chloréthènes [Nex 2004; Nex *et al.* 2006]). Enfin, la prise en compte de la biodégradation de la phase organique résiduelle pourra être investiguée sur la base des travaux réalisés par [Côme 1996].

Bibliographie

- [Ahmadi *et al.* 2001] Ahmadi, A., Aigueperse, A. and Quintard, M. 2001 Calculation of the effective properties describing active dispersion in porous media : from simple to complex unit cells. *Advances in Water Resources* **24** (3-4), 423–438.
- [Ahmadi *et al.* 2001] Ahmadi, A., Aigueperse, A. and Quintard, M. 2001 Upscaling of nonwetting phase residual transport in porous media : a network approach. *Transport in porous media* **43**, 309–353.
- [Aigueperse and Quintard 1994] Aigueperse, A. and Quintard, M. 1994 Macroscopic models for active dispersion in aquifers contaminated by non-aqueous phase liquids. In *Computer Techniques in environmental studies V Vol. 1 : pollution modelling* (ed. P.Zanetti), pp. 157–164. Computational Mechanics Publications, Boston.
- [Amaziane and Jurak 2008] B. Amaziane and M. Jurak. A new formulation of immiscible compressible two-phase flow in porous media. *Comptes Rendus Mécanique*, 336 :600–605, 2008.
- [Bastian 1999] P. Bastian. Numerical computation of multiphase flow in porous media. Habilitationsschrift, 1999.
- [Bear 1972] Bear, J. 1972 *Dynamics of fluids in porous media*. Am. Elsevier Publishing Company, Inc.
- [Bekri and Adler 2002] Bekri, S. and Adler, P. M. 2002 Dispersion in multiphase flow through porous media. *International Journal of Multiphase Flow* **28** (4), 665–697.
- [Bernadou and Hassan 1980] R. Bernadou and K. Hassan. Basis functions for general hsieh-clough-tocher triangles complete or reduced. Technical report, INRIA, 1980.
- [Bernadou *et al.* 1980] M. Bernadou, J-M. Boisserie, and K. Hassan. Sur l’implémentation des éléments finis de hsieh-clough-tocher complet et réduit. Technical report, INRIA, 1980.
- [Binning and Celia 1999] P. Binning and M.A. Celia. Practical implementation of the fractional flow approach to multi-phase flow simulation. *Advances in Water Resources*, 22 :461–478, 1999.
- [Bjorck 1996] A. Bjorck. *Numerical Methods for Least Squares Problems*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1996.
- [Blunt and Rubin 1992] M. Blunt and B Rubin. Implicit flux limiting schemes for petroleum reservoir simulation. *Journal of Computational Physics*, 102 :194–210, 1992.
- [Bowman *et al.* 1961] Bowman, C., Ward, D., Johnson, A. and Trass, O. 1961 Mass transfer from fluid and solid spheres at low reynolds numbers. *Can. J. Chem. Eng.* **39**, 9–13.

- [Brooks and Corey 1964] R.H. Brooks and A.T. Corey. *Hydraulic properties of porous media. Hydrology Paper 3*. Colorado State University, Fort Collins, Colorado, 1964.
- [Brusseu and Rao 1989] M.L. Brusseu and P.S.C Rao. The influence of sorbate-organic matter interactions on sorption non equilibrium. *Chemosphere*, 18 (9/10) :1691–1706, 1989.
- [Byrd *et al.* 1994] R. Byrd and P. Lu and J. Nocedal and C. Zhu. *A limited memory algorithm for bound constrained optimization*, 1994. Computer Science Department, University of Colorado at Boulder, NAM-08.
- [Buckley and Leverett 1942] S.E. Buckley and M.C. Leverett. Mecanism of fluid displacement in sands. *Trans. Am. Inst. Min. Metall. Pet. Eng.*, 146 :107–116, 1942.
- [Celia *et al.* 1990] M.A. Celia. and E.T. Bouloutas and R.L. Zarba A general mass-conservative numerical solution for unsaturated flow equation *Water Resources Research*, 26(7) 1483–1496, 1990.
- [Chella *et al.* 1998] Chella, R., Lasseux, D. and Quintard, M. 1998 Multiphase, multicomponent fluid flow in homogeneous and heterogeneous porous media. *Revue Inst. Fr. Petrole* **53** (3), 335–346.
- [Côme 1996] J.M. Côme. *Expérimentation et modélisation des procédés in situ de dépollution par biodégradation aérobie des aquifères contaminés par des hydrocarbures - Prise en comptes d'une phase résiduelle*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris, FRANCE (1996).
- [Côme *et al.* 1998] J.M. Côme, , and P. le Thiez. *SIMUSCOPP, un modèle numérique original de migration des polluants organiques et de réhabilitation des sites = SIMUSCOPP : An original computer model for the migration of organic pollutants and the rehabilitation of sites*. SHF, Paris, FRANCE (1998) (Monographie), 1998.
- [Corey 1954] Corey, A. 1954 Interrelation of gas and oil relative permeabilities. *Producer's Monthly* **19** (1), 38–41.
- [Coutelieris *et al.* 2006] Coutelieris, F., Kainourgiakis, M., Stubos, A., Kikkinides, E. and Yortos, Y. 2006 Multiphase mass transport with partitioning and inter-phase transport in porous media. *Chemical Engineering Science* **61** (14), 4650–4661.
- [Buckley and Leverett 1942] S.E. Buckley and M.C. Leverett. Mecanism of fluid displacement in sands. *Trans. Am. Inst. Min. Metall. Pet. Eng.*, 146 :107–116, 1942.
- [Chao *et al.* 1998] K. Chao, S.K. Ong, and A. Protopapas. Water-to-air mass transfert of vocs : laboratory scale air sparging system. *J. Environ. Eng.*, 124 (11) :1054–1060, 1998.
- [Chastanet 2007] J. Chastanet. Transport et dissolution des solvants chlorés dans la zone saturée. Post doctorat, Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, octobre 2007.
- [Chavent and Jaffré 1986] G. Chavent and J. Jaffré. *Mathematical models and Finite Elements for Reservoir Simulation*. Amsterdam, North Holland, 1986.
- [Chavent and Salzano 1985] G. Chavent and G. Salzano. Un algorithme pour la détermination de perméabilités relatives triphasiques satisfaisant une condition de différentielle totale. Technical report, Inria Research Report RR-0355, 1985.

-
- [Chavent *et al.* 2008] G. Chavent, R. di Chiara, and G. Schäfer. A fully equivalent global pressure formulation for three-phase compressible flows. In *Scaling'Up 08, Dubrovnik*, October 13-16 2008.
- [Chavent 1981] G. Chavent. The global pressure, a new concept for the modelization of compressible two-phase flows in porous media. *Flow and Transport in Porous Media*, Euromech 143 and Delft :191–168, 1981.
- [Chavent 2009] G. Chavent. A fully equivalent global pressure formulation for three-phases compressible flows. *Applicable Analysis : An International Journal*, 1563 :504x, October 2009.
- [Chen 2005] Z. Chen. *Finite Element Methods and Their Applications, Scientific Computation*. Springer, 2005.
- [Coutelieris *et al.* 2006] F. Coutelieris, M. Kainourgiakis, A. Stubos, E. Kikkinides, and Y. Yortos. Multiphase mass transport with partitioning and inter-phase transport in porous media. *Chemical Engineering Science*, 61 :(14), 4650–4661, 2006.
- [Dahle *et al.* 1995] H.K. Dahle and R.E. Ewing and T.F. Russel Eulerian-Lagrangian localized adjoint methods for a linear advection-diffusion equation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 122, 223–250, 1995.
- [Dawson and Wheeler 1992] C.N. Dawson and M.F. Wheeler. *Time splitting methods for advection-diffusion-reaction equations arising in contaminant transport*. Industrial and Applied Mathematics, 1992.
- [de Marsily 1981] G. de Marsily. *Hydrologie quantitative, Collection science de la terre*. Paris : Masson, 1981.
- [Ducreux *et al.* 1994] J. Ducreux, , and P. le Thiez. *A 3-D Numerical model for analysing hydrocarbon migration into soils and aquifers*. Computer Methods and Advances in Geomechanics, 1994.
- [Duijn and de Neef 1998] C.J. Van Duijn and M.J. de Neef. Similarity solution for capillary redistribution of two phases in a porous medium with a single discontinuity. *Advances in Water Resources*, 21 :451–461, 1998.
- [Durlinsky 1993] L.J. Durlinsky. A triangle based mixed finite element-finite volume technique for modelling two phase flow through porous media. *J. Comput. Phys.*, 105 :252–266, April 1993.
- [Dwivedi and Updhyay 1977] Dwivedi, P. and Updhyay, S. 1977 Particle-fluid mass transfer in fixed and fluidized beds. *Ind. Engng Chem. Proc. Des. Div.* **16** (2), 157–165.
- [Eisenstat 1981] S.C. Eisenstat, Efficient implementation of a class of preconditioned conjugate gradient methods. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, (1981) **2** :1-4
- [Espedal and Ewing 1977] M.S. Espedal and R.E. Ewing 1987 Characteristic Petrov-Galerkin subdomain methods for two-phase immiscible flow.. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. **67**, 279–285.

- [Faust 1985] C.R. Faust. Transport of immiscible fluids within and below the unsaturated zone : a numerical model. *Water Resources Research*, 21 (4) :587–596, 1985.
- [Fayers 1962] F. J. Fayers. Some theoretical results concerning the displacement of a viscous oil by a hot fluid in a porous medium. *J. Fluid Mech.*, 13 :65-75, 1962.
- [Fletcher 1987] R. Fletcher. *Practical Methods of Optimization*. John Wiley and Sons, 1987.
- [Forsyth *et al.* 1995] P.A. Forsyth. and Y.S. Wu and K. Press Robust numerical method for saturated-unsaturated flow with dry initial conditions in heterogeneous media *Advances in Water Resources*, 18 (1) 25–38, 1995.
- [Friedlander 1957] Friedlander, S. 1957 Mass and heat transfer to single spheres and cylinders at low Reynolds number. *AIChE J.* **3**, 43–48.
- [Fuller *et al.* 1966] Fuller, E., Schettler, P. and Giddings, J. 1966 A new method for prediction of binary gas-phase diffusion coefficients. *Industrial and Engineering Chemistry* **58**, 18.
- [Geller and Hunt 1993] Geller, J. and Hunt, J. 1993 Mass transfer from non aqueous phase organic liquids in water saturated porous media. *Water Resour. Res.* **29** (4), 833–45.
- [Grifoll and Cohen 1996] Grifoll, J. and Cohen, Y. 1996 Contaminant migration in the unsaturated soil zone : the effect of rainfall and evapotranspiration. *Journal of contaminant hydrology* **23**, 185–211.
- [Grifoll *et al.* 2005] Grifoll, J., Gasto, J. M. and Cohen, Y. 2005 Non-isothermal soil water transport and evaporation. *Advances in Water Resources* **28** (11), 1254–1266.
- [Guarnaccia *et al.* 1992] Guarnaccia, J. F., Imhoff, P. T., Missildine, B. C., Oostrom, M., Celia, M., Dane, J., Jaffe, P. and Pinder, G. 1992 Multiphase chemical transport in porous media. *Tech. Rep.*. Report prepared under Environmental protection agency contract EPA/600/5-92/002, Kerr Environ. Res. Lab., Ada, Oklahoma, USA.
- [Harten 1990] A. Harten. High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. *Journal of Computational Physics*, 49, 375-393, 1983.
- [Hassanizadeh and Gray 1990] S.M. Hassanizadeh and W.G. Gray. Mechanics and thermodynamics of multiphase flow in porous media including interphase boundaries. *Adv. Water Resources*, 13 :169, 1990.
- [Hassanizadeh and Gray 1993] S. Hassanizadeh and W.G. Gray. Thermodynamic basis of capillary pressure in porous media. *Water Resources Research*, 29 :10 :3389–3405, 1993.
- [Helmig 1996] R. Helmig. Gekoppelte strömungs - und transportprozesse im untergrund - ein beitrag zur hydrosystemmodellierung. Habilitationsschrift, April 1996.
- [Helmig 1997] R. Helmig. *Multiphase flow and transport processes in the subsurface. A contribution to the modeling of hydrosystems*. Springer (Environmental Engineering), 1997.
- [Hornung 1997] U. Hornung. *Homogenization and Porous Media*. New York : Springer, 1997.
- [Huber and Helmig 1996] R. Huber and R. Helmig. Multiphase flow in heterogeneous porous media : a classical finite element method versus an IMPES-based mixed FE/FV approach. *Sonderforschungsbereich 404, Mehrfeldprobleme in der Kontinuumsmechanik*, 96/19, 1996.

-
- [Huber and Helmig 1999] R.U. Huber and R. Helmig. Multiphase flow in heterogeneous porous media : a classical finite element method vers en implicit pressure -explicit saturation-based mixed finite element-finite volume approach. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 29 :899–920, 1999.
- [Haga *et al.* 1999] Haga, D., Niibori, Y. and Chida, T. 1999 Hydrodynamic dispersion and mass transfer in unsaturated flow. *Water resources research* **35**, 1065–1077.
- [Huber and Helmig 1999] R.U. Huber and R. Helmig. Multiphase flow in heterogeneous porous media : a classical finite element method vers en implicit pressure -explicit saturation-based mixed finite element-finite volume approach. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 29 :899–920, 1999.
- [Imhoff *et al.* 1994] Imhoff, P., Jaffe, P. and Pinder, G. 1994 An experimental study of complete dissolution of a non aqueous phase liquid in saturated porous media. *Water Resour. Res.* **30** (2), 307–20.
- [Jaffré 1980] J. Jaffré. Formulation mixte d'écoulements diphasiques incompressibles dans un milieu poreux. Technical Report RR37, INRIA, 1980.
- [Jin and Jury 1996] Jin, Y. and Jury, W. 1996 Characterizing the dependency of gas diffusion coefficient on soil properties. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **60**, 66–71.
- [Khachikian and Harmon 2000] Khachikian, C. and Harmon, T. 2000 Nonaqueous phase liquid dissolution in porous media : current state of knowledge. *Transport in Porous Media* **38**, 3–28.
- [Kueper and Frind 1991] B.H. Kueper and E.O. Frind Two-phase flow in heterogeneous porous media. 1. Model developpment. *Water Resources Research*, 23, 105–28, 2000.
- [Kumar *et al.* 1977] Kumar, S., Updhay, S. and Mathur, V. 1977 Low reynolds number mass transfer in packed beds of cylindrical particles. *Ind. Engng Chem. Proc. Des. Dev.* **16**, 1–8.
- [Leer 1979] B. Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme v. a second order sequel to godunov's method. *Journal of Computational Physics*, 135 :229–248, 1979.
- [Levich 1962] Levich, V. 1962 *Physicochemical hydrodynamics*. Prentice Hall.
- [Luenberger 1969] D.G. Luenberger. *Optimization by Vector Space Methods*. John Wiley and Sons, 1969.
- [Luenberger 1973] D.G. Luenberger. *Introduction to Linear and Nonlinear Programming*. Addison-Wesley Publishing Company, 1973.
- [McWhorther and Sunada 1990] D.B. McWhorther and D.K. Sunada. Exact integral solutions for two-phase flow. *Water Resources Research*, 26 :399–413, 1990.
- [Miller *et al.* 1990] Miller, C., Poirier-McNeill, M. and Mayer, A. 1990 Dissolution of trapped nonaqueous phase liquids : mass transfer characteristics. *Water Resour. Res.* **26** (11), 2783–96.
- [Millington and Quirk 1960] Millington, R. and Quirk, J. 1960 Transport in porous media. In *Trans. 7th Int. Congr. Soil Sci.* (ed. F. V. B. et al (ed.)), , vol. 1, pp. 97–106. Madison, WI : Elsevier, Amsterdam.

- [Millington and Quirk 1961] Millington, R. and Quirk, J. 1961 Permeability of porous solids. *Trans. Faraday Soc.* **57**, 1200–1207.
- [Moldrup *et al.* 2000] Moldrup, P., Olesen, T., Gamst, J., Schjonning, P., Yamaguchi, T. and Rolston, D. 2000 Predicting the gas diffusion coefficient in repacked soil : water-induced linear reduction model. *Soil Sci. Am. J.* **64**, 1588–1594.
- [Morel-Seytoux *et al.* 1996] H.J. Morel-Seytoux, P.D. Meyer, M. Nachabe, M. Touma, and J. Van Genuchten. Paramater equivalence for the brooks-corey and van genuchten soil characteristics : Preserving the effective capillary drive. *Water Resources Research*, 32 :5 :1251–1258, 1996.
- [Mosé *et al.* 1994] R. Mosé and P. Siegel and P. Ackerer and G. Chavent. Application of the Mixed Hybrid Finite Element Approximation in a Groundwater Flow Model. *Water Resources Research*, 30 :11, 3001–3012, 1994.
- [Mukherji *et al.* 1997] Mukherji, S., Peters, C. and Weber, W. 1997 Mass transfer of polynuclear aromatic hydrocarbons from complex dnapl mixtures. *Environ. Sci. Technol.* **31** (2), 416–423.
- [Nayagum 2001] D. Nayagum. *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 Louis Pasteur de Strasbourg, mars 2001.
- [Nayagum *et al.* 2004] D. Nayagum, G. Schäfer, and R. Mosé. Approximation par les éléments finis mixtes d'une équation de diffusion non linéaire modélisant un écoulement diphasique en milieu poreux. *Compte Rendus de l'Académie des Sciences*, x :xx–xx, 2004.
- [Neubauer and Bastian 2004] T. Neubauer and P. Bastian. *Monotonicity Preserving ELLAM on Unstructured Grids*, 2004 IWR (SFB 359), Universität Heidelberg, 2004.
- [Nex *et al.* 2006] F. Nex, G. Schäfer, J.M. Côme, and T.M. Vogel. Une approche innovante pour modéliser la biodégradation des composés organo-chlorés volatils en aquifères poreux. *C. R. Géos.*, 338 :297–306, janvier 2006.
- [Nex 2004] F. Nex. *Modélisation numérique de la biodégradation des composés organo-chlorés dans les aquifères fondée sur des expérimentations in situ. Le cas des chloroéthènes*. PhD thesis, Université Louis Pasteur, Strasbourg, 2004.
- [Nutzmann *et al.* 2002] Nutzmann, G., Maciejewski, S. and Joswig, K. 2002 Estimation of water saturation dependence of dispersion in unsaturated porous media : experiments and modelling analysis. *Advances in Water Resources* **25** (5), 565–576.
- [Powers *et al.* 1992] S.E. Powers, L.M. Abriola, and W.J. Weber. An experimental investigation of rate-limited nonaqueous phase liquid dissolution in saturated subsurface systems : steady state mass transfer rates. *Water Resour. Res.*, 28 (10) :2691–2705, 1992.
- [Parker 1990] Parker, e. a. 1990 Modeling multiphase organic chemical transport in soils and groundwater. *Tech. Rep.*. Final report submitted to US Environmental Protection Agency, Project CR-814320.
- [Penman 1940] Penman, H. 1940 Gas and vapor movement in soil : the diffusion of vapors through porous solids. *J. Agric. Sci.* **30**, 437–462.

-
- [Quarteroni *et al.* 2007] A. Quarteroni, R. Sacco, and F. Saleri. *Méthodes Numériques - Algorithme, analyse et applications*. Number ISBN 13 978-88-470-0495-5. Springer-Verlag Italia, février 2007.
- [Quintard and Whitaker 1994] Quintard, M. and Whitaker, S. 1994 Convection, dispersion and interfacial transport of contaminants : homogeneous porous media. *Advances in Water Resources* **17**, 221–239.
- [Quintard 1996] M. Quintard. Determination of permeabilities tensors for two-phase flow in homogeneous porous media. *Transport in Porous media*, 24 :107–137, 1996.
- [Quintard *et al.* 2006] Quintard, M., Bletzacker, L., Chenu, D. and Whitaker, S. 2006 Nonlinear, multicomponent, mass transport in porous media. *Chemical Engineering Science* **61** (8), 2643–2669.
- [Radilla 1997] Radilla, G. 1997 Contamination des eaux souterraines par les hydrocarbures : expériences de laboratoire, modélisation, interprétation et résolution des problèmes inverses pour l’estimation des propriétés de transport. PhD thesis, ENSAM.
- [Rahbeh and Mohtar 2006] M.E. Rahbeh and R.H. Mohtar. Application of multiphase transport models to field remediation by air sparging and soil vapor extractor. *J. Hazard. Mater.*, xxx :xxx–xxx, 2006.
- [Reid *et al.* 1987] Reid, R., Prausnitz, J. and B.E., P. 1987 *The properties of gases and liquids*. McGraw-Hill Book Company.
- [Roe 1986] P.L. Roe. Characteristic-based schemes for the Euler equations. *Annu. Rev. Fluid. Mech.*, 16, 337–365, 1986.
- [Roberts and Salzano 1983] J.E. Roberts and G. Salzano. Simulation d’écoulements diphasiques compressibles en milieu poreux. *Tech. Rep.*. INRIA RR-251
- [Sahimi *et al.* 1986] Sahimi, M., Heiba, A. A., Ted Davis, H. and Scriven, L. E. 1986 Dispersion in flow through porous media–ii. two-phase flow. *Chemical Engineering Science* **41** (8), 2123–2136.
- [Sahimi *et al.* 1986] Sahimi, M., Hughes, B. D., Scriven, L. E. and Ted Davis, H. 1986 Dispersion in flow through porous media–i. one-phase flow. *Chemical Engineering Science* **41** (8), 2103–2122.
- [Sander 1999] R. Sander. Compilation of Henry’s law constants for inorganic and organic species of potential importance in environmental chemistry - version 3 -. Air Chemistry Department Max-Planck Institute of Chemistry PO Box 3060 55020 Mainz Germany email : sander@mpch-mainz.mpg.de, April 1999.
- [Sherwood *et al.* 1975] Sherwood, T., Pigford, R. and Wilke, C. 1975 *Mass transfer*. McGraw Hill, Inc., N.Y.
- [Silva and Grifoll 2007] Silva, O. and Grifoll, J. 2007 Non-passive transport of volatile organic compounds in the unsaturated zone. *Advances in Water Resources* **30** (4), 794–807.
- [Spivak *et al.* 1977] A. Spivak, H.S. Price, and A. Settari. Solution of the equations for multidimensionnal, two-phase, immiscible flow by variational methods. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 2 :27–41, 1977.

- [Stone 1970] H.M. Stone. Probability model for estimating three-phase relative permeability. *Journal of Petroleum Technology*, 22 :214–218, 1970.
- [Le Thiez 1999] P. Le Thiez. *SIMUSCOPP Reference Manual V29*, 1999. (IFP et BURGEAP).
- [Taylor and Krishna 1993] Taylor, R. and Krishna, R. 1993 *Multicomponent Mass Transfer*. John Wiley and sons, Inc.
- [Thomson *et al.* 1997] Thomson, N. R., Sykes, J. F. and Van Vliet, D. 1997 A numerical investigation into factors affecting gas and aqueous phase plumes in the subsurface. *Journal of Contaminant Hydrology* **28** (1-2), 39–70.
- [Toro 1997] E. Toro. *Reimann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 1997.
- [Turner 2004] A. Turner. *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, 2004.
- [van Genuchten 1980] M. van Genuchten. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 44 :892–898, 1980.
- [Wakao and Funazkri 1978] Wakao, N. and Funazkri, T. 1978 Effect of fluid dispersion coefficients on particle-to-fluid mass transfer coefficient in packed beds : correlation of sherwood numbers. *Chem. Engng Sci.* **33**, 1375–1384.
- [Wilkins *et al.* 1995] M.D. Wilkins, L.M. Abriola, and K.D. Pennell. An experimental investigation of rate-limited nonaqueous phase liquid volatilization in unsaturated subsurface systems : steady state mass transfer rates. *Water Resour. Res.*, 31 (9) :2159–2172, 1995.
- [Williamson *et al.* 1963] Williamson, J., Bazazaire, K. and Geankoplis, C. 1963 Liquid phase mass transfer at low reynolds numbers. *Ind. Engng Chem. Fund.* **2**, 126–129.
- [Wilson and Geankoplis 1966] Wilson, E. and Geankoplis, C. 1966 Liquid mass transfer at very low reynolds numbers in packed beds. *Ind. Engng Chem. Fundamentals* **5**, 9–14.
- [Younes 1998] A. Younes. *Modélisation de l'écoulement et du transfert de masse en milieu poreux par les éléments finis mixtes et discontinus - Prise en compte du contraste de masse volumique et de viscosité*. PhD thesis, Université Louis Pasteur, Institut de Mécanique des Fluides, 1998.
- [Younes *et al.* 2009] A. Younes, P. Ackerer, and M. Fahs. An efficient geometric approach to solve the slope limiting problem with discontinuous galerkin method on unstructured triangles. *Communication in numerical methods in engineering*, 2009.

A

Algorithme d'interpolation des données triphasiques par optimisation

A.1 Etape 1 - Initialisation

$$j = 1, 2, \forall s_1 \in [0, 1], \forall i \in [0, \dots, NS]$$

$$\left\{ \begin{array}{l} kr_j(s_1, 0) = kr_j^{12}(s_1) \\ f_j(s_1, 0, p) = f_j^{12}(s_1, p) \\ d(s_1, 0, p) = d^{12}(s_1) \\ kr_3(s_1, 0, p) = 0 \Rightarrow f_3(s_1, 0, p) = 0 \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} kr_j(i, 0) = kr_j^{12}(i) \\ f_j(i, 0, p) = f_j^{12}(i, p) \\ d(i, 0, p) = d^{12}(i) \\ kr_3(i, 0, p) = 0 \Rightarrow f_3(i, 0, p) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{A.1})$$

On obtient de la même façon les prolongements (3 – 2) suivant :

$$j = 3, 2, \forall s_3 \in [0, 1], \forall j \in [0, \dots, NS]$$

$$\left\{ \begin{array}{l} kr_j(0, s_3) = kr_j^{32}(s_3) \\ f_j(0, s_3, p) = f_j^{32}(s_3, p) \\ d(0, s_3, p) = d^{32}(s_3) \\ kr_1(0, s_3, p) = 0 \Rightarrow f_3(0, s_3, p) = 0 \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} kr_j(0, j) = kr_j^{32}(j) \\ f_j(0, j, p) = f_j^{32}(j, p) \\ d(0, j, p) = d^{32}(j) \\ kr_1(0, j, p) = 0 \Rightarrow f_3(0, j, p) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{A.2})$$

Une fois les frontières assignées, la deuxième étape consiste à diminuer le degré de liberté du système en fixant une des trois flux fractionnaire sur l'ensemble du diagramme.

A.2 Etape 2 - Choix du flux fractionnaire en huile f_2

L'intérêt de cette étape est de construire librement f_2 . Les flux fractionnaires $f_1(s_1, s_3)$ et $f_3(s_1, s_3)$ seront déterminés ultérieurement en respectant la relation de fermeture $(1 - f_2) = f_1 + f_3$. La flux fractionnaire $f_2(s_1, s_3, p)$ est choisit afin de satisfaire les conditions citées précédemment, à savoir :

$$\begin{cases} \forall (s_1, s_3, p) \longmapsto f_2(s_1, s_3, p) \\ \text{tq } (s_1 + s_3 \leq 1), f_2(s_1, 0, p) \text{ et } f_2(0, s_3, p) \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

Le principe est d'interpoler sur (T) la flux fractionnaire $f_2(s_1, s_3, p)$ entre les valeurs connues $f_2(s_1, 0, p) = f_2^{12}(s_1)$ et $f_2(0, s_3, p) = f_2^{32}(s_3)$. Deux méthodes permettant de construire f_2 sont abordées ici. La première impose de connaitre la perméabilité relative de l'huile kr_2 .

- La détermination de kr_2 est obtenue, par exemple, à partir des modèles normalisés de [?] (notons qu'il existe également le modèle de Parker [Parker 1990]). Une saturation résiduelle en huile s_{m2} est construite suivant une relation linéaire [Fayers 1962; Le Thiez 1999]. La perméabilité relative de l'huile est ainsi donnée par l'équation suivante :

$$kr_2(s_1, s_3) = \frac{s_2^* \cdot kr_2^{12}(s_1^*) \cdot kr_2^{32}(s_3^*)}{kr_{2,max}^{12} \cdot (1 - s_1^*) \cdot (1 - s_3^*)} \quad (\text{A.4})$$

avec les saturations réduites suivantes :

$$\begin{cases} s_2^* = \frac{s_2 - s_{m2}}{1 - s_{r1} - s_{m2}} \\ s_1^* = \frac{s_1 - s_{r1}}{1 - s_{r1} - s_{m2}} \\ s_3^* = \frac{s_3}{1 - s_{r1} - s_{m2}} \\ s_{m2} = \tau \cdot s_{r2}^{12} + (1 - \tau) \cdot s_{r2}^{32} \text{ avec } \tau = 1 - \frac{s_3}{1 - s_{r1} - s_{r2}^{32}} \end{cases}$$

Les saturations s_{r1} , s_{r2}^{32} , s_{r2}^{12} étant respectivement la saturation irréductible en eau, la saturation résiduelle en huile dans le système diphasique (3 - 2) et la saturation résiduelle en huile dans le système diphasique (1 - 2). En simplifiant le modèle précédent [Chavent and Salzano 1985], il vient :

$$\begin{cases} \tilde{kr}_1(s_1, s_3) = kr_1^{12}(s_1) \\ \tilde{kr}_2(s_1, s_3) = \frac{(1 - s_1 - s_3)}{(1 - s_1) \cdot (1 - s_3)} kr_2^{12}(s_1) \cdot kr_2^{32}(s_3) \quad \forall (s_1, s_3) \in [0, 1]^2, s_1 + s_3 \leq 1 \\ \tilde{kr}_3(s_1, s_3) = kr_3^{32}(s_3) \end{cases}$$

Les saturations sont ici effectives (ou réduites). La mobilité globale \tilde{d} et les flux fractionnaires $\tilde{f}_{1,2,3}$ s'obtiennent naturellement. La flux fractionnaire désirée est obtenue en

posant $\tilde{f}_2(s_1, s_3, p) = f_2(s_1, s_3, p)$. Une autre méthode de détermination de kr_2 , voisine de la précédente est connue sous le nom de méthode « géométrique » [Le Thiez 1999].

En tenant compte des remarques précédentes (2.15), la détermination de la flux fractionnaire f_2 sur \mathcal{T} peut s'écrire :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{kr}_1(i, j) = kr_1(i, 0) \\ \tilde{kr}_2(i, j) = \left[\frac{(NS - i - j)NS}{(NS - i) \cdot (NS - j)} kr_2(i, 0) \cdot kr_2(0, j) \right] \quad \forall i, j \in \llbracket 1, NS - 1 \rrbracket \times \llbracket 0, NS - i \rrbracket \\ \tilde{kr}_3(i, j) = kr_3(0, j) \\ \tilde{d}(i, j) = \sum_{j=1,2,3} \tilde{kr}_j(i, j) d_j \\ \tilde{f}_2(i, j, p) = \tilde{kr}_2(i, j) d_2 \left(\tilde{d}(i, j) \right)^{-1} = f_2(i, j, p) \end{array} \right. \quad (\text{A.5})$$

- Une deuxième méthode consiste à interpoler entre $f_2(s_1, 0, p)$ et $f_2(0, s_3, p)$ suivant les droites d'équation $(s_1 + s_3) = cte$ (droites parallèles au système diphasique gaz/eau) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall (s_1, s_3) \in [0, 1]^2, s_1 + s_3 \leq 1 \\ \forall t, 0 \leq t \leq (s_1 + s_3) \\ f_2(t, s_1 + s_3 - t) = f_2(s_1 + s_3, 0) + \frac{s_1 + s_3 - t}{s_1 + s_3} [f_2(0, s_1 + s_3) - f_2(s_1 + s_3, 0)] \end{array} \right. \quad (\text{A.6})$$

Une fois le flux fractionnaire f_2 fixé, l'étape suivante consiste à déterminer les flux fractionnaires en eau f_1 et en gaz f_3 .

A.3 Etape 3 - Détermination de la fonction ϕ et des flux fractionnaires f_1, f_3 satisfaisant la condition de différentielle totale.

Dans cette étape, l'expression de la différentielle totale permet d'exprimer une fonction intermédiaire $\phi, \forall (s_1, s_3, p) \in [0, 1] \times \mathbb{R}$ qui génère, dans un deuxième temps les flux fractionnaires désirées sur (\mathcal{T}) . Un certain nombre d'hypothèses courantes (tensions interfaciales) sur les pressions capillaires diphasiques permettent de simplifier la condition de différentielle totale et d'exprimer ϕ (2.10), soit :

$$\begin{aligned} P_c^{12}(s_1, s_3) &= P_c^{12}(s_1) = -\frac{\sigma_{13}}{\sigma_{12}} P_c^{13}(s_1) \\ P_c^{32}(s_1, s_3) &= P_c^{32}(s_3) = \frac{\sigma_{13}}{\sigma_{32}} P_c^{13}(s_1) \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

La condition de DT peut donc s'écrire :

$$\frac{\partial f_1}{\partial S_3} \left(\frac{\partial P_c^{32}}{\partial S_3} \right)^{-1} = \frac{\partial f_3}{\partial S_1} \left(\frac{\partial P_c^{12}}{\partial S_1} \right)^{-1} = \phi(S_1, S_3, p) \implies \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f_1}{\partial S_3} = \frac{\partial P_c^{32}}{\partial S_3} \phi(S_1, S_3, p) \\ \frac{\partial f_3}{\partial S_1} = \frac{\partial P_c^{12}}{\partial S_1} \phi(S_1, S_3, p) \end{array} \right. \quad (\text{A.8})$$

A partir des expressions précédentes et celles dégagées lors de l'étape d'initialisation (A.1), (A.2), (A.8), les valeurs de ϕ sont déterminées aux bords :

$$\begin{cases} \phi(i, 0, p) = 0 & \forall i \in \llbracket 0, NS \rrbracket \\ \phi(0, j, p) = 0 & \forall j \in \llbracket 0, NS \rrbracket \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

Les expressions différentielles de ϕ (A.8) conduisent aux formes intégrales suivantes :

$$\begin{cases} f_1(s_1, s_3, p) = f_1(s_1, 0, p) + \int_0^{s_3} \frac{\partial P_c^{32}}{\partial s_3}(\sigma) \phi(s_1, \sigma, p) d\sigma \\ f_3(s_1, s_3, p) = f_3(0, s_3, p) + \int_0^{s_1} \frac{\partial P_c^{12}}{\partial s_1}(\sigma) \phi(\sigma, s_3, p) d\sigma \\ f_3(s_1, s_3, p) + f_1(s_1, s_3, p) = 1 - f_2(s_1, s_3, p) \end{cases} \quad (\text{A.10})$$

Ce système peut être ré-écrit de façon récursive sur le maillage (\mathcal{T}) de la manière suivante :

$$\begin{cases} f_1(i, j, p) = f_1(i, j-1, p) + \frac{1}{2}(\phi(i, j, p) + \phi(i, j-1, p)) [P_c^{32}(j) - P_c^{32}(j-1)] \\ f_3(i, j, p) = f_3(i-1, j, p) + \frac{1}{2}(\phi(i, j, p) + \phi(i-1, j, p)) [P_c^{12}(i) - P_c^{12}(i-1)] \\ f_3(i, j, p) + f_1(i, j, p) = 1 - f_2(i, j, p) \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

Un système linéaire en $\phi(i, j)$ est obtenu en injectant les deux expressions des flux fractionnaires f_1 et f_3 dans la relation de fermeture du système ci-dessus (A.11). Les deux conditions aux bords sur ϕ (A.9) permettent de décrire entièrement $\phi \forall (i, j) \in \llbracket 0, NS \rrbracket \times \llbracket 0, NS - i \rrbracket$, soit :

$$\begin{cases} \phi(i, j, p) \left[\frac{P_c^{12}(i) + P_c^{32}(j) - P_c^{12}(i-1) - P_c^{32}(j-1)}{2} \right] \\ + \phi(i, j-1, p) \left[\frac{P_c^{32}(j) - P_c^{32}(j-1)}{2} \right] \\ + \phi(i-1, j, p) \left[\frac{P_c^{12}(i) - P_c^{12}(i-1)}{2} \right] = 1 - f_2(i, j, p) - f_1(i, j-1, p) - f_3(i-1, j, p) \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

La résolution de ce système est assurée grâce à la connaissance des fonctions suivantes :

- $f_2(i, j)$ obtenue lors de l'étape 2.
- $f_1(i, j-1)$ et $\phi(i, j-1, p)$ obtenues récursivement à partir des conditions aux bords $f_3(0, j, p)$ et $\phi(i, 0, p)$ (A.1), (A.9).
- $f_3(i-1, j)$ et $\phi(i-1, j, p)$ obtenues récursivement à partir des conditions aux bords $f_1(i, 0, p)$ et $\phi(0, j, p)$ (A.2), (A.9).

La fonction $\phi(i, j, p)$ étant déterminée sur tout le diagramme ternaire, les flux fractionnaires $f_1(i, j, p)$, $f_3(i, j, p)$ s'obtiennent à partir des expressions discrètes (A.11).

L'étape suivante consiste à « fermer » le diagramme ternaire c.a.d déterminer entièrement les frontières du domaine triphasique. En respectant un certain nombre de propriétés sur les fonctions kr_1 et kr_3 , nous cherchons les valeurs de mobilité globale du système eau/gaz sur la frontière $s_1 + s_3 = 1$.

A.4 Etape 4 - Détermination du système gaz/eau par optimisation

Le système diphasique eau/gaz permet de s'affranchir de la saturation en gaz. La variable s_1 est choisi comme variable indépendante ($s_1 = 1 - s_3$). Les variables (s_1, p) permettent de décrire une fonction f tel que $(S(i), p) \mapsto f(i, NS - i, p)$. Il est donc possible d'écrire $\forall i \in \llbracket 0, NS \rrbracket$ que :

$$\left\{ \begin{array}{l} s_2 = 0 \implies f_2 = 0 \iff f_3^{13}(i, p) = 1 - f_1^{13}(i, p) \\ d^{13}(i, p) = d(i, NS - i, p) \\ f_j^{13}(i, p) = f_j(i, NS - i, p), j = 1, 3 \text{ (connue lors de l'étape 3)} \\ kr_j^{13}(i, p) = \frac{f_j^{13}(i, p)}{d_j(P)} d^{13}(i, p) = \frac{f_j(i, NS - i, p)}{d_j(P)} d(i, NS - i, p) \end{array} \right. \quad (\text{A.13})$$

Nous introduisons le changement de variable suivant [Chavent and Salzano 1985] :

$$\forall i \in \llbracket 0, NS \rrbracket, d^{13}(i, p) = \exp(\delta(i, p)) \quad (\text{A.14})$$

La résolution de l'étape 4 se traduit donc par le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Déterminer } \delta(i, p) \in \mathbb{R}^{NS-1} \forall i \in \llbracket 1, NS - 1 \rrbracket \text{ tel que} \\ \delta(0, p) = \ln(d^{13}(0, p)) = \ln(d(0, NS, p)) \\ \delta(NS, p) = \ln(d^{13}(NS, p)) = \ln(d(NS, 0, p)) \end{array} \right. \quad (\text{A.15})$$

dont les fonctions $d^{13}(0, p)$ et $d^{13}(NS, p)$ ont été déterminées lors de l'étape d'initialisation (A.1), (A.2). Par la suite, la variable pression (P) pourra être omise dans l'expression de certaines fonctions dans la mesure où elle n'influence pas les développements qui suivent. La détermination de la mobilité globale eau/gaz d^{13} permet d'avoir, en respectant certaines propriétés [Chavent and Salzano 1985], les perméabilités relatives eau/gaz kr_1^{13} , kr_3^{13} (A.13). En notant que $kr_{1,3}^{13}(s_1) = kr_1(s_1, 1 - s_1)$, ces propriétés sont :

- (i) les fonctions kr_1 , kr_3 sont régulières.
- (ii) $s_1 \mapsto kr_1(s_1, 1 - s_1)$ est croissante.
- (iii) $s_1 \mapsto kr_3(s_1, 1 - s_1)$ est décroissante.
- (iv) $kr_1(s_1, 1 - s_1)$ est bornée tq. $|kr_1| \leq kr_{1,max}$.
- (v) $kr_3(s_1, 1 - s_1)$ est bornée tq. $|kr_3| \leq kr_{3,max}$.

Propriété (i) $\iff \Delta kr_{1,3}^{13} \sim 0$ L'expression de la régularité sur kr_1, kr_3 crée une condition sur δ car :

$$kr_j(i, NS - i, p) = kr_j^{13}(i, p) = \frac{f_j^{13}(i, p)}{d_j(P)} \exp(\delta(i, p)) \quad (\text{A.16})$$

L'utilisation d'un critère quadratique (laplacien) dans cette propriété de régularité permet de « mesurer » les variations de la pente en un point (i) et dans son entourage immédiat. Ainsi, lorsque la dérivée partielle seconde est nulle suivant une direction (s_1) , la pente est donc constante dans l'entourage immédiat de (i) et la fonction $kr_j^{13}(i)$, au point étudié, est la moyenne de son entourage. Cette propriété vérifiée garantie aux perméabilités relatives eau/gaz (associée aux conditions de bords) d'évoluer strictement dans l'intervalle $[0, 1]$.

Le laplacien est approché par différences finis. Nous obtenons un développement de la dérivée seconde au point $S(i)$ soit :

$$\frac{\partial^2 kr_j^{13}}{\partial s_1^2}(i) = \frac{[kr_j^{13}(i-1) - 2kr_j^{13}(i) + kr_j^{13}(i+1)]}{(\Delta S)^2} + O((\Delta S)^2) \quad j = 1, 3 \quad i \in [1, NS - 1] \quad (\text{A.17})$$

L'équation précédente forme un système linéaire de $NS - 1$ équation à $NS + 1$ inconnues. Pour fermer le système, nous utilisons les conditions aux limites $S(i = 0), S(i = NS)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall (i, j) \in [1, NS - 1]^2 \\ kr_j^{13}(0), \quad kr_j^{13}(NS) \\ -\overrightarrow{\Delta} kr_j^{13} = \overline{\overline{B}}^{13} \overrightarrow{kr_j^{13}} \end{array} \right. \quad \text{avec} \quad \overline{\overline{B}}^{13} = b(i, j)^{13} = \left\{ \begin{array}{l} 0 \quad \text{si } i \neq (j, j-1, j+1) \\ -\frac{1}{(\Delta S)^2} \quad \text{si } i = (j-1, j+1) \\ \frac{2}{(\Delta S)^2} \quad \text{si } (i = j) \end{array} \right. \quad (\text{A.18})$$

La fonction objectif $J^{13}(\delta(i))$ que nous allons chercher à minimiser est l'expression de la somme des normes euclidienne (carré) des laplaciens des deux perméabilités relatives eau/gaz, soit :

$$J^{13}(\delta(i)) = \sum_{1,3} \|\Delta kr_j^{13}(\delta(i))\|^2 \quad (\text{A.19})$$

$$J^{13}(\overrightarrow{\delta}) = \sum_{1,3} (\overrightarrow{kr_j^{13}})^t (\overline{\overline{B}}^{13})^t \overline{\overline{B}}^{13} \overrightarrow{kr_j^{13}}$$

Ainsi, vérifier la condition de régularité sur les perméabilités relatives eau/gaz équivaut à trouver les valeurs de $\overrightarrow{\delta} \in \mathbb{R}^{NS-1}$ qui minimisent la fonctionnelle J^{13} .

Propriété (ii) et (iii) $\iff \frac{dkr_1^{13}}{ds_1} \geq 0$ et $\frac{dkr_3^{13}}{ds_1} \leq 0$ En exprimant les dérivées droites des perméabilités relatives à partir de leur expressions précédentes (A.13), il vient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dkr_1^{13}}{ds_1} = \frac{d}{ds_1} \left[\frac{f_1^{13}(s_1, p)}{d_1(P)} d^{13}(s_1, p) \right] = \frac{1}{d_1} \left[\frac{df_1^{13}}{ds_1} d^{13} + \frac{dd^{13}}{ds_1} f_1^{13} \right] \\ \frac{dkr_3^{13}}{ds_1} = \frac{d}{ds_1} \left[\frac{f_3^{13}(s_1, p)}{d_3(P)} d^{13}(s_1, p) \right] = \frac{1}{d_3} \left[\frac{df_3^{13}}{ds_1} d^{13} + \frac{dd^{13}}{ds_1} f_3^{13} \right] \end{array} \right. \quad (\text{A.20})$$

Or $d_{1,3} \geq 0$, ainsi en factorisant par $(f_j d)^{13}$ (≥ 0) et en exprimant les flux fractionnaires en fonction de f_1 (A.13), les propriétés (ii) et (iii) sont équivalentes à :

$$\begin{cases} \frac{1}{f_1^{13}} \frac{df_1^{13}}{ds_1} + \frac{1}{d^{13}} \frac{dd^{13}}{ds_1} \geq 0 \\ \frac{1}{f_3^{13}} \frac{df_3^{13}}{ds_1} + \frac{1}{d^{13}} \frac{dd^{13}}{ds_1} \leq 0 \iff -\frac{1}{1-f_1^{13}} \frac{df_1^{13}}{ds_1} + \frac{1}{d^{13}} \frac{dd^{13}}{ds_1} \leq 0 \end{cases} \quad (\text{A.21})$$

En remarquant que $d(d^{13})/d^{13} = d(\ln(d^{13}))$ et $\ln(d^{13}(i, p)) = \delta(i, p)$ (A.14), le système précédent est discrétisé suivant un schéma centré. Il vient :

$$\begin{cases} \frac{2f_1^{13}(i+1) - 2f_1^{13}(i)}{f_1^{13}(i) + f_1^{13}(i+1)} + \delta(i+1) - \delta(i) \geq 0 \quad \forall i \in \llbracket 0, NS \rrbracket \\ \frac{2f_1^{13}(i) - 2f_1^{13}(i+1)}{2 - f_1^{13}(i) - f_1^{13}(i+1)} + \delta(i+1) - \delta(i) \leq 0 \quad \forall i \in \llbracket 0, NS \rrbracket \end{cases} \quad (\text{A.22})$$

Ainsi $\vec{\delta}$ doit vérifier les deux conditions suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall (i, j) \in \llbracket 0, NS \rrbracket^2 \\ \vec{U}^{13} \vec{\delta} \geq \vec{Q}^{13} \\ \vec{T}^{13} \vec{\delta} \geq \vec{R}^{13} \\ \text{tel que} \\ q(i)^{13} = \frac{2f_1^{13}(i) - 2f_1^{13}(i+1)}{f_1^{13}(i) + f_1^{13}(i+1)} \\ r(i)^{13} = \frac{2f_1^{13}(i) - 2f_1^{13}(i+1)}{2 - f_1^{13}(i) - f_1^{13}(i+1)} \end{array} \right. \quad \text{et} \quad \begin{cases} u(i, j)^{13} = \begin{cases} -1 & \text{si } i = j \\ 1 & \text{si } i = j + 1 \end{cases} \\ t(i, j)^{13} = \begin{cases} -1 & \text{si } i = j + 1 \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases} \end{cases} \quad (\text{A.23})$$

Propriété (iv) et (v) $\iff |\delta(i, p)| \leq \ln(d^{13}(i, p))$ L'expression de la mobilité totale eau/gaz (A.13) génère deux conditions d'inégalitaires, soit :

$$(iv), (v) \iff \begin{cases} |\delta(i, p)| \leq \ln \left[\frac{d_1(P)}{f_1^{13}(i, p)} kr_{1, \max}^{13} \right] \\ |\delta(i, p)| \leq \ln \left[\frac{d_3(P)}{f_3^{13}(i, p)} kr_{3, \max}^{13} \right] \end{cases} \implies |\delta(i, p)| \leq \min_{1,3} \left(\ln \left[\frac{d_j}{f_j^{13}(i, p)} kr_{j, \max}^{13} \right] \right) \quad (\text{A.24})$$

Résolution de l'étape 4 Nous pouvons donc résoudre la mobilité sur la frontière eau/gaz en cherchant $\vec{\delta}$ tel que ce vecteur minimise la fonctionnelle $J^{13}(\vec{\delta})$ (A.19) suivant les contraintes

(i) – (v), soit :

$$\begin{array}{l}
 \text{Déterminer } \vec{\delta} \text{ tq.} \\
 \left\{ \begin{array}{l} \min_{\vec{\delta}} (J^{13}) \leq \varepsilon \\ J^{13}(\vec{\delta}) = \sum_{1,3} \|\Delta kr_j^{13}(\vec{\delta})\|^2 \end{array} \right. \quad \text{sous} \quad \left\{ \begin{array}{l} \delta(0, p) = \ln(d^{13}(0, p)) \\ \delta(NS, p) = \ln(d^{13}(NS, p)) \\ \vec{U}^{13} \vec{\delta} \geq \vec{Q}^{13} \\ \vec{T}^{13} \vec{\delta} \geq \vec{R}^{13} \\ \vec{\delta} \leq \min_{1,3} \left(\ln \left[\frac{d_j}{f_j^{13}} kr_{j,max}^{13} \right] \right) \end{array} \right. \quad (\text{A.25})
 \end{array}$$

Les valeurs de ε (test de convergence) et $kr_{j,max}$ sont assignées au début de l'algorithme. La résolution de ce système est ré-arrangée tel que les contraintes dégagées dans les propriétés (ii) et (iii) (A.23) soient regroupées dans un seul système d'inégalités linéaires.

Le système équivalent s'obtient en introduisant la matrice $a(k, i)^{13} \in \mathbb{R}^{2NS \times NS}$ tel que pour $k = NS, NS + 1$:

$$\begin{aligned}
 \vec{a}(NS, i)^t &= \vec{u}(NS, i)^t \\
 \vec{a}(NS + 1, i)^t &= \vec{t}(0, i)^t
 \end{aligned}$$

ainsi qu'un vecteur $m(k) \in \mathbb{R}^{2NS}$. Le système complet comporte donc $2NS$ contraintes tel que :

$$\begin{aligned}
 a(k, i)^{13} \delta(i) \geq m(k)^{13} &\Leftrightarrow \begin{pmatrix} q(0) \\ q(1) \\ \vdots \\ q(NS) \\ r(0) \\ r(1) \\ \vdots \\ r(NS) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta(0) \\ \delta(1) \\ \vdots \\ \delta(NS) \end{pmatrix} \leq 0 \\
 &\Leftrightarrow m^{13}(k) - \sum_{i=0}^{NS} a(k, i)^{13} \delta(i) \leq 0
 \end{aligned}$$

Résoudre le problème précédent est équivalent à rechercher un majorant dans les (k) inégalités et à le comparer à une valeur négative et proche de zéro que nous noterons η . Si la comparaison renvoie η comme plus grand terme alors le système d'inégalités linéaires (A.23) est vérifié quelque soit (k) , c'est à dire :

$$\max_{k \in [1, 2NS]} \left(\eta, m^{13}(k) - \sum_{i=0}^{NS} a(k, i)^{13} \delta(i) \right) = \eta \quad (\text{A.26})$$

Dans le cas contraire, il existe une valeur de (k) tel que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \exists k \mid k_{max} \in \llbracket 1, 2NS \rrbracket \\ m^{13}(k_{max}) - \sum_{i=0}^{NS} a(k_{max}, i)^{13} \delta(i) \geq \eta \end{array} \right. \quad (\text{A.27})$$

Une fonctionnelle de pénalisation J_ϵ^{13} est donc définie ainsi que $\epsilon, \epsilon_q > 0, \varepsilon$ (critère d'arrêt) afin de résoudre le problème de minimisation sans contraintes et tel que le vecteur initial estimé $(\vec{\delta}_0)$ respecte les conditions (iv), (v) ainsi que les contraintes de bords (A.25). Le système qui résout l'étape 4 est donc :

Déterminer $\vec{\delta}$ tq.

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{\vec{\delta}} \left(J_\epsilon^{13}(\vec{\delta}) \right) \leq \varepsilon \\ J_\epsilon^{13}(\vec{\delta}) = \epsilon_q J^{13}(\vec{\delta}) \\ + \frac{1}{\epsilon} \left[\max_{k \in \llbracket 1, 2NS \rrbracket} \left(\eta, m^{13}(k) - \sum_{i=0}^{NS} a(k, i)^{13} \delta(i) \right) \right] \\ J^{13}(\vec{\delta}) = \sum_{1,3} \|\Delta kr_j^{13}(\vec{\delta})\|^2 \end{array} \right. \quad \text{s.c.} \left\{ \begin{array}{l} \forall i \quad \delta(i) \in [\delta(0), \delta(NS)] \\ \vec{\delta} \leq \min_{1,3} \left(\ln \left[\frac{d_j}{f_j^{13}} kr_{j,max}^{13} \right] \right) \end{array} \right. \quad (\text{A.28})$$

Détermination du gradient de J_ϵ^{13} La résolution de ce système (méthode de gradient, de simplexe avec contraintes) nécessite la connaissance du gradient de la fonctionnelle de pénalisation (∇J_ϵ^{13}) suivant le vecteur $\vec{\delta}$. Elle est définie en tenant compte de la définition initiale de la perméabilité relative (A.16) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial J_\epsilon^{13}}{\partial \delta(i)} = 0 \quad i = 0, NS \\ \frac{\partial J_\epsilon^{13}}{\partial \delta(i)} = \epsilon_q \frac{\partial J^{13}}{\partial \delta(i)} + \frac{1}{\epsilon} \begin{cases} 0 & \text{si } \eta \text{ (A.26)} \\ -a(k_{max}, i)^{13} & \text{si } \exists k_{max} \text{ (A.27)} \end{cases} \quad \forall i \in \llbracket 1, NS - 1 \rrbracket \\ \text{avec } \frac{\partial J^{13}}{\partial \delta(i)} = \sum_{j=1,3} kr_j^{13}(\delta(i)) \left[(\overline{B}^{13})^t \overline{B}^{13} \overrightarrow{kr_j^{13}} \right] (\delta(i)) \end{array} \right. \quad (\text{A.29})$$

A.5 Etape 5 - Détermination de la mobilité totale d

Cette étape présente la méthode originale [Chavent and Jaffré 1986] i.e. estimation de la mobilité globale d . En résumant les données connues aux termes des étapes précédentes, il

vient :

Déterminer $d(i, j) \forall (i, j) \in \llbracket 1, NS - 1 \rrbracket \times \llbracket 1, NS - i - 1 \rrbracket$ tq.

$$\left\{ \begin{array}{ll} j = 1, 2, 3 \\ f_j(i, j, p) & \forall (i, j) \in \llbracket 0, NS \rrbracket \times \llbracket 0, NS - i \rrbracket \quad \text{domaine (1 - 2 - 3)} \\ kr_j(i, 0, p) & \forall i \in \llbracket 0, NS \rrbracket \quad \text{frontière (1 - 2)} \\ d(i, 0, p) & \\ \\ kr_j(0, j, p) & \forall j \in \llbracket 0, NS \rrbracket \quad \text{frontière (3 - 2)} \\ d(0, j, p) & \\ \\ kr_j(i, NS - i, p) & \forall i \in \llbracket 1, NS - 1 \rrbracket \quad \text{frontière (1 - 3)} \\ d(i, NS - i, p) & \end{array} \right. \quad (\text{A.30})$$

Comme à l'étape 4, des propriétés sont à vérifier sur les perméabilités $kr_j(i, j)$, $\forall (i, j) \in \llbracket 0, NS \rrbracket \times \llbracket 0, NS - i \rrbracket$ soit :

(i) les fonctions $kr_j(i, j)$ sont régulières.

(ii) les fonctions $kr_j(i, j)$ sont monotones.

(iii) les fonctions $kr_j(i, j)$ sont bornées.

Afin de simplifier les notations des indices (i, j) , un entier (m) est introduit tel que [Chavent and Jaffré 1986] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall (i, j) \in \llbracket 0, NS \rrbracket \times \llbracket 0, NS - i \rrbracket \\ 1 \leq m \leq N^* = \frac{(NS+1)(NS+2)}{2} \\ (i, j) \mapsto m \quad \text{tq.} \quad m = \frac{j(2NS + 3 - j)}{2} + i + 1 \\ (s_1(i), s_3(j)) \mapsto P(m) \quad \text{sur } \mathcal{T} \end{array} \right. \quad (\text{A.31})$$

Considérations géométriques Avec ce nouveau changement de notation, les points $P(m)$ du maillage (cf. Fig. 2.1) peuvent occuper plusieurs secteur du diagramme : les sommets, les frontières et l'intérieur strict du domaine. Ainsi un point intérieur $P(m)$ compte six voisins, un point situé sur une frontière comporte quatre voisins excepté le sommet qui n'en compte que deux. Il est donc possible de faire correspondre chaque couple (i, j) , un point (m) sur le diagramme. Ainsi, on a :

Domaine strict (1 - 2 - 3) $\Leftrightarrow P(i, j) \forall (i, j) \llbracket 1, NS - 2 \rrbracket \times \llbracket 1, NS - j - 1 \rrbracket$	Frontière (1 - 2) $\Leftrightarrow P(i, j) \quad j = 0, \forall (i) \llbracket 1, NS - 1 \rrbracket$
$M_1 : P(i - 1, j - 1) \rightarrow P(m - 1)$ $M_2 : P(i - 1, j) \rightarrow P(m + NS - j)$ $M_3 : P(i, j + 1) \rightarrow P(m + NS + 1 - j)$ $M_4 : P(i + 1, j) \rightarrow P(m + 1)$ $M_5 : P(i + 1, j - 1) \rightarrow P(m - NS - 1 + j)$ $M_6 : P(i, j - 1) \rightarrow P(m - NS - 2 + j)$	$M_1 : P(i - 1, j - 1) \rightarrow P(m - 1)$ $M_2 : P(i - 1, j) \rightarrow P(m + NS - j)$ $M_3 : P(i, j + 1) \rightarrow P(m + NS + 1 - j)$ $M_4 : P(i + 1, j) \rightarrow P(m + 1)$

de même, pour les frontières diphasiques (3 – 2) et (1 – 3) :

Frontière (3 – 2) $\Leftrightarrow P(i, j) \ i = 0, \forall(j) \llbracket 1, NS - 1 \rrbracket$		Frontière (1 – 3) $\Leftrightarrow P(i, j) \ \forall(i, j) \llbracket 1, NS - 1 \rrbracket, \ j = NS - i$
$M_3 : P(i, j + 1) \longrightarrow P(m + NS + 1 - j)$ $M_4 : P(i + 1, j) \longrightarrow P(m + 1)$ $M_5 : P(i + 1, j - 1) \longrightarrow P(m - NS - 1 + j)$ $M_6 : P(i, j - 1) \longrightarrow P(m - NS - 2 + j)$		$M_2 : P(i - 1, j) \longrightarrow P(m + NS - j)$ $M_1 : P(i - 1, j - 1) \longrightarrow P(m - 1)$ $M_6 : P(i, j - 1) \longrightarrow P(m - NS - 2 + j)$ $M_5 : P(i + 1, j - 1) \longrightarrow P(m - NS - 1 + j)$

enfin les sommets s'expriment :

Sommet (2) $P(0, 0)$	Sommet (3) $P(0, NS)$	Sommet (1) $P(NS, 0)$
$M_3 : P(m + NS + 1 - j)$ $M_4 : P(m + 1)$	$M_5 : P(m - NS - 1 + j)$ $M_6 : P(m - NS - 2 + j)$	$M_1 : P(m - 1)$ $M_2 : P(m + NS - j)$

Propriété (i) $\Leftrightarrow \Delta kr_j(m) \sim 0$ La condition de régularité conduit donc à exprimer le laplacien de la fonction $kr_j(m)$ sur l'ensemble du diagramme. En fonction de la place du point $P(m)$, le laplacien s'exprime suivant différentes formes possibles. Soit dans le domaine triphasique :

$$\Delta kr_j(i, j) = \Delta kr_j(m)_{|(wog)} = \left\{ \begin{array}{l} P(m) \text{ est intérieur} \\ \frac{6}{(\Delta S)^2} kr_j(i, j) - \frac{1}{(\Delta S)^2} [kr_j(i - 1, j) + kr_j(i - 1, j + 1) + \\ \quad kr_j(i, j + 1) + kr_j(i + 1, j) + \\ \quad kr_j(i + 1, j - 1) + kr_j(i, j - 1)] \\ \text{soit} \\ \frac{6}{(\Delta S)^2} kr_j(m) - \frac{1}{(\Delta S)^2} [kr_j(m - 1) + kr_j(m + NS - j) + \\ \quad kr_j(m + NS + 1 - j) + kr_j(m + 1) + \\ \quad kr_j(m - NS - 1 + j) + kr_j(m - NS - 2 + j)] \end{array} \right. \quad (\text{A.32})$$

l vient en système diphasique :

$$\Delta kr_j(m) = \frac{4}{(\Delta S)^2} kr_j(m) - \frac{1}{(\Delta S)^2} \left\{ \begin{array}{l} \text{Arête d'équation } s_3 = 0 \implies P(m) \in (1 - 2) \\ \quad [kr_j(m - 1) + kr_j(m + NS - j) + \\ \quad \quad kr_j(m + NS + 1 - j) + kr_j(m + 1)] \\ \text{Arête d'équation } s_1 = 0 \implies P(m) \in (3 - 2) \\ \quad [kr_j(m + NS + 1 - j) + kr_j(m + 1) + \\ \quad \quad kr_j(m - NS - 1 + j) + kr_j(m - NS - 2 + j)] \\ \text{Arête d'équation } s_3 + s_1 = 1 \implies P(m) \in (w - g) \\ \quad [kr_j(m - 1) + kr_j(m + NS - j) + \\ \quad \quad kr_j(m - NS - 1 + j) + kr_j(m - NS - 2 + j)] \end{array} \right. \quad (\text{A.33})$$

Enfin, les trois systèmes monophasiques donnent :

$$\Delta kr_j(m) = \frac{2}{(\Delta S)^2} kr_j(m) - \frac{1}{(\Delta S)^2} \left\{ \begin{array}{l} \text{Sommet d'équation } s_3 = 1 \implies P(m) = P(0, NS) \\ \quad [kr_j(m - NS - 1 + j) + kr_j(m - NS - 2 + j)] \\ \text{Sommet d'équation } s_1 = 1 \implies P(m) = P(NS, 0) \\ \quad [kr_j(m - 1) + kr_j(m + NS - j)] \\ \text{Sommet d'équation } s_2 = 1 \implies P(m) = P(0, 0) \\ \quad [kr_j(m + NS + 1 - j) + kr_j(m + 1)] \end{array} \right. \quad (\text{A.34})$$

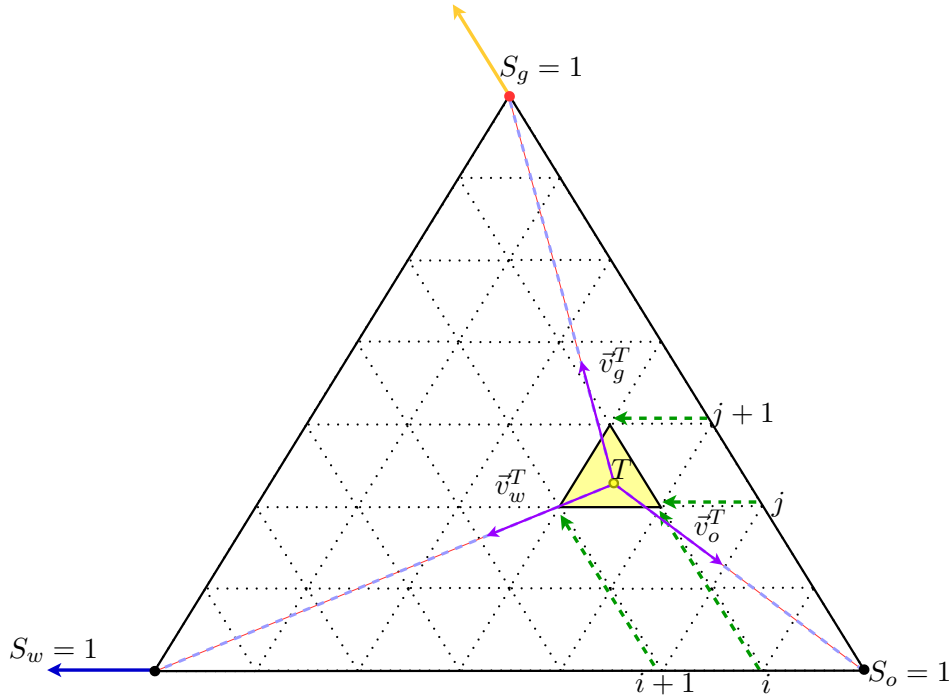


FIG. A.1 – Dérivées directionnelles appliquées au barycentre du triangle T avec le sommet en eau (w), en gaz (g) et en huile (o)

Il est possible de ré-écrire le système précédent sous forme matricielle

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall(m, k) \in \llbracket 1, N^* \rrbracket \\ kr_j(0), kr_j(NS) \\ \overrightarrow{\Delta kr_j} = \overline{\overline{B}} \overrightarrow{kr_j} \end{array} \right. \text{ avec } \overline{\overline{B}} = b(m, k) = \left\{ \begin{array}{l} \frac{6}{(\Delta S)^2} \text{ si } m = k \text{ (A.32)} \\ \frac{4}{(\Delta S)^2} \text{ si } m = k \text{ (A.33)} \\ \frac{2}{(\Delta S)^2} \text{ si } m = k \text{ (A.34)} \\ -\frac{1}{(\Delta S)^2} \text{ si } m \neq k \\ \text{(A.32), (A.33), (A.34)} \\ 0 \text{ sinon} \end{array} \right. \quad (\text{A.35})$$

Propriété (ii) $\iff kr_j$ **croissantes sur** (T) La monotonie des fonctions kr_j sur la triangulation (\mathcal{T}) nécessite une condition de croissance sur chaque triangle $T \in (\mathcal{T})$. [Chavent and Salzano 1985] proposent d'utiliser des dérivées directionnelles $(D_{\vec{v}_j})$ appliquées aux barycentres (\dagger) dans chaque triangle (T) .

Le barycentre du triangle (T) sera noté $M^{\dagger, T} = (s_1^{\dagger, T}, s_3^{\dagger, T})^T$. Les sommets du triangle notés $M_j^T = (s_{1,j}^T, s_{3,j}^T)$ avec l'indice (j) qui prend les valeurs $(1, 2, 3)$. Les dérivées étant exprimées sur le barycentre $M^{\dagger, T}$, les coordonnées locales $(s_1^{\dagger, T}, s_3^{\dagger, T})$ sont changées en coordonnées locales

barycentriques $(w_1^{\dagger,T}, w_2^{\dagger,T}, w_3^{\dagger,T})$, soit :

$$\begin{cases} w_1^{\dagger,T} + w_2^{\dagger,T} + w_3^{\dagger,T} = 1 \\ s_{1,1}^T w_1^{\dagger,T} + s_{1,2}^T w_2^{\dagger,T} + s_{1,3}^T w_3^{\dagger,T} = s_1^{\dagger,T} \\ s_{3,1}^T w_1^{\dagger,T} + s_{3,2}^T w_2^{\dagger,T} + s_{3,3}^T w_3^{\dagger,T} = s_3^{\dagger,T} \end{cases} \Leftrightarrow \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ s_{1,1}^T & s_{1,2}^T & s_{1,3}^T \\ s_{3,1}^T & s_{3,2}^T & s_{3,3}^T \end{pmatrix}}_{=P^T} \begin{bmatrix} w_1^{\dagger,T} \\ w_2^{\dagger,T} \\ w_3^{\dagger,T} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ s_1^{\dagger,T} \\ s_3^{\dagger,T} \end{bmatrix}$$

En analyse, la dérivée directionnelle est un outil d'analyse à une variable applicable aux fonctions à plusieurs variables. Il permet de décrire les variations infinitésimales d'une fonction (kr_j) dans une direction particulière (\vec{v}_j) . La direction (\vec{v}_j) (vecteur unitaire) est prise au point (\dagger) , barycentre de (T) et orientée vers le sommet $s_j = 1$ (cf. Fig. A.1).

$$[D_{\vec{v}_j}(kr_j)]^{\dagger} \geq 0 \iff [D_{\vec{v}_j}(\ln[kr_j])]^{\dagger} \geq 0 \quad j = 1, 2, 3 \quad \dagger \in (T) \text{ et } T \in (\mathcal{T}) \quad (\text{A.36})$$

Chaque dérivée directionnelle est pondérée par la flux fractionnaire barycentrée (f_j^{\dagger}) associée (croissante) soit :

$$\begin{aligned} f_j^{\dagger} \left[D_{\vec{v}_j} \left(\ln \left[\frac{df_j}{d_j} \right] \right) \right]^{\dagger} \geq 0 &\iff f_j^{\dagger} [D_{\vec{v}_j}(\ln[d])]^{\dagger} + f_j^{\dagger} [D_{\vec{v}_j}(\ln[f_j])]^{\dagger} - \underbrace{f_j^{\dagger} [D_{\vec{v}_j}(\ln[d_j])]^{\dagger}}_{=0} \geq 0 \\ &\iff f_j^{\dagger} [D_{\vec{v}_j}(\delta)]^{\dagger} + [D_{\vec{v}_j}(f_j)]^{\dagger} \geq 0 \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

Le premier terme $([D_{\vec{v}_j}(\delta)]^{\dagger})$ va être développé dans le nouveau repère local barycentrique. La fonction (δ) prise au point $M^{\dagger,T}$ s'exprime :

$$\delta(M^{\dagger,T}) = \delta(M_1^T)w_1^{\dagger,T} + \delta(M_2^T)w_2^{\dagger,T} + \delta(M_3^T)w_3^{\dagger,T} = [\delta(M_1) \quad \delta(M_2) \quad \delta(M_3)]^T \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{bmatrix}^{\dagger,T}$$

Ainsi, la forme dérivée de (δ) conduit à :

$$\vec{\delta}' = \frac{\partial \delta}{\partial M^{\dagger,T}} = \frac{\partial \delta}{\partial (s_1, s_3)^{\dagger,T}} = [\delta(M_1) \quad \delta(M_2) \quad \delta(M_3)]^T \begin{bmatrix} \frac{\partial w_1}{\partial s_1} & \frac{\partial w_1}{\partial s_3} \\ \frac{\partial w_2}{\partial s_1} & \frac{\partial w_2}{\partial s_3} \\ \frac{\partial w_3}{\partial s_1} & \frac{\partial w_3}{\partial s_3} \end{bmatrix}^{\dagger,T}$$

En associant le vecteur $(\vec{w}'_j)^{\dagger,T} = [(\partial_{s_1} w_j \quad \partial_{s_3} w_j)^t]^{\dagger,T}$ (l'indice (t) est à prendre comme "transposé de"), il vient :

$$\vec{\delta}' = \underbrace{[\delta(M_1) \quad \delta(M_2) \quad \delta(M_3)]^T}_{\vec{\delta}(M_j^T)} \begin{bmatrix} \vec{(w'_1)^t} \\ \vec{(w'_2)^t} \\ \vec{(w'_3)^t} \end{bmatrix}^{\dagger,T}$$

L'expression de la jacobienne est donnée grâce à la matrice de passage (P^T), soit :

$$\vec{\delta}' = \vec{\delta}(M_j^T)(P^T)^{-1} \frac{\partial}{\partial M^{\dagger,T}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ s_1^{\dagger,T} & 0 \\ 0 & s_3^{\dagger,T} \end{pmatrix} = \vec{\delta}(M_j^T)(P^T)^{-1} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Dans l'expression des dérivées directionnelles, seules deux directions suffisent à décrire la croissance des perméabilités relatives à savoir $\vec{v}_j = (v_{1,j} \ v_{3,j})^t$, ainsi :

$$\left[D_{\vec{v}_j} \delta(M^\dagger) \right]^T = \left(\vec{\delta}' \cdot \vec{v}_j \right)^{\dagger,T} \quad (\text{A.38})$$

$$\left[D_{\vec{v}_j} \delta(M^\dagger) \right]^T = \left[\delta(M_1) \ \delta(M_2) \ \delta(M_3) \right]^T \underbrace{(P^T)^{-1} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{1,j}^T \\ v_{3,j}^T \end{pmatrix}}_{\vec{A}_j^T} \quad (\text{A.39})$$

Le système final comporte ($3NT$) inégalités c.a.d les trois inégalités correspondant aux trois perméabilités sur l'ensemble de la triangulation soit (NT) triangles. Le système (A.37) peut être ré-écrit ainsi :

$$\vec{\delta}(M_j^T) \cdot \vec{A}_j^T \geq -\frac{1}{f_j^T} \vec{f}_j(M_j^T) \cdot \vec{A}_j^T \quad \left\{ \begin{array}{l} \vec{A}_j^T = \frac{1}{2\mathcal{A}(T)} \begin{pmatrix} (s_{3,2}^T - s_{3,3}^T)v_{1,j}^T - (s_{1,2}^T - s_{1,3}^T)v_{3,j}^T \\ (s_{1,1}^T - s_{1,3}^T)v_{3,j}^T - (s_{3,1}^T - s_{3,3}^T)v_{1,j}^T \\ (s_{3,1}^T - s_{3,2}^T)v_{1,j}^T - (s_{1,1}^T - s_{1,2}^T)v_{3,j}^T \end{pmatrix} \\ f_j^T = \frac{1}{3} \sum_{j=1,2,3} f_j(M_j^T) \end{array} \right.$$

Ici $\mathcal{A}(T)$ représente l'aire du triangle (T). En écrivant le système précédent sur l'ensemble de la triangulation (\mathcal{T}), la contrainte locale sur le vecteur (δ) aux noeuds (sommets du triangle) (M_1, M_2, M_3) est généralisée sur le maillage complet. Le vecteur contraint (δ) appartient à \mathbb{R}^{N^*} ainsi que a_j^T (construit à partir de $A_j^T \in \mathbb{R}^3$). En remarquant qu'il existe deux types de triangle (cf. Fig. 2.1) de coordonnées respectives (sens horaire) ($m, m+1, m+NS-j+1$) (Type 1) et ($m, m+NS-j+1, m+NS-j$) (Type 2), le système devient pour les triangles

(T_1) et (T_2) :

$$a(k)_j^{T_1, T_2} \delta(k) \geq m_j^{T_1, T_2} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ A_j^{T_1}(1) & A_j^{T_2}(1) \\ A_j^{T_1}(2) & 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 & A_j^{T_2}(3) \\ A_j^{T_1}(3) & A_j^{T_2}(2) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}^t \cdot \begin{pmatrix} \delta(1) \\ \delta(2) \\ \vdots \\ \delta(m-1) \\ \delta(m) \\ \delta(m+1) \\ \delta(m+2) \\ \vdots \\ \delta(m+NS-j-1) \\ \delta(m+NS-j) \\ \delta(m+NS-j+1) \\ \delta(m+NS-j+2) \\ \vdots \\ \delta(N^*) \end{pmatrix} \geq \begin{cases} m_j^{T_1} \\ m_j^{T_2} \end{cases}$$

Avec comme minorant connu (à évaluer sur chaque triangle et pour chaque phase) :

$$m_j^{T_1} = \frac{-3[f_j(m)A_j^{T_1}(1) + f_j(m+1)A_j^{T_1}(2) + f_j(m+NS-j+1)A_j^{T_1}(3)]}{f_j(m) + f_j(m+1) + f_j(m+NS-j+1)}$$

$$m_j^{T_2} = \frac{-3[f_j(m)A_j^{T_2}(1) + f_j(m+NS-j+1)A_j^{T_2}(3) + f_j(m+NS-j)A_j^{T_2}(2)]}{f_j(m) + f_j(m+NS-j+1) + f_j(m+NS-j)}$$

Le système précédent doit être vérifié sur toute la triangulation et sur les trois phases, la propriété (ii) se résume donc :

$$a(k)_j^T \delta(k) \geq m_j^T \quad \forall k \in \llbracket 1, N^* \rrbracket \quad j = 1, 2, 3 \text{ et } T \in (\mathcal{T}) \quad (\text{A.40})$$

Propriété (iii) $\Leftrightarrow kr_j$ majorée sur (\mathcal{T}) Cette propriété s'exprime de la même manière qu'en étape 4 en introduisant une perméabilité maximale sur chaque phase ($kr_{j,max}$). Il vient :

$$|\delta(m, p)| \leq \min_{1,2,3} \left(\ln \left[\frac{d_j}{f_j(m, p)} kr_{j,max} \right] \right) \quad \forall m \in \llbracket 1, N^* \rrbracket \quad (\text{A.41})$$

Résoudre l'étape 5 consiste à résoudre le problème de minimisation défini dans la propriété (i) (A.35) et d'y associer les contraintes dégagées dans les propriétés (ii), (iii) (A.40), (A.41)

ainsi que les contraintes de bords (A.30).

$$\begin{array}{l}
 \text{Déterminer } \vec{\delta} \text{ tq.} \\
 \left\{ \begin{array}{l} \min_{\vec{\delta}} (J) \leq \varepsilon \\ J(\delta(m)) = \sum_{1,2,3} \|\Delta kr_j(\delta(m))\|^2 \end{array} \right. \quad \text{s.c.} \quad \left\{ \begin{array}{l} \delta(k, p) = \ln(d(k, p)) \quad \forall k \in \llbracket 1, NS + 1 \rrbracket \\ \delta(k, p) = \ln(d(k, p)) \quad \forall k \in \llbracket 1, N^* \rrbracket \\ \text{tq. } k = \frac{j}{2}(2NS + 3 - j) + 1 \quad \forall j \in \llbracket 0, NS \rrbracket \\ \delta(k, p) = \ln(d(k, p)) \quad \forall k \in \llbracket 1, N^* \rrbracket \\ \text{tq. } k = \frac{(NS-i)(NS+i+3)}{2} + i + 1 \quad \forall i \in \llbracket 0, NS \rrbracket \\ m_j^T - a(k)_j^T \delta(k) \leq 0 \\ \text{tq. } \forall k \in \llbracket 1, N^* \rrbracket \quad j = 1, 2, 3 \text{ et } T \in (\mathcal{T}) \\ |\delta(k, p)| \leq \min_{1,2,3} \left(\ln \left[\frac{d_j}{f_j(m, p)} kr_{j, \max} \right] \right) \quad \forall k \in \llbracket 1, N^* \rrbracket \end{array} \right.
 \end{array}$$

La contrainte d'inégalité (propriété (ii)) est reformulée en terme de recherche d'un majorant sur l'ensemble des triangles et sur les trois phases. Si la quantité retournée est (η) , la contrainte est vérifiée (étape 4), soit :

$$\max_{\substack{j=1,2,3 \\ T \in (\mathcal{T})}} \left(\eta, m_j^T - a_j^T \vec{\delta} \right) = \eta \quad (\text{A.42})$$

Dans le cas contraire, il existe un couple $T_{\max} \in (\mathcal{T})$, j_{\max} tel que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \exists (T_{\max}) \in (\mathcal{T}) \quad j_{\max} \in \{1, 2, 3\} \\ m_{j_{\max}}^{T_{\max}} - a_{j_{\max}}^{T_{\max}} \vec{\delta} \geq \eta \end{array} \right.$$

La fonctionnelle de pénalisation J_ϵ est donc définie :

$$\begin{array}{l}
 \text{Déterminer } \vec{\delta} \text{ tq.} \\
 \left\{ \begin{array}{l} \min_{\vec{\delta}} \left(J_\epsilon(\vec{\delta}) \right) \leq \varepsilon \\ J_\epsilon(\vec{\delta}) = \epsilon_q J(\vec{\delta}) \\ + \frac{1}{\epsilon} \left[\max_{\substack{j=1,2,3 \\ T \in (\mathcal{T})}} \left(\eta, m_j^T - a_j^T \vec{\delta} \right) \right] \\ J(\vec{\delta}) = \sum_{1,2,3} \|\Delta kr_j(\vec{\delta})\|^2 \end{array} \right. \quad \text{s.c.} \quad \left\{ \begin{array}{l} \vec{\delta} \text{ contraintes de bords (A.30)} \\ |\vec{\delta}| \leq \min_{1,2,3} \left(\ln \left[\frac{d_j}{f_j} kr_{j, \max} \right] \right) \end{array} \right.
 \end{array}$$

Détermination du gradient de J_ϵ Le gradient de la fonctionnelle de pénalisation ($\nabla J_\epsilon \in \llbracket 0, N^* \rrbracket$) suivant le vecteur $\vec{\delta}$. Elle est définie en tenant compte de la définition initiale de la perméabilité relative (A.30) :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{\partial J_\epsilon}{\partial \delta(m)} = 0 \qquad P(m) \in \{ \text{bords, sommets} \} \\
 \frac{\partial J_\epsilon}{\partial \delta(m)} = \epsilon_q \frac{\partial J}{\partial \delta(m)} + \frac{1}{\epsilon} \begin{cases} 0 & \text{(A.42)} \\ -a_{jmax}^{Tmax} & \text{(A.27)} \end{cases} \qquad \forall P(m) \in \{ \text{intérieur} \} \qquad \text{(A.43)} \\
 \text{avec } \frac{\partial J}{\partial \delta(m)} = \sum_{j=1,2,3} kr_j(\delta(m)) \left[(\overline{\overline{B}})^t \overline{\overline{B}} \overrightarrow{kr_j} \right] (\delta(m))
 \end{array} \right.$$

B

Predictor-corrector scheme $P(EC)_\mu^m E$ for solving P_C^g on $\partial\mathbb{T}$

We use a fourth order Adams-Bashforth-Moulton method (ABM). It is a multistep method derived from the fundamental theorem of calculus [Quarteroni et al. 2007] :

$$\beta^{ij}(t_{k+1}) = \beta^{ij}(t_k) + \int_{t_k}^{t_{k+1}} f(\tau, \beta^{ij}(\tau)) d\tau. \quad (\text{B.1})$$

The predictor uses the Lagrange polynomial approximation for $f(t, \beta^{ij}(t))$ based on the four points (t_{k-3}, f_{k-3}) , (t_{k-2}, f_{k-2}) , (t_{k-1}, f_{k-1}) , and (t_k, f_k) . The functions are then integrated over the interval $[t_k, t_{k+1}]$ and, by extrapolation, produce the Adams-Bashforth predictor scheme :

$$[P] : \tilde{\beta}_{k+1}^{ij} = \beta_k^{ij} + \frac{h}{24} [55f_k - 59f_{k-1} + 37f_{k-2} - 9f_{k-3}]. \quad (\text{B.2})$$

The corrector is developed similarly. The newly computed value $\tilde{\beta}_{k+1}^{ij}$ can now be used. A second Lagrange polynomial for $f(t, \beta^{ij}(t))$ is constructed, which is based on the points (t_{k-2}, f_{k-2}) , (t_{k-1}, f_{k-1}) , (t_k, f_k) , and the new point $(t_{k+1}, \tilde{f}_{k+1}) = (t_{k+1}, f(t_{k+1}, \tilde{\beta}_{k+1}^{ij}))$. This polynomial is then integrated over $[t_k, t_{k+1}]$, producing, by interpolation, the Adams-Moulton corrector scheme :

$$[C] : \beta_{k+1}^{ij} = \beta_k^{ij} + \frac{h}{24} [9\tilde{f}_{k+1} + 19f_k - 5f_{k-1} + f_{k-2}]. \quad (\text{B.3})$$

Practical considerations The corrector used the approximation $\tilde{f}_{k+1} \approx f(t_{k+1}, \tilde{f}_{k+1})$ in the calculation of β_{k+1}^{ij} . Since β_{k+1}^{ij} is also an estimate of $\beta^{ij}(t_{k+1})$, over m loops, it could be used in the corrector to generate a new approximation for f_{k+1}^{m-1} , which in turn will generate a new value for $\beta_{k+1}^{ij,m}$. However, when this iteration on the corrector is continued, it will converge to a fixed point β_{k+1}^{ij} . Tolerance parameter used in the m -loop is taken as 2ε , where ε is the relative error due to rounding ($tol \sim 10^{-16}$)

Error estimation The error terms for the numerical integration formulas used to obtain both the predictor and corrector are of the order $\mathcal{O}(h^5)$. Supposing that h is small enough and $(\beta^{ij})^{(5)}$ is nearly constant over the interval, the LTE from Taylor expansion for predictor and corrector formulas is :

$$\text{LTE} \approx \frac{C_5}{C_5^* - C_5} [\beta_{k+1}^{ij,m+1} - \beta_{k+1}^{ij,m}], \quad (\text{B.4})$$

Algorithm 2 Adams-Bashforth-Moulton method $P(EC)_\mu^m E$, refine mesh N_μ , side (ij)

Require: $p, \beta^{ij}(t_0) = \beta_0^{ij}, tol, \mu, t_0, t_N, N$

Ensure: $\beta^{ij'}(t) = f(t, \beta^{ij}(t), p_3)$

$k = 0; m = 0$

$h = (t_N - t_0)/k/N$

$f_0^{(0)} = f(t_0, \beta_0^{ij}, p_3)$

return $\mu < 1$

for $n = 1$ to N { **Mesh** } **do**

$N_\mu = \mu(n - 1) - 1$

for $l = 1$ to $\mu\{$ **Refine** $\}$ **do**

$k \leftarrow k + 1$

$t_l \leftarrow t_0 + h(N_\mu + l)$

$P_c^{32}(t_l) \leftarrow \int_0^{t_l} \frac{dP_c^{32}(\tau)}{ds_3(\tau)}(\tau)$

$p_{3,l-1} = p_3(t_l) = p - \beta_{l-1}^{ij} + P_c^{32}(t_l)$

if $k < 4$ **then**

call $RK4 \Rightarrow f_k(t_k, \beta_k^{ij}, p_{3,k-1})$

else

$t_{l+1} \leftarrow t_l + h$

[P] : $\tilde{\beta}_{l+1}^{ij} = \beta_l^{ij} + \frac{h}{24}(55f_l - 59f_{l-1} + 37f_{l-2} - 9f_{l-3})$

while $\delta > tol$ **do**

if $m = 0$ **then**

$\beta_{l+1}^{ij,m} = \tilde{\beta}_{l+1}^{ij}$

end if

$p_{3,l+1}^m = p - \beta_{l+1}^{ij,m} + P_c^{32}(t_l)$

[E] : $f_{l+1}^m = f(t_{l+1}, \beta_{l+1}^{ij,m}, p_{3,l+1}^m)$

[C] : $\beta_{l+1}^{ij,m+1} = \beta_l^{ij} + \frac{h}{24}(9f_{l+1}^m + 19f_l - 5f_{l-1} + f_{l-3})$

$\delta = \min \left(\|\beta_{l+1}^{ij,m+1} - \beta_{l+1}^{ij,m}\|, LTE \right)$

$m \leftarrow m + 1$

end while

[E] : $f_{l+1} = f(t_{l+1}, \beta_{l+1}^{ij}, p_3)$

end if

end for { **End Refine** }

end for { **End Mesh** }

ODE Solver	$\log_{10} \ \text{rel. err.}\ _{L_2}$	CPU (sec.)
<code>rkm9mkn</code>	-9.1	0.004
$P(EC)_1^2 E$	-3.3	~
$P(EC)_{10}^2 E$	-5.5	0.004
$P(EC)_{10^2}^2 E$	-9.2	0.08
$P(EC)_{10^3}^1 E$	-12.4	0.12

TAB. B.1 – Performance between Intel solver (`rkm9mkn`) and $P(EC)_\mu^m E$ (m : fix point loop, μ : refine factor)

where $C_5 = \frac{-19}{720}$ and $C_5^* = \frac{251}{720}$ are error constants of the *Adams-Bashford-Moulton* scheme [Quarteroni et al. 2007]. The LTE formula gives an approximate error estimate based on the two computed values $\beta_{k+1}^{ij,m+1}$ and $\beta_{k+1}^{ij,m}$ without using a fifth order formula; LTE formula is used as convergence criterion in m -loop ($\delta = \text{LTE}$) Alg. B.

Numerical test and discussion The $P(EC)_\mu^m E$ scheme proposed Alg. B was compared with ODE solvers proposed in the *Intel Ordinary Differential Equation Solver Library* [Novikov 1992; Novikov 1993]. The library contains various routines intended to solve non-stiff, middle-stiff, stiff problems. Their all based on Runge-Kutta method. A specialized Runge-Kutta-Merson method (`dodesol_rkm9mkn`) with *a priori* unknown stiffness was chosen. A choice is automatically done between explicit or implicit scheme in every step (adaptive criterion on LTE) and the solver computes numerically the Jacobi matrix when necessary. Numerical ODE test was conducted on the integration of $dP_c^{12}/ds_1(t)$ for $t \in [0, 1]$ and $P_c^{12}(1) = 0$. The L_2 -norm of relative error is given for 2000 integration steps (cf. Tab. B.1). Slopes f are computed on a refine mesh N_μ . Gas pressure p_3 is calculated using the integrated capillary pressure $P_c^{32}(t_j)$ value on the refine mesh N_μ and updated at every predictor and corrector step with the new value of β^{ij} .

C

C^1 *Hsieh-Clough-Tocher* finite element for biharmonic problem

A description of the C^1 finite element method is given and applied to a general fourth-order problem $\forall (x, y)$ in Ω

$$\begin{cases} \Delta^2 u &= \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 u}{\partial y^4} + 2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f & \text{in } \Omega, \\ u &= u^{data} & \text{on } \Gamma, \\ \frac{\partial u}{\partial n} &= \frac{\partial u^{data}}{\partial n} = g & \text{on } \Gamma. \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

This problem is a formulation of the Stokes equation in fluid mechanics where $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, $\Delta^2 = \Delta\Delta$, and \mathbf{n} is the outward unit normal to boundary $\partial\Gamma$. It models the displacement of a thin elastic plate, *clamped* at its boundary with a zero transversal load. The first boundary condition (Dirichlet type) $u|_{\Gamma}$ means that the displacement u is held fixed at the boundary Γ , while the second (Neumann type) prescribed condition $\partial u^{data}/\partial \mathbf{n}$ stands for the rotation of the plate at Γ . These boundary conditions imply that the plate is *clamped*. We introduce the space

$$V_h = H_0^2(\Omega) = \left\{ \psi \in H^2(\Omega) : \psi = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} = 0 \text{ on } \Gamma \right\}, \quad (\text{C.2})$$

where the norm is defined by $\| \cdot \|_{V_h} = \| \cdot \|_{H_0^2(\Omega)}$. With this definition and using Green's formulas tow times, one see that

$$\begin{aligned} (\Delta^2 u, \psi) &= \left(\frac{\partial \Delta u}{\partial \mathbf{n}}, \psi \right)_{\Gamma} - (\nabla \Delta u, \nabla \psi), \\ &= - \left(\Delta u, \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} \right)_{\Gamma} + (\Delta u, \Delta \psi), \\ &= (\Delta u, \Delta \psi), \quad \psi \in V_h. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

A composite Hermite finite element : full-Hsieh-Clough-Tocher approach A *full*-HCT finite element mapping is proposed here following [Bernadou et al. 1980] in opposite to a *reduced*-HCT form we will introduced later on. Let T_h be a triangulation of Ω into triangles. On a local element T , we require C^1 continuity of the finite element solution and use high order polynomial expansions that are defined not only with respect to the nodal values, but also

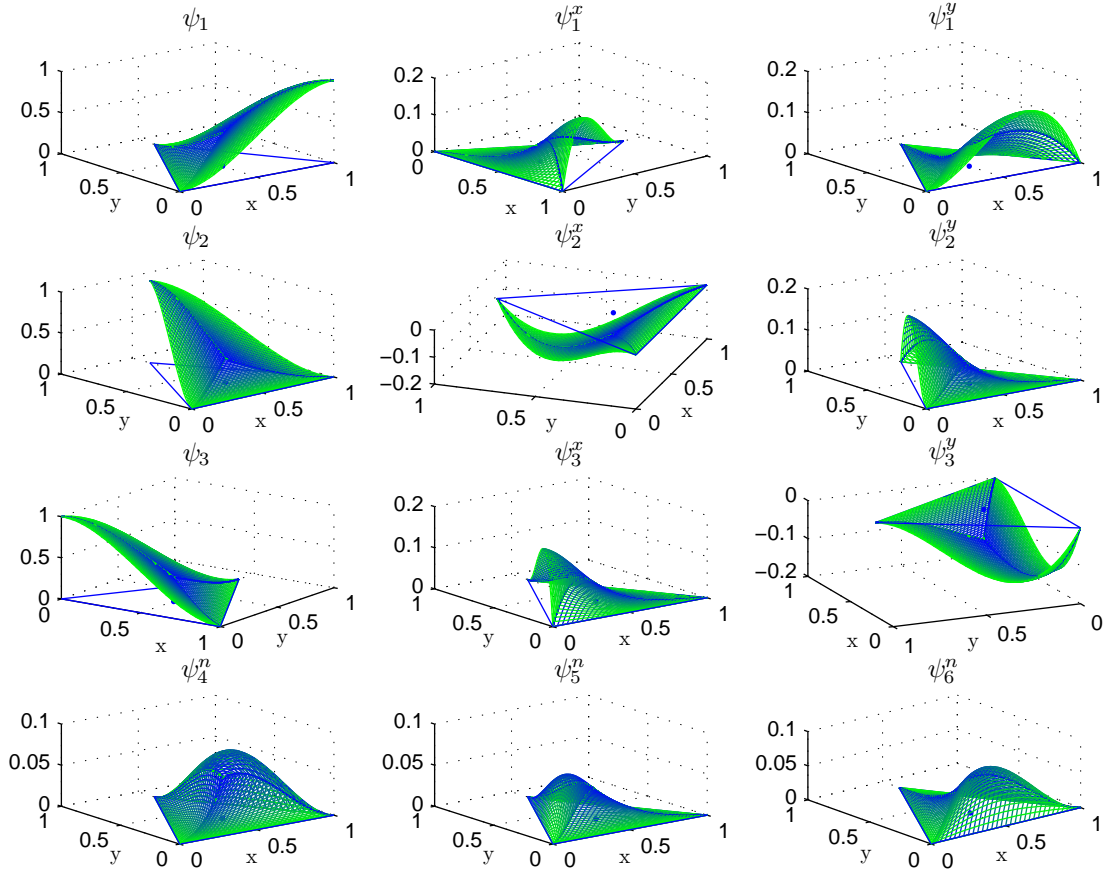


FIG. C.1 – Hsieh-Clough-Tocher shape function ψ over an elementary triangle for each dof

with their first-order derivatives with respect to x and y . Following [Bernadou and Hassan 1980; Peano 1976], we use a complete cubic expansion in x and y over an element

$$u_h(x, y) = \sum_{n=0}^3 \sum_{k=0}^n c_{n-k,k} x^{n-k} y^k$$

. This form involves ten coefficients $c_{n-k,k}$. To ensure an equal number of unknowns, we introduce a 6-nodes triangle defined by three vertices and three mid-side nodes. At the vertex nodes, we define the values of the function and its gradients with respect to the x and y direction,

$$u_i, u_i^x = \partial_x u(a_i), u_i^y = \partial_y u(a_i), i = 1, 2, 3. \quad (\text{C.4})$$

Associated with T_h , we define the finite element space and a finite element T , where T_i are subtriangles respecting $T = \bigcup_{i=1}^3 T_i$. The *full*-HCT finite element Fig. C.3 is a triple $(T \in T_h, P_3(T), \sum_T)$, where T is the geometric object (i.e. triangular element), $P_3(T)$ is a finite dimensional linear space of functions on T (series expansions of third order) and \sum_T is a set of degree of freedom, such that a function $v \in P_3(T)$ is uniquely defined by \sum_T [Ciarlet 1978; Chen 2005]. When \sum_T includes the values of partial derivatives of functions, the finite element is said to be *Hermite type*. When all dof are given by function values, the finite element is called a *Langrange element*. At the *center of gravity* of T (centroid) labeled a_7 Fig. C.3, we only define

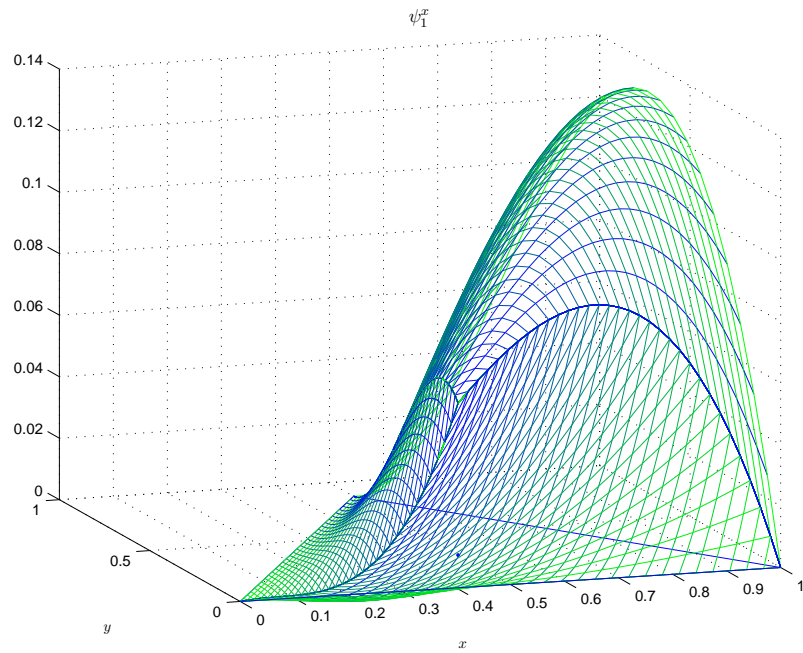
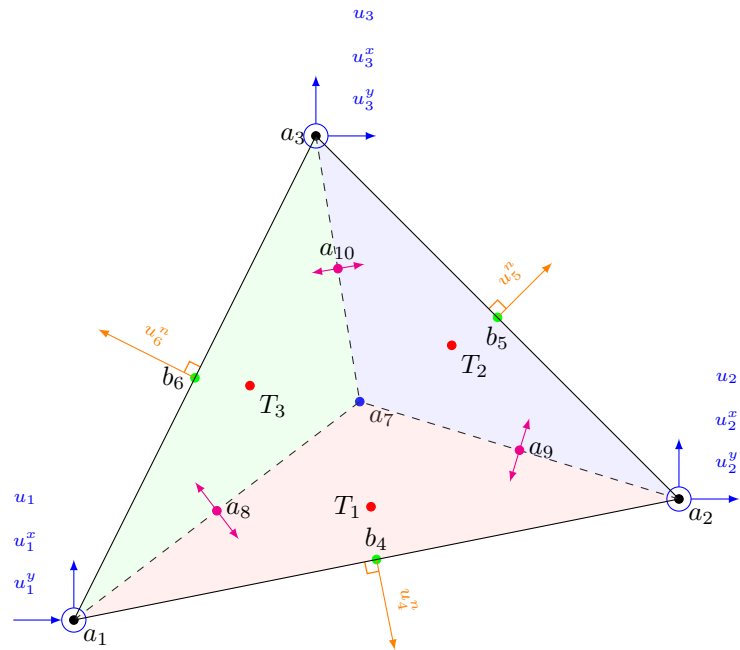


FIG. C.2 – Shape function ψ_1^x over an elementary triangle T (dark blue lines show $T_{i,1 \leq i \leq 3}$)



$$\dim u_T = 12$$

$$u_T = \{v \in C^1(T); u|_{T_i} \in P_3(T_i), 1 \leq i \leq 3\}$$

$$\Sigma_T = \{u(a_i), \partial_x u(a_i), \partial_y u(a_i), \partial_n u(b_i), 1 \leq i \leq 3\}$$

FIG. C.3 – Illustration of the full-HCT triangular finite element

the value of the function u_7 . These $c_{n-k,k}$ unknown values are collected into a tensor \mathbf{D} in each subtriangles T_i . Inverse matrix \mathbf{D}^{-1} need to be computed to build our shape functions over our 6-nodes and 12-dof Hermite triangle. Thus the 10-dimensional vector shape function on each T_i involves :

$$\boldsymbol{\psi}(x, y) = \boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{D}^{-1} \iff \psi_i(x, y) = \sum_{k=1}^{10} \varphi_k(x, y) D_{ki}^{-1}, \quad (\text{C.5})$$

where $\varphi(x, y) = [1, x, y, x^2, \dots, y^3]$ are monomials of a cubic shape function and $i = 1, \dots, 10$. Thus \mathbf{D} encapsulates the Hermite interpolation functions also called expansion modes ψ in figure C.1. In practice, the following system $\mathbf{D} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{e}_i$ is solved for all modes where the right hand side \mathbf{e}_i is a unit vector (filled in with zero) pointing to the corresponding *dof*.

$$\mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} \left. \begin{array}{l} (1 \ 0 \ 0)^t \ \text{dof}_{a_1} \\ (0 \ 0 \ 0)^t \ \text{dof}_{a_2} \end{array} \right\} T_1 \\ \vdots \\ \left. \begin{array}{l} (0 \ 0 \ 0)^t \ \text{dof}_{a_3} \\ (1 \ 0 \ 0)^t \ \text{dof}_{a_1} \end{array} \right\} T_3 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (\text{C.6})$$

Each triangle is mapped from the physical plane xy to the reference triangle in the standard plane $\hat{x}\hat{y}$ using directly Gaussian triangle quadrature rules of order N_q (weights $w(N_q)$, Gauss points $\xi(N_q)$ and $\eta(N_q)$ (cf. Alg. C). Shape function ψ can be obtained using mesh lines given in the parametric plane $\hat{x}\hat{y}$ and then moved to the real plane xy using the correct transformation rule. One can see that function ψ_1 Fig. C.1 is zero on edge (a_2, a_3) and strictly determine by the position of a_1 and a_2 on edge (a_1, a_2) (resp. a_1, a_3 on edge (a_1, a_3)). To explain this on edge (a_1, a_2) , $\forall s \in (a_1, a_2)$, $\psi(a_1) = 1$, $\psi(a_2) = 0$ and $d\psi_1/ds(a_1) = d\psi_1/ds(a_2) = 0$, then with l the length of (a_1, a_2) , $\psi_1(s) = (1 - s/l)^2(2s/l + 1)$.

To ensure a C^0 continuous solution requires, the vertex values have to be shared with neighboring elements at the corresponding position. Similarly, the requirement of C^1 continuous solution demands that values of normal derivatives are shared at the mid-side nodes with neighboring elements and taking care of the opposite sign of the normal vector. We can see that the *full*-HCT element is defined by three vertex nodes, three mid-sides ($b_{i,4 \leq i \leq 6}$) nodes and several interior ($a_{i,7 \leq i \leq 10}$) nodes defined with regard to the three subtriangles T_i . Nodes labeled ($a_{i,1 \leq i \leq 3}$) and mid-side nodes denote mesh nodes. The arrows indicate degrees of freedom associated with x and y (blue circles) and normal derivatives Fig. C.3.

For $i = 4, 5, 6$, the normal derivatives at the mid-side nodes can be written :

$$u_i^n = (\mathbf{n} \cdot \nabla u)_i \iff u_i^n = \begin{pmatrix} nx_i \\ ny_i \end{pmatrix}^t \cdot \begin{pmatrix} \partial u_i^x \\ \partial u_i^y \end{pmatrix} \quad (\text{C.7})$$

Each mid-side node b_i is made by x-value nx_i and y-value ny_i , so we can write slope coefficient vector by :

$$[u_i^n]_{1 \times 10} = \begin{bmatrix} 0, nx_i, ny_i, 2x_i nx_i, y_i nx_i + x_i ny_i, 2y_i ny_i, \\ 3x_i^2 nx_i, x_i(2y_i nx_i + 2x_i ny_i), 3y_i^2 ny_i \end{bmatrix}$$

Local inversions over T_h are expensive on computational time; therefore, another method is proposed by reducing the *full*-HCT bending stiffness matrix in a *reduced* form $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{12 \times 12}$.

Local bending stiffness matrix D Notation and color convention are given in Fig. C.3. Here $\bigcup_1^3 T_i = T$. At the mid-side, the sign of normal derivative nodes b_i must be switched while assembling the corresponding element of the global linear system when the first contribution has been done.

Algorithm 3 Local Stiffness Matrix \mathcal{A}^{lc} and Right Hand Side b^{lc} calculation for full-HCT for a local element T

Require: $x(a_{i,1 \leq i \leq 3}), y(a_{i,1 \leq i \leq 3}), N_q$

Ensure: $\mathcal{A}_{lm}^{lc} = \int_T \nabla^2 \psi_l \nabla^2 \psi_m dx dy, b_l^{lc} = \int_T \psi_l \omega dx dy$

$Aire(T) = |T|$

$[\xi]_{N_q}, [\eta]_{N_q}, [w]_{N_q} \leftarrow \text{Hammer-Gauss}(N_q)$

for $T_i : i = 1$ to 3 { **Subtriangles** } **do**

$T_i : a_i, \widehat{a_{i+1}}, a_7$

for $q = 1$ to N_q { **Gauss Points** } **do**

for $i_m = 1$ to 12 { **Modes** } **do**

$[c_{n-k,k}]_{10} \leftarrow \text{full-}\mathbf{D}^{-1}(T_i) \cdot [e_{i_m}]_{10}$

$\hat{x}_i = x_i + (x_{i+1} - x_i)\xi(q) + (x_7 - x_i)\eta(q)$

$\hat{y}_i = y_i + (y_{i+1} - y_i)\xi(q) + (y_7 - y_i)\eta(q)$

$\psi(i_m) \sum_{n=0}^3 \sum_{k=0}^n (c_{n-k,k} \hat{x}_i^{n-k} \hat{y}_i^k)$

$\Delta\psi(i_m) = \sum_{n=2}^3 \sum_{k=0}^n c_{n-k,k} ((n-k)(n-k-1)\hat{x}_i^{n-k-2}\hat{y}_i^k + k(k-1)\hat{x}_i^{n-k}\hat{y}_i^{k-2})$

end for { **End Modes** }

for $l = 1$ to 12 { **Modes** } **do**

for $m = l$ to 12 { **Modes** } **do**

$\mathcal{A}_{lm}^{lc} = \mathcal{A}_{lm}^{lc} + \Delta\psi(l)\Delta\psi(m)|T_i|w(q)$

end for { **End Modes** }

$b_l^{lc} = b_l^{lc} + \psi(l) \cdot \omega(\hat{x}_i, \hat{y}_i)|T_i|w(q)$

end for { **End Modes** }

end for { **Gauss Points** }

end for { **Subtriangles** }

$\mathcal{A}_{lm}^{lc} = \mathcal{A}_{lm}^{lc} + [\mathcal{A}_{lm}^{lc}]^t$

The computation form of the complete cubic polynomial full-HCT system is given below where $0 \equiv [0]_{1 \times 10}$. For a ten-coefficients polynomial expansion $u_h(x, y)$ and three subtriangles, necessarily $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{30 \times 30}$. Each column of the grand-matrix D is linked to a subtriangle T_i (super script). We have to find thirty relations to build a square sparse unsymmetric full-HCT system. The first eighteen equations given by the set of the homogenous monomials (C.8) come from the construction of the three subtriangles. Matrix Σ is associated to each subtriangle and is construct from $(a_i, a_{i+1}) \in T_i$. Then, we have three equations from normal derivatives with $u_{i+3}^n \in T_i$ for $1 \leq i \leq 3$.

$$[\Sigma]_{6 \times 10}^{i,i+1} = [u_i, u_i^x, u_i^y, u_{i+1}, u_{i+1}^x, u_{i+1}^y]^t \quad (\text{C.8})$$

Last nine rows close the local bending matrix. Matrix Π allows the continuity of each subtriangle at the interior node labeled a_7 and only twice because the continuity of the third couple (T_1, T_3)

is directly obtained :

$$[\mathbf{\Pi}]_{3 \times 20} = \begin{bmatrix} [u_7]_{1 \times 10} & -[u_7]_{1 \times 10} \\ [u_7^x]_{1 \times 10} & -[u_7^x]_{1 \times 10} \\ [u_7^y]_{1 \times 10} & -[u_7^y]_{1 \times 10} \end{bmatrix} \quad (\text{C.9})$$

Local stiffness matrix system is inverted on each element (find $c_{n-k,k}$) during assembling procedure. An expression of $\Delta\psi$ is given as follows (cf. Alg. C) :

$$\Delta\psi(i_m) = \sum_{n=2}^3 \sum_{k=0}^n c_{n-k,k} [(n-k)(n-k-1)\hat{x}_i^{n-k-2}\hat{y}_i^k + k(k-1)\hat{x}_i^{n-k}\hat{y}_i^{k-2}] \quad (\text{C.10})$$

To prevent singular behaviour during local assembling (matching non-zero values on diagonal), a row-column pivoting strategy is used.

$$D_{30 \times 30} = \begin{bmatrix} T_1 & T_2 & T_3 \\ [\Sigma]_{6 \times 10}^{1,2} & 0 & 0 \\ 0 & [\Sigma]_{6 \times 10}^{2,3} & 0 \\ 0 & 0 & [\Sigma]_{6 \times 10}^{1,3} \\ [u_4^n]_{1 \times 10} & 0 & 0 \\ 0 & [u_5^n]_{1 \times 10} & 0 \\ 0 & 0 & [u_6^n]_{1 \times 10} \\ [\mathbf{\Pi}]_{3 \times 20} & & 0 \\ 0 & [\mathbf{\Pi}]_{3 \times 20} & \\ [u_8^n]_{1 \times 10} & 0 & -[u_8^n]_{1 \times 10} \\ [u_9^n]_{1 \times 10} & -[u_9^n]_{1 \times 10} & 0 \\ 0 & [u_{10}^n]_{1 \times 10} & -[u_{10}^n]_{1 \times 10} \end{bmatrix} \quad (\text{C.11})$$

A reduced-Hsieh-Clough-Tocher finite element To get a *reduced-D* matrix shorter than *full-D* one, a 12×12 matrix is built equal to the number of mode on the elementary triangle T without T_i partition. A new incomplete quartic expansion \tilde{u}_h is used in x and y with $\tilde{c}_{n-k,k}$ coefficients having the following Pascal triangle form :

$$\begin{aligned} \tilde{u}_h(x, y) = & \tilde{c}_{00} \\ & + \tilde{c}_{10}x + \tilde{c}_{01}y \\ & + \tilde{c}_{20}x^2 + \tilde{c}_{11}xy + \tilde{c}_{02}y^2 \\ & + \tilde{c}_{30}x^3 + \tilde{c}_{21}x^2y + \tilde{c}_{12}xy^2 + \tilde{c}_{03}y^3 \\ & \tilde{c}_{40}x^4 + \tilde{c}_{31}x^3y + \tilde{c}_{22}x^2y^2 + \tilde{c}_{13}y^3x + \tilde{c}_{04}y^4 \end{aligned}$$

N	Time 1		Time 2	
	f -HCT	r -HCT	f -HCT	r -HCT
4	0.1	~	0.11	0.02
20	1.6	0.16	2.12	0.58
40	6.4	0.63	11.62	4.57

TAB. C.1 – Assembling (Time 1) and total (Time 2) CPU time (s) from analytical test ($a = 1, b = 1$), f -HCT (left) and r -HCT (right) for N element

The incomplete r -HCT serie expansion include the previous f -HCT expression (first four lines). This form involving twelve coefficients \tilde{c}_{kn} . The three even monomial terms (gray) in the fifth line are neglected. As for the f -HCT form, an equal number of unknowns is needed. The same 6–node triangle defined by three vertices and three mid-side nodes is introduced. At vertex nodes, values of function and its gradients composed of the x and y derivatives are set. The main difference is that no centroid node and then no subtriangle contribution is needed when assembling the global matrix.

Analytical tests results for HCT finite element and discussion The analytical trigonometric function $u(x, y)$ previously introduced have been used on a unit square domain $[0, 1] \times [0, 1]$ meshing with triangles (uniform). Behaviours and properties of both HCT methods are studied numerically for different number of element N . In the reference regular case for $a = 1$ and

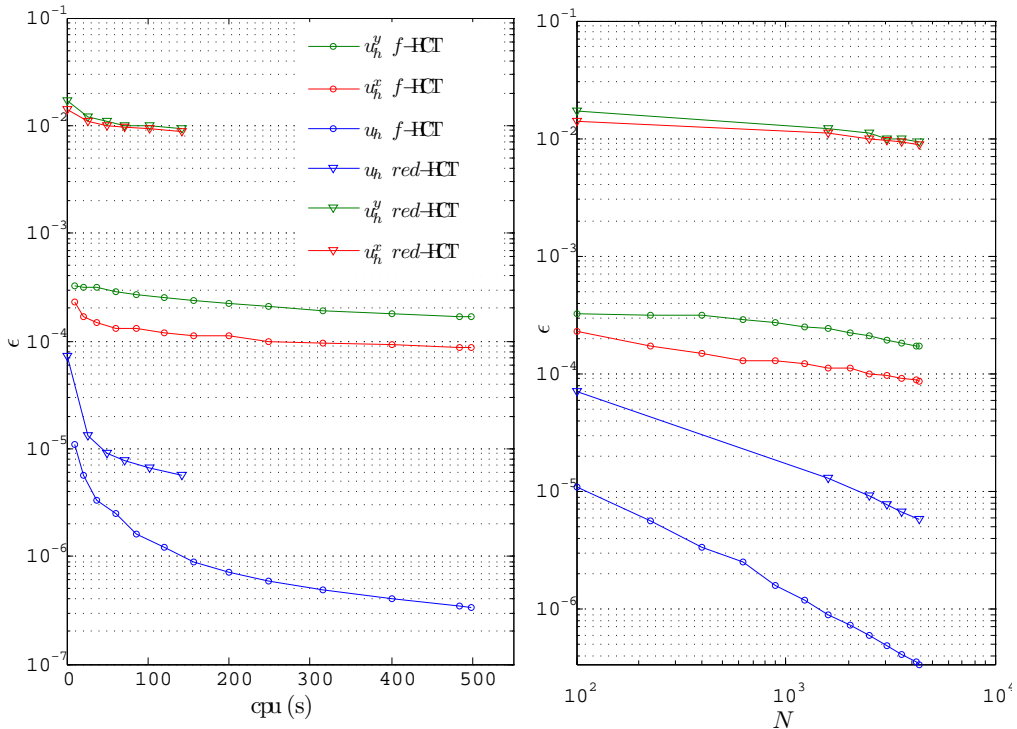


FIG. C.4 – Energy error ϵ for test case (1, 1) between f -HCT (\circ) and r -HCT (∇) for numerical solution u_h and its derivative according to x and y resp. u_h^x, u_h^y

$b = 1$, r -HCT approach has assembling times ten time smaller than the full approach (cf. Tab. C.1) but need regular values for function values and its derivatives on boundaries to

approach correctly the exact solution in figure C.5 and C.6. When the desired solution present a non regular behaviour (cf. Fig. C.7), only *full-HCT* can be used.

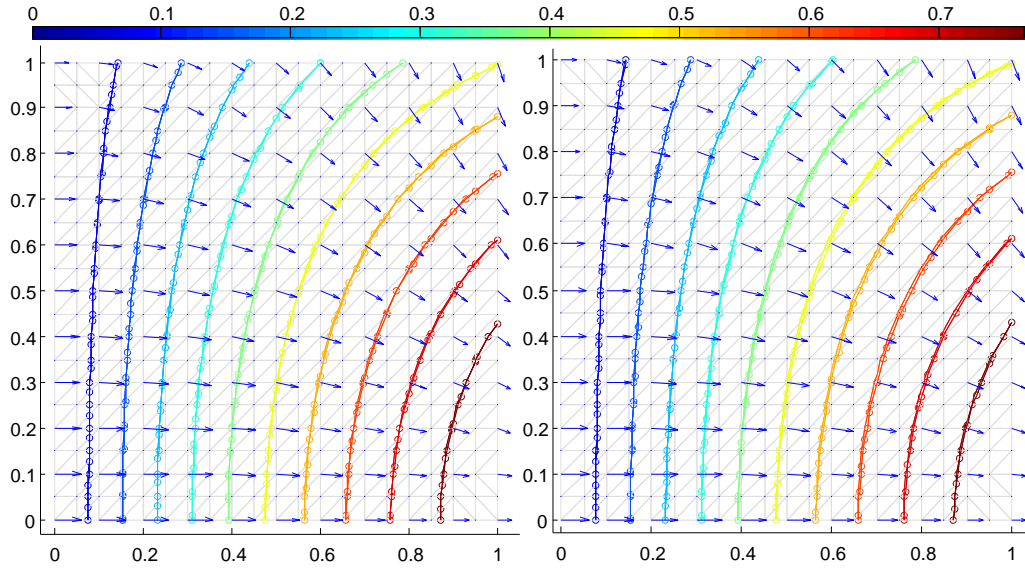


FIG. C.5 – Test case for $a = 1, b = 1$ with full-HCT approach (left, \circ), reduced-HCT approach (right, \circ) and analytical solution (—)

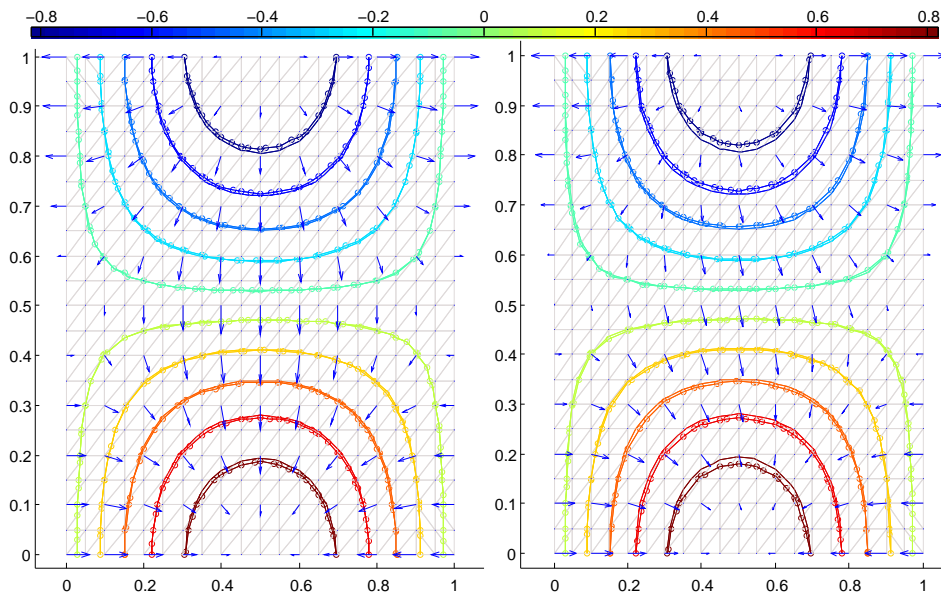


FIG. C.6 – Test case for $a = \pi, b = \pi$ with full-HCT approach (left, \circ), reduced-HCT approach (right, \circ) and analytical solution (—)

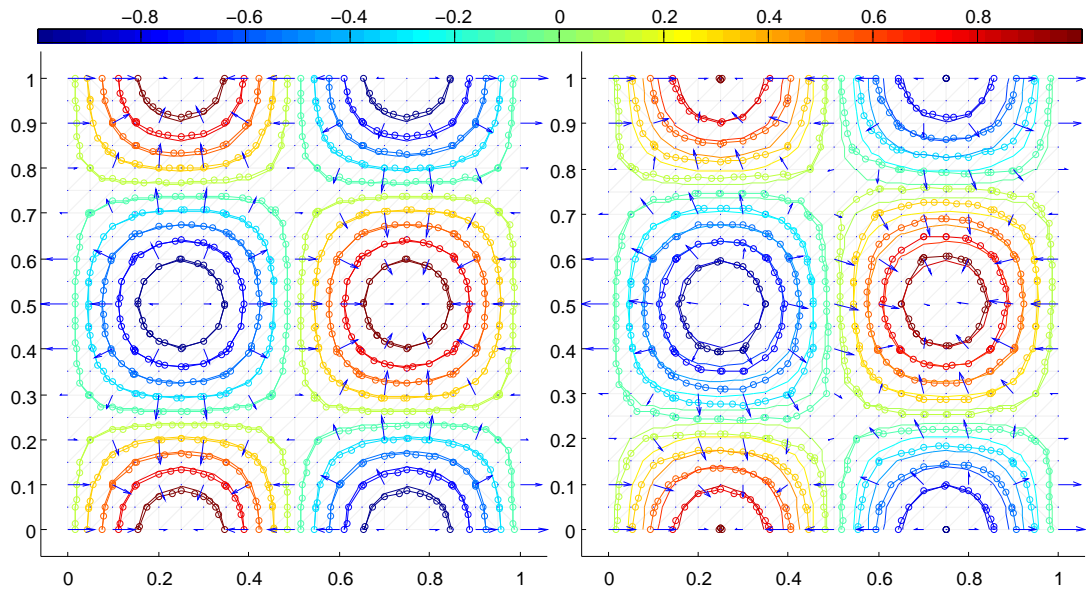


FIG. C.7 – Trigonometric test case for $a = 2\pi, b = 2\pi$ with full-HCT approach (left, \circ), reduced-HCT approach (right, \circ) and analytical solution (—)

D

Solutions exactes en milieu poreux homogène

D.1 Introduction

D.1.1 Objectifs

Des solutions exactes pour des écoulements diphasiques monodimensionnels sont présentés dans ce chapitre. Une forme générale de l'équation d'écoulement de deux phases en milieu poreux est de la forme :

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} = -u(t) \frac{\partial f(S)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{D}(S) \frac{\partial S}{\partial x} \right), \quad (\text{D.1})$$

avec $S = S(x, t)$ ($0 \leq S \leq 1$) la saturation effective de la phase mouillante (ou de la phase non-mouillante), $f = f(S)$ est le flux fractionnaire. Ici, le terme de diffusivité $\mathcal{D}(S)$ prend les valeurs $\mathcal{D}(0) = 0$ et $\mathcal{D}(1) = 0$ pour les deux saturations effectives $S = 0$ et $S = 1$. Ce comportement est dû aux valeurs prises par la mobilité λ_1 et λ_{nw} en ces deux points : $\lambda_1(0) = \lambda_{nw}(1) = 0$. Nous présentons de manière générale la dérivation mathématique de la solution exacte ainsi que les algorithmes mis en œuvre pour la résolution.

D.1.2 Application aux problèmes de transport en milieu poreux

Nous présentons une description des fonctions \mathcal{D} et f dans le cadre d'un déplacement de la phase mouillante et non-mouillante. Dans le cas d'un déplacement de la phase non-mouillante, la phase mouillante est introduite dans le domaine à $x = 0$. Ainsi, les variables introduites dans (D.1) dans le cas général prennent la forme suivante :

$$\begin{aligned} S &\equiv S_1 \\ f(S) &\equiv f_1(S_1) \\ \mathcal{D}(S) &\equiv \mathcal{D}(S_1) \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

Dans le cas où la phase mouillante est déplacée dans le domaine par l'injection d'une phase non-mouillante en $x = 0$, les variables prennent donc la forme suivante :

$$\begin{aligned} S &\equiv S_{nw} \\ f(S) &\equiv f_{nw}(1 - S_{nw}) \\ \mathcal{D}(S) &\equiv \mathcal{D}(1 - S_{nw}) \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

Paramètres	symbol	Cas 1	Cas 2	Cas 3		unité
Porosité	ϕ	0.3	0.4	0.4		[-]
Permeabilité intrinsèque	K	1	2,26	2,26	$\times 10^{-10}$	$[m^2]$
Saturation effective résiduelle en eau	S_{1r}	0	0,144	0,144		[-]
Saturation effective résiduelle en NAPL	S_{nwr}	0	0,069	0,069		[-]
Viscosité dynamique en eau	μ_1	1	1	1	$\times 10^{-3}$	$[Pa.s]$
Viscosité dynamique en NAPL	μ_{nw}	20	3,5	3,5	$\times 10^{-3}$	$[Pa.s]$
Modèle		BC	BC	VG		
Brooks-Corey (BC)	P_0	1000	668	–		$[Pa]$
	λ	2	2,29	–		[-]
Van-Genuchten (VG)	α	–	–	1,1	$\times 10^{-3}$	$[Pa]$
	m	–	–	0,75		[-]

TAB. D.1 – Paramètres utilisés pour les problèmes de transport monodimensionnel

La substitution dans (D.1) conserve le signe du terme de diffusion \mathcal{D} (positif). Ce comportement est lié à l'expression de la vitesse de la phase non mouillante \mathbf{u}_{nw} et du terme $\nabla P_c(1 - S_{nw})$ (gradient de pression capillaire).

D.1.3 Tests numériques

Nous utilisons les données présentées dans (cf. Tab. D.1). Ici, la phase eau est toujours considéré comme étant la phase mouillante alors que la phase non mouillante sera le NAPL. Le premier test utilise le modèle de Brooks-Corey et des données de sol issues de [Helmig 1997].

D.2 Solution analytique de Buckley-Leverett

La forme strictement hyperbolique de l'équation de d'écoulement de deux phases est un cas particulier de l'équation (D.1) pour laquelle $\mathcal{D} \equiv 0$ et qui être résolue analytiquement. Prenons la vitesse totale $u = u(t)$ définie comme une fonction positive et intégrable. Buckley and Leverett ont utilisé une méthode modifiée de caractéristiques (MMOC) afin de dériver une solution analytique au problème de Reimann suivant [Buckley and Leverett 1942] :

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} + u(t) f'(S) \frac{\partial S}{\partial x} = 0, \quad (\text{D.4})$$

avec comme conditions initiales et aux limites, pour toutes valeurs de $t \in [0, \infty[$, resp. $x \in [0, \infty[$:

$$\begin{aligned} S(t, 0) &= S_0 \\ S(0, x) &= S_i \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

L'utilisation des MMOC pour résoudre le problème (D.4), (D.5) est justifié par le fait que la fonction f présente un point d'inflexion. Cette situation fait référence au problème de *Buckley-Leverett* largement discuté et commenté dans la littérature.

D.2.1 Méthode des caractéristiques

La solution analytique du problème de Reimann (D.4) est dérivées en utilisant la méthode des caractéristiques. Une caractéristique est une ligne dans le plan (t, x) où la solution $S(t, x)$ reste constante. Soit $\eta = \eta(t, x)$ la fonction recherchée telle que :

$$\tilde{S}(\eta(t, x)) = S(t, x). \quad (\text{D.6})$$

Une expression dérivée de l'équation (D.6) suivant η donne :

$$\frac{d\tilde{S}}{d\eta} = \frac{\partial S}{\partial t} \frac{dt}{d\eta} + \frac{\partial S}{\partial x} \frac{dx}{d\eta} = 0, \quad (\text{D.7})$$

car la saturation \tilde{S} est supposée constante le long de la caractéristique $\eta(x, t)$. En identifiant les coefficients entre (D.4) et (D.7), on obtient le système d'équations différentielles ordinaires suivant :

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{S}}{d\eta} = 0, \\ \frac{dt}{d\eta} = \frac{1}{\phi}, \\ \frac{dx}{d\eta} = \frac{1}{\phi} u(t) f'(\tilde{S}). \end{cases} \quad (\text{D.8})$$

A partir du système (D.8), il vient :

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{\phi} u(t) f'(\tilde{S}) \left(\frac{\partial t}{\partial \eta} \right)^{-1} = u(t) f'(\tilde{S}) \quad (\text{D.9})$$

L'équation d'évolution (également appelée *rarefaction wave*) est obtenue en intégrant sur t avec $S_i < S_0$ (f étant supposée convexe), soit :

$$x(\tilde{S}, t) = f'(\tilde{S}) \int_0^t u(\tau) d\tau \quad (\text{D.10})$$

La monotonie de la dérivée première de la fonction f notée f' est conditionné par la nature convexe ou concave de la fonction f . Dans ce cas, la fonction f peut être inversée pour obtenir la solution $S(t, x)$. Cette condition n'est pas vérifiée dans l'exemple de Buckley-Leverett et il n'existe donc que des solutions dites *faibles*. Pour déterminer les solutions faibles du problème de Reimann (scalaire) admettant une fonction f non convexe, une condition dite *d'entropie* ou *condition d'Oleinik* doit être considérée. Cette condition propose l'existence d'une solution faible $S(t, x)$ de l'équation (D.4) si toutes les discontinuités (chocs) ont la propriétés suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{f(S) - f(S_i)}{S - S_i} &\leq s \leq \frac{f(S) - f(S_0)}{S - S_0} \text{ for all } S_i \leq S \leq S_0 \\ \text{where } s &= \frac{f(S_f) - f(S_0)}{S_f - S_0}, \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

est la vitesse fractionnelle du front (adimensionnelle) et S_f est la saturation au front constante dans le temps et définie par :

$$f'(S_f) = \frac{f(S_f) - f(S_i)}{S_f - S_i} \quad (\text{D.12})$$

La vitesse du front (choc) est donnée :

$$v_f(t) = s u(t) = \frac{f(S_f) - f(S_0)}{S_f - S_0} u(t) \quad (\text{D.13})$$

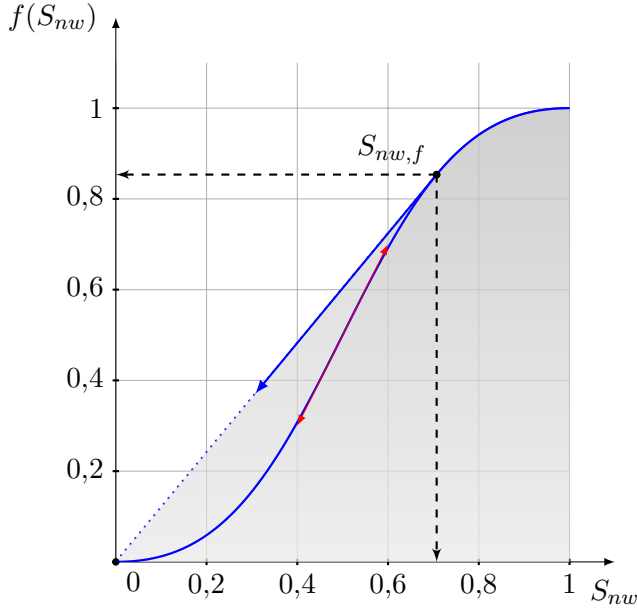


FIG. D.1 – Flux fractionnaire f (point d'inflexion) avec la saturation en huile au front $S_{nw,f}$ (tangente de Welge)

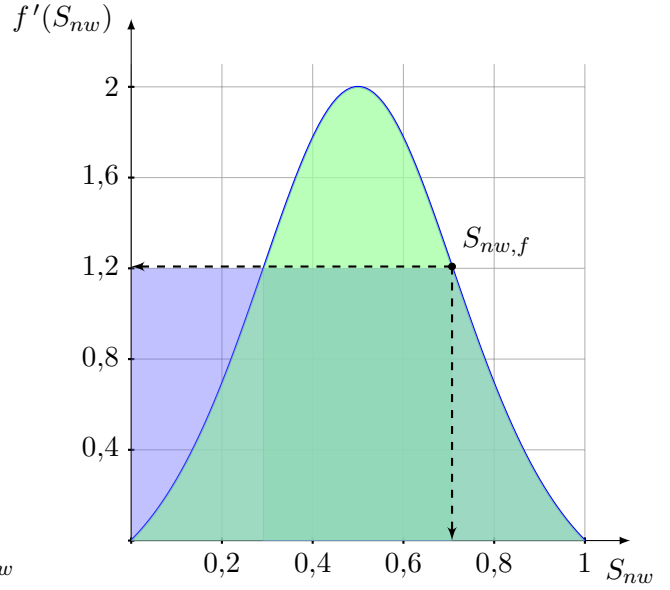


FIG. D.2 – Dérivée du flux fractionnaire f' en fonction de la saturation effective en huile

D.2.2 Solutions analytiques

La valeur de S_f est déterminée à partir de l'équation (D.12). Lorsque la saturation au front $S_f < S_0$, la solution du problème de Riemann est typiquement celle d'une onde de choc avec une zone en amont du choc qui décroît doucement (*rarefaction wave*).

Remarque : Concernant le cas particulier $S_f > S_0$, la solution obtenue est celle de Rankine-Hugoniot c.a.d. f ne possède aucun point d'inflexion ($S_f = S_i$). La position du front est alors décrite par :

$$x_{RH,f}(t) = s_{RH} \int_0^t u(\tau) d\tau = \frac{f(S_0) - f(S_i)}{S_0 - S_i} \int_0^t u(\tau) d\tau \quad (\text{D.14})$$

Il est possible de résumer les solutions obtenues pour le problème de Riemann (D.4) :

$$\begin{aligned} S_f \leq S_0, \quad & x(t) = f'(S) \int_0^t u(\tau) d\tau, \quad S_0 \leq S \leq S_f, \\ & S(t, x) = S_0 \quad \forall x \leq x_0(t), \\ & S(t, x) = S_i \quad \forall x > x_f(t). \\ S_f > S_0, \quad & S(t, x) = S_0 \quad \forall x \leq x_{RH}(t), \\ & S(t, x) = S_i \quad \forall x > x_{RH}(t). \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

D.2.3 Application au déplacement eau-solvant chlorés avec prise en compte de la gravité

Les équations régissant l'écoulement monodimensionnel (vertical suivant z) eau (w) huile (nw) sans effet capillaire :

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial S_1}{\partial t} + \frac{\partial v_1}{\partial z} &= 0, & \text{avec } v_1 &= -K \frac{kr_1}{\mu_1} \left(\frac{\partial P}{\partial z} - \rho_1 g_z \right), \\ \phi \frac{\partial S_{nw}}{\partial t} + \frac{\partial v_{nw}}{\partial z} &= 0 & \text{avec } v_{nw} &= -K \frac{kr_{nw}}{\mu_{nw}} \left(\frac{\partial P}{\partial z} - \rho_{nw} g_z \right), \end{aligned} \quad (\text{D.16})$$

ou la vitesse de chaque phase est exprimée à partir de la loi de Darcy Muskat (Darcy généralisé). Ici les flux fractionnaires sont exprimés comme le rapport de la vitesse de la phase sur la vitesse totale $v_i = v_i/v$, $i = w, nw$ avec $v = v_1 + v_{nw}$ et les mobilités $\lambda_i = kr_i/\mu_i$. En exprimant la vitesse totale des deux phases, on obtient :

$$\begin{aligned} v &= -K \frac{kr_1}{\mu_1} \left(\frac{\partial P}{\partial z} - \rho_1 g_z \right) - K \frac{kr_{nw}}{\mu_{nw}} \left(\frac{\partial P}{\partial z} - \rho_{nw} g_z \right), \\ \left(\frac{\partial P}{\partial z} - \rho_1 g_z \right) &= -\frac{v + K \lambda_1 g_z (\rho_1 - \rho_{nw})}{K(\lambda_1 + \lambda_{nw})}. \end{aligned} \quad (\text{D.17})$$

Ainsi, une expression du flux fractionnaire f_1 est donnée :

$$f_1 = \frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_{nw}} \left(1 + \frac{K(\rho_1 - \rho_{nw})\lambda_1 g_z}{v} \right) \quad (\text{D.18})$$

Ainsi l'équation régissant le déplacement de la phase aqueuse s'écrit ($v = cste$) :

$$\phi \frac{\partial S_1}{\partial t} + v \frac{\partial f_1}{\partial z} = 0 \iff \frac{\partial S_1}{\partial t} + \frac{v}{\phi} \frac{df_1}{dS_1} \frac{\partial S_1}{\partial z} = 0 \quad (\text{D.19})$$

D.2.4 Implémentation de la méthode

On considère l'écoulement à vitesse totale v constante avec la condition initiale $S_{nw} = S_{nw}(t=0, x)0$ et les données sont présentées dans Tab. D.3. La vitesse du front v_f est simplement donnée par (D.13), soit :

$$v_{nw,f} = \frac{v}{\phi} \frac{f(S_{nw,f})}{S_{nw,f}}, \quad (\text{D.20})$$

et la saturation au front en huile $S_{nw,f}$ est donnée par la solution de l'équation :

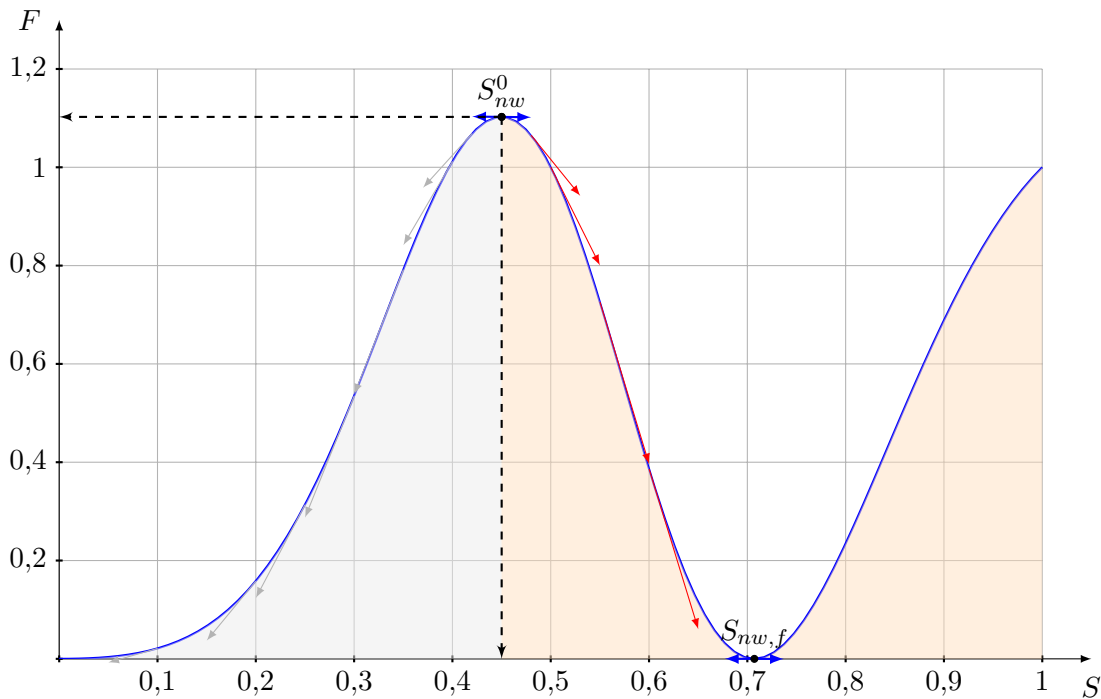
$$F(S_{nw,f}) = \frac{1}{2} \left(\left. \frac{df_{nw}}{dS_{nw}} \right|_{S_{nw,f}} - \frac{f_{nw}(S_{nw,f})}{S_{nw,f}} \right)^2 = 0 \quad (\text{D.21})$$

Dans l'équation (D.21), nous introduisons la fonction objectif F . Le minimum de la fonction F , si il existe et qu'il est unique est atteint pour $S_{nw,f}$. L'existence et l'unicité d'un minimum global sur F est assuré par la nature convexe de la fonction objectif.

L'algorithme de recherche du zero de la fonction objectif F est basée sur la méthode de Householder utilisé pour les fonctions d'une variable réelle dérivables deux fois et à dérivée seconde continue (C^2). L'algorithme est itératif et de convergence cubique. il se généralise à des

Paramètres	symbole	valeur	unité	
Porosité	ϕ	0.3	$[-]$	
Masse volumique du NAPL	ρ_{nw}	1456	$[kg/m^3]$	
Masse volumique de l'eau	ρ_1	1000	$[kg/m^3]$	
Permeabilité intrinsèque	K	1×10^{-12}	$[m^2]$	
Saturation effective résiduelle en eau	S_{1r}	0.2	$[-]$	
Saturation effective résiduelle en NAPL	S_{nwr}	0	$[-]$	
Viscosité dynamique en eau	μ_1	1×10^{-3}	$[Pa.s]$	
Viscosité dynamique en NAPL	μ_{nw}	0.56×10^{-3}	$[Pa.s]$	
Vitesse totale	v	0.3	$[m/j]$	
Constante de gravité	g_z	0	$[m/s^2]$	
Modèle Power Law $[-]$				
	kr_1^0	kr_{nw}^0	n_1	n_{nw}
	1	0.64	2	2

TAB. D.2 – Paramètres utilisés pour le problèmes de transport monodimensionnel avec gravité

FIG. D.3 – Fonction objectif F pour la saturation effective en NAPL S_{nw}

fonctions de classe C^n avec une convergence d'ordre $n + 1$. Soit F la fonction objectif de classe C^2 et $S_{nw,f}$ un zéro de F . La méthode de Householder consiste à itérer :

$$S_{nw}^{k+1} = S_{nw}^k - \frac{F(S_{nw}^k)}{F'(S_{nw}^k)}(1 + h_k), \quad (\text{D.22})$$

avec

$$h_k = \frac{F(S_{nw}^k)F''(S_{nw}^k)}{2(F'(S_{nw}^k))^2}. \quad (\text{D.23})$$

On retrouve l'itération de Halley en changeant $(1 + h_k)$ par $1/(1 - h_k)$ pour $h_k \ll 1$ dans la relation de récurrence (D.24). Plus généralement, la méthode s'écrit pour des fonctions de classes C^{n+1} :

$$S_{nw}^{k+1} = S_{nw}^k + (n + 1) \frac{\left(\frac{1}{F}\right)^{(n)}(S_{nw}^k)}{\left(\frac{1}{F}\right)^{(n+1)}(S_{nw}^k)}, \quad (\text{D.24})$$

ou on retrouve la méthode de Newton pour $n = 0$ et la méthode de Halley pour $n = 1$.

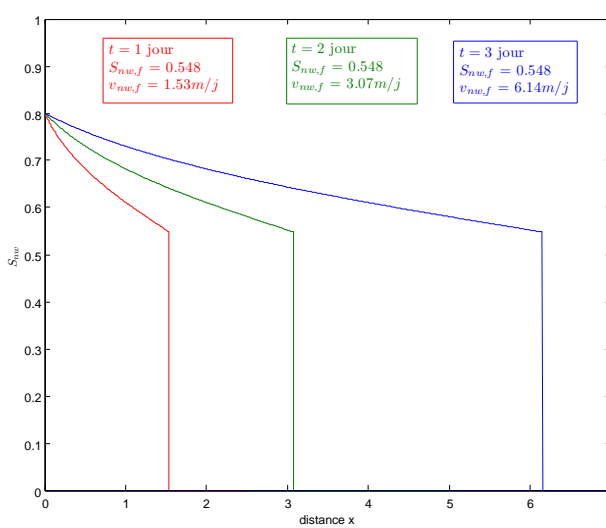


FIG. D.4 – Saturation en huile et vitesse du front se déplaçant au cours du temps obtenu pour $n = 2$.

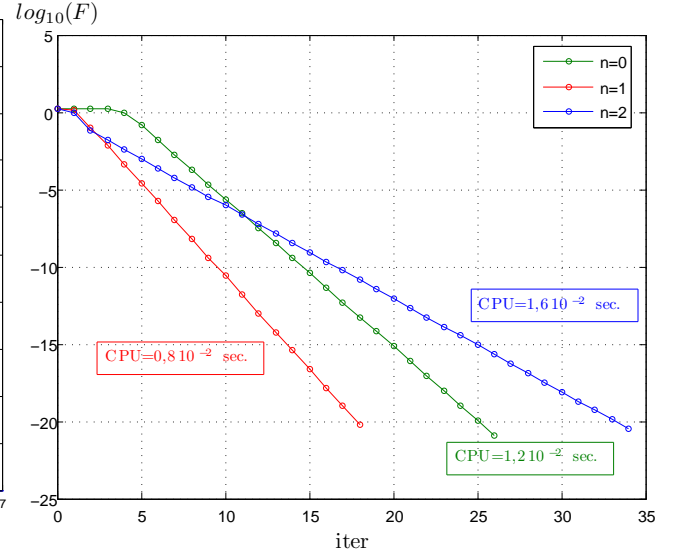


FIG. D.5 – Fonction objectif et temps CPU en fonction du nombre d'itération pour trois valeurs de n

Résultats : Le profil analytique obtenu à partir des données issues de (cf. Tab. D.3) est tracé pour trois temps différents : 1, 2 et 3 jour. Trois schémas itératifs différents sont testés (voir (D.24)) pour trois valeurs de n différentes. Le schéma le plus rapide est celui pour $n = 2$ qui converge vers la saturation $S_{nw,f}$ deux fois plus vite que le schéma classique de Newton. Ce schéma nécessite néanmoins cinq évaluations de la fonction objectif F , trois de la dérivée première F' , deux de la seconde et une de la dérivée d'ordre 3. Pour une tolérance fixée à 10^{-20} , les trois schémas convergent vers la même solution $S_{nw,f} = 0.548$.

D.3 Solution de McWhorther-Sunada

D.4 Formulation du problème

La solution exacte de McWhorther-Sunada décrivant les écoulements diphasiques monodimensionnels est dérivée dans cette section. Considérons le problème déjà introduit dans (D.1) pour $S = (S(t, x)$ et $x \in [0, \infty[$ et $t \in [0, \infty[$. La condition initiale à $t = 0$ est imposée de manière uniforme sur l'ensemble du domaine $S(0, x) = S_i$. Deux conditions de Dirichlet sont imposées à $S(t, x = 0) = S_0$ et $S(t, x_L) = S_i$ pour L suffisamment grand. Nous introduisons la notion de vitesse totale de déplacement appliquée à l'écoulement de McWhorther-Sunada.

La phase en déplacement est introduite dans le domaine à $x = 0$ avec une vitesse :

$$u_{nw}(0, t) = A g(t) = A t^{-\frac{1}{2}}, \quad (\text{D.25})$$

avec $A > 0$. La forme en $t^{-\frac{1}{2}}$ prise par la fonction g est liée à la dérivation de la solution exacte. La vitesse relative à l'autre phase déplacée à $x = 0$ et $x = \infty$ n'est pas connue. La frontière à $x = \infty$ est considérée comme semi-perméable caractérisé par un paramètre (scalaire) $R \in [0, 1]$. La vitesse totale u du front est ainsi définie :

$$u = u_{nw} + u_1, \quad (\text{D.26})$$

En fonction de la perméabilité imposée à la frontière $x = \infty$, il vient :

$$u(t) = R A g(t), \quad (\text{D.27})$$

avec $R \in [0, 1]$, car la vitesse varie de 0 à $A g(t)$. La vitesse totale est maximale pour $R = 1$ soit $u(t) = A g(t)$ dans le cadre d'un déplacement unidirectionnel. Lorsque la vitesse totale est nulle (soit $R = 0$), la phase déplacée est drainée uniquement au niveau de la frontière d'entrée soit $x = 0$; l'écoulement est alors bidirectionnel. En introduisant une membrane *semi-perméable*, il est possible de balayer toute les valeurs de $R \in [0, 1]$ ainsi généraliser le problème original de McWhorther & Sunada. Une expression de la vitesse de la *phase en déplacement* est donnée par :

$$u_{nw}(t) = u f - \mathcal{D} \frac{\partial S}{\partial x}, \quad (\text{D.28})$$

qui peut s'écrire à $S(t, x = 0) = S_0$, en tenant compte des remarques précédentes :

$$u_{nw}(t) = R A g(t) f(S_0) - \mathcal{D}(S_0) \frac{\partial S}{\partial x}(t, x = 0) \iff \frac{\partial S}{\partial x}(t, x = 0) = -A t^{-\frac{1}{2}} \frac{1 - R f(S_0)}{\mathcal{D}(S_0)} \quad (\text{D.29})$$

Remarque : La phase en déplacement est celle de la phase non mouillante. Une expression analogue peut être énoncé lorsque la phase en déplacement est la phase mouillante. L'équation aux dérivées partielle à résoudre est donnée :

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} = -A R t^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial f}{\partial x}(S) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{D}(S) \frac{\partial S}{\partial x} \right) \quad (\text{D.30})$$

est résolue avec comme inconnue $S = S(t, x)$ avec comme conditions initiale et aux limites, pour $S_0 > S_i$:

$$\begin{aligned} S(t, 0) &= S_0, \\ S(t, x = \infty) &= S_i, \\ S(t = 0, x) &= S_i. \end{aligned} \quad (\text{D.31})$$

Deux fonctions sont introduites : la *fonction de flux fractionnaire* $F(t, x)$:

$$F(t, x) = R \frac{f(S) - f(S_i)}{1 - Rf(S_i)} - \frac{\mathcal{D}(S)}{Ag(t)(1 - Rf(S_i))} \frac{\partial S}{\partial x}, \quad (\text{D.32})$$

et la *fonction de flux fractionnaire normalisée* $\varphi(S)$:

$$\varphi(S) = R \frac{f(S) - f(S_i)}{1 - Rf(S_i)} \quad (\text{D.33})$$

Pour $t \rightarrow 0$, on a $g(t) \rightarrow \infty$ et donc $F(t \rightarrow 0, x) = F(S_i) = 0$. Lorsque la fonction F est connue, il est possible d'obtenir par différentiation la valeur de sa dérivée F' et ainsi la solution du problème :

$$x(t, S) = R \frac{1 - Rf(S_i)}{\phi} \frac{dF}{dS}(S) \int_0^t A\tau^{-\frac{1}{2}} d\tau, \quad (\text{D.34})$$

pour $S \in [S_i, S_0]$ et parce que $F' = \frac{dF}{dS}$ peut être inversé. Le problème original ne peut être résolu sous la forme énoncé dans (D.32) car il n'existe pas de relation entre A et S_0 . Sunada & McWhorter on donc proposé d'intégrer l'équation différentielle ordinaire suivante :

$$F(S) = 1 - \frac{\phi}{2A^2(1 - Rf(S_i))^2} \int_S^{S_0} \frac{(\nu - S)\mathcal{D}(\nu)}{(F(\nu) - \varphi(\nu))} d\nu, \quad (\text{D.35})$$

avec comme condition $F'(S_0) = 0$ et $F(S_0) = 1$. En écrivant que pour $S = S_i$, la fonction flux fractionnaire F donne :

$$F(S_i) = 1 - \frac{\phi}{2A^2(1 - Rf(S_i))^2} \int_{S_i}^{S_0} \frac{(\nu - S_i)\mathcal{D}(\nu)}{(F(\nu) - \varphi(\nu))} d\nu = 0, \quad (\text{D.36})$$

soit

$$A^2 = \frac{\phi}{2(1 - Rf(S_i))^2} \int_{S_i}^{S_0} \frac{(\nu - S_i)\mathcal{D}(\nu)}{(F(\nu) - \varphi(\nu))} d\nu. \quad (\text{D.37})$$

En partant de (D.37), il est possible de réécrire (D.35) tel que :

$$F(S) = 1 - \frac{\int_S^{S_0} \frac{(\nu - S)\mathcal{D}(\nu)}{(F(\nu) - \varphi(\nu))} d\nu}{\int_{S_i}^{S_0} \frac{(\nu - S_i)\mathcal{D}(\nu)}{(F(\nu) - \varphi(\nu))} d\nu}. \quad (\text{D.38})$$

et ainsi une expression de sa dérivée donne

$$F'(S) = \frac{\int_S^{S_0} \frac{\mathcal{D}(\nu)}{(F(\nu) - \varphi(\nu))} d\nu}{\int_{S_i}^{S_0} \frac{(\nu - S_i)\mathcal{D}(\nu)}{(F(\nu) - \varphi(\nu))} d\nu}. \quad (\text{D.39})$$

En suivant Sunada & McWhorter, la solution $F(S)$ est déterminée de manière itérative à partir de l'expression (D.35) soit :

$$F^{k+1}(S) = 1 - \frac{\int_S^{S_0} \frac{(\nu - S)\mathcal{D}(\nu)}{(F^k(\nu) - \varphi(\nu))} d\nu}{\int_{S_i}^{S_0} \frac{(\nu - S_i)\mathcal{D}(\nu)}{(F^k(\nu) - \varphi(\nu))} d\nu}. \quad (\text{D.40})$$

Une première valeur initiale est prise pour $k = 0$ tq. $F^0 = 1$. L'itéré F^k est considéré comme étant solution du problème précédent si la norme $\|F^{k+1} - F^k\|_{L_\infty} < \epsilon_F$. Comme l'expression de F issue de (D.35) est évaluée de manière numérique, on parle de *solution quasi-analytique*. La résolution est très rapide pour tous les écoulements bidirectionnels soit $R = 0$. Cependant, des difficultés apparaissent lorsque S_0 et R sont proches de 1. L'implémentation numérique des intégrales est basée sur une formule de Newton-Cotes à l'ordre 1.

Schéma itératif modifié : Une analyse du schéma itératif pour le premier pas montre que la résolution originale des formes intégrales n'est pas toujours possible et génère des instabilités numériques. Notons l'intégrande G du numérateur de (D.39) soit :

$$G = \frac{\mathcal{D}}{F - \varphi}, \quad (\text{D.41})$$

l'équation (D.39) peut être ré écrite de manière plus pratique :

$$F(S) = \frac{\mathcal{D}(S)}{G(S)} + \varphi(S) = 1 - \frac{\int_S^{S_0} (\nu - S)G(\nu)d\nu}{\int_{S_i}^{S_0} (\nu - S_i)G(\nu)d\nu}. \quad (\text{D.42})$$

Deux schémas itératifs peuvent être déduit de (D.42); le *schéma A* qui donne :

$$G^{k+1}(S) = \mathcal{D}(S) + G^k(S) \left(\varphi(S) + \frac{\int_S^{S_0} (\nu - S)G^k(\nu)d\nu}{\int_{S_i}^{S_0} (\nu - S_i)G^k(\nu)d\nu} \right), \quad (\text{D.43})$$

et un *schéma B* :

$$G^{k+1}(S) = \left[\mathcal{D}(S) + G^k(S)\varphi(S) \right] \left(1 - \frac{\int_S^{S_0} (\nu - S)G^k(\nu)d\nu}{\int_{S_i}^{S_0} (\nu - S_i)G^k(\nu)d\nu} \right)^{-1}, \quad (\text{D.44})$$

avec comme première valeur $G^0 = \frac{\mathcal{D}}{1 - \varphi}$, (en suivant la valeur initiale $F^0 = 1$). Pour toute valeur de $G(S) > 0$ pour $S \in [S_i, S_0]$, la valeur de F et de sa dérivée F' est donnée par (D.41) et (D.39) respectivement soit :

$$F(S) = \frac{\mathcal{D}(S)}{G(S)} + \varphi(S) \text{ et } F'(S) = \frac{\int_S^{S_0} G(\nu)d\nu}{\int_{S_i}^{S_0} (\nu - S_i)G(\nu)d\nu}. \quad (\text{D.45})$$

Le schéma modifié avec les deux variantes A et B est particulièrement bien adaptée pour les déplacements unidirectionnels ($R = 1$). La croissance monotone de la fonction G (soit $G^k \leq G^{k+1}$) garantie une résolution rapide de F . La méthode modifiée marche là où la méthode originale s'interrompt. Les approximations successives de G diminue avec la norme L_∞ mais

Paramètres	symbole	cas 1	cas 2	cas 3	cas 4	cas 5		unité
Porosité	ϕ	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3		$[-]$
Permeabilité intrinsèque	K	1	1	1	1	1	$\times 10^{-10}$	$[m^2]$
Erreur sur A	ϵ_A	10^{-10}	10^{-20}	10^{-20}	10^{-20}	10^{-20}		$[-]$
Saturation NAPL	S_0	0,999	0,999	0,99	0,8	0,8		$[-]$
Viscosité dynamique en eau	μ_1	1	1	1	1	1	$\times 10^{-3}$	$[Pa.s]$
Viscosité dynamique en NAPL	μ_{nw}	20	20	20	20	20	$\times 10^{-3}$	$[Pa.s]$
R		1	0.8	0.8	1	0.8		

TAB. D.3 – Paramètres utilisés pour le problèmes de McWhorter-Sunada, approche itérative modifiée

le nombre d'itérations requise augmente considérablement lorsque S_0 et R tendent vers 1. La convergence de A converge plus lentement que celle de F . Le critère sur A soit $|A^k - A^{k+1}| < \epsilon_A$ est choisi car la convergence de A est plus lente que celle de F . Les essais numériques ont été menés avec une viscosité en NAPL μ_{nw} importante pour montrer la robustesse de l'approche modifiée là ou l'approche originale s'interrompt dès la première itération (division par zéro). La valeur S_i a été fixé à zéro.

Expériences numériques : Cinq cas ont été étudié avec différentes valeurs de R et de S_0

Remarque : L'approche adoptée ici permet d'allouer des valeurs négative à R . Cette généralisation pour $R \in [-1, 1]$ permettra d'appliquer le schéma modifié pour élaborer des solutions exacte pour des milieux poreux hétérogènes.

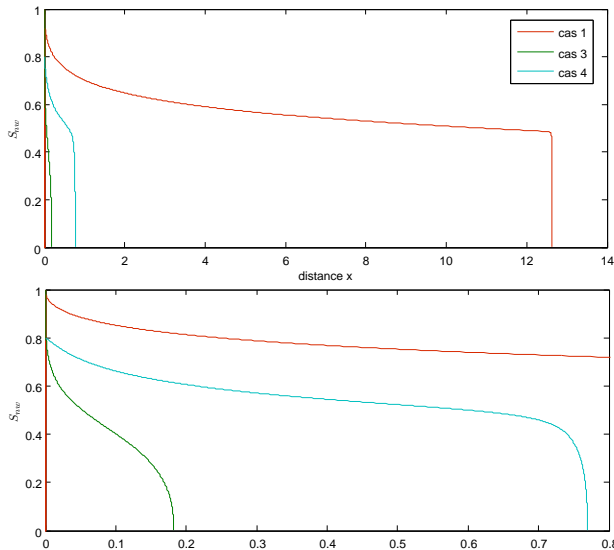


FIG. D.6 – Saturation en huile et vitesse du front se déplaçant au cours du temps obtenu pour $n = 2$.

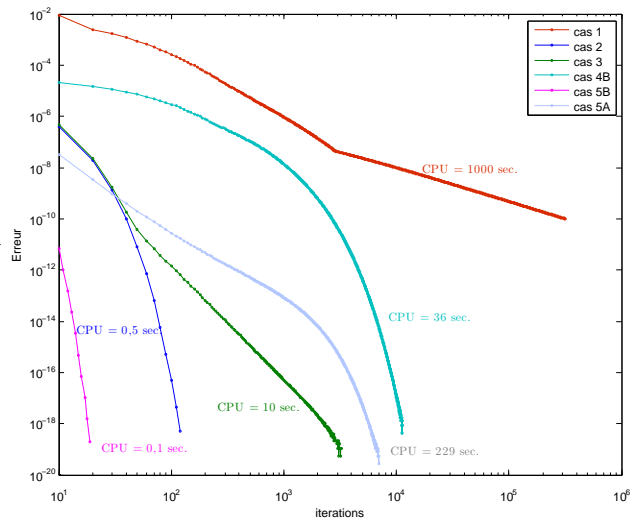


FIG. D.7 – Fonction objectif et temps CPU en fonction du nombre d'itération pour trois valeurs de n