HAL
open science

Schémas numériques instationnaires pour des écoulements multiphasiques multiconstituants dans des bassins sédimentaires

Lionel Nadau

To cite this version:

Lionel Nadau. Schémas numériques instationnaires pour des écoulements multiphasiques multiconstituants dans des bassins sédimentaires. Mathématiques [math]. Université de Pau et des Pays de l'Adour, 2003. Français. NNT : . tel-00003624

HAL Id: tel-00003624

https://theses.hal.science/tel-00003624

Submitted on 7 Nov 2003

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

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

Schémas numériques instationnaires pour des écoulements multiphasiques multiconstituants dans des bassins sédimentaires

Lionel Nadau

Septembre 2003

à mes parents,

à mes sœurs Sandrine et Christelle,

à une touillette...

Remerciements

Ce travail a été effectué en collaboration avec la Division Informatique Mathématiques Appliquées de l'Institut Français du Pétrole.

Je tiens à remercier ***Roland MASSON*** *et* ***Sylvie WOLF*** *pour avoir initié ce projet et m'avoir guidé tout au long de cette thèse.*

Je remercie ***Gérard GAGNEUX*** *d'avoir accepté de présider le jury.*

Faysall BENKHALDOUN *et* ***Alain BOURGEAT*** *ont accepté d'être mes rapporteurs. Je leur sais gré de l'intêret qu'ils ont porté à ce travail ainsi que de leurs remarques constructives.*

Je remercie à nouveau ***Roland MASSON*** *et* ***Sylvie WOLF*** *d'avoir accepté de participer au jury.*

J'exprime spécialement toute ma gratitude à ***Mohamed AMARA*** *qui m'a fait l'honneur d'être mon directeur de thèse et qui m'a guidé dans une formation de mathématiques appliquées.*

Je tiens à remercier également ***David TRUJILLO*** *pour ses conseils éclairés et son soutien au cours de toutes les étapes de ce travail.*

Je remercie ***Chantal et Michèle*** *pour leur aide précieuse dans les démarches administratives.*

Je remercie particulièrement Fabien, Paul, Anne-Marie, Alexis, Marie, Frédéric, Laure, Olivier, Caroline, Jon, Nadia, Carine, Paul, Karine, Lætitia, Emilie, Patrick, Bertrand, Ulrich, Bruno, Jean-Marc, Sandrine, Carole, Jérôme, Florence, René, Monique, Christian, Pierre, Véronique, Sylvie, Jean-François, Christophe, Guillaume, Laurent, Christelle, Karinne, Laurent, Vincent, Thomas pour leur soutien et amitié.

Une pensée va vers Claudine Lavie qui m'a initié aux joies des mathématiques. Je l'en remercie.

Enfin, j'exprime toute ma reconnaissance à ma famille sans laquelle cette thèse n'aurait pu aboutir.

Table des matières

1 Introduction **1**

2 Présentation et modélisation des phénomènes impliqués dans un bassin sédimentaire **9**

2.1 Formation d'un bassin sédimentaire: les phénomènes mis en jeu 9

2.1.1 Création d'un bassin 9

2.1.2 La sédimentation 11

2.1.3 La compaction 12

2.1.4 La température 13

2.1.5 Le craquage et la migration des fluides 13

2.2 Modélisation des phénomènes d'un bassin 16

2.2.1 Modélisation de la compaction 16

2.2.2 Modélisation du craquage 17

2.2.3 Modélisation des écoulements 19

3 Modèles d'écoulement de phases **27**

3.1 Introduction 27

3.2 Grandeurs et dépendances 29

3.2.1 Présentation des grandeurs et de leur dépendance 29

3.2.2 Relations entre certaines grandeurs 30

3.3 Modèle d'écoulement en Masses-Saturations 32

3.3.1 Modélisation mathématique 32

3.3.2 Comparaison du modèle d'écoulement en masses-saturations avec un modèle classique d'écoulement compositionnel issu des milieux de la modélisation des réservoirs 35

3.4 Modèle en masse de mélange 37

3.5 Modèle en masses de composés 41

3.5.1 modélisation mathématique 41

3.5.2 Comparaison du modèle en masses de composés avec un modèle compositionnel issu de la modélisation des réservoirs 44

3.6 Les hypothèses et paramètres d'étude 48

3.6.1 Le domaine d'étude 48
3.6.2 Les hypothèses d'étude 49
3.6.3 Les paramètres d'étude 50

4 Techniques numériques utilisées 55
4.1 Présentation générale des Volumes Finis (VF) 55
4.2 Le schéma de discrétisation en espace (VF5) 56
4.2.1 Le maillage 56
4.2.2 Un exemple de volumes finis: le VF5 59
4.3 Discrétisation en temps 61
4.3.1 Calcul de la porosité 61
4.3.2 Splitting du terme source 62
4.3.3 Schéma retenu pour le calcul des écoulements 63
4.3.4 Découplage Thermodynamique-Transport 65
4.3.5 Résumé de la discrétisation en temps 66

5 Comparaison des trois modèles d'écoulement 67
5.1 Introduction 67
5.2 Le modèle en Masses-Saturations 69
5.2.1 Discrétisation du modèle 69
5.2.2 Résultats numériques 71
5.2.3 Limites du modèle 75
5.3 Le modèle en masse de mélange 77
5.3.1 Résultats numériques 79
5.3.2 Limites du modèle 83
5.4 Le modèle en masses de composés 85
5.4.1 Discrétisation spatio-temporelle 85
5.4.2 Résultats numériques 86
5.4.3 Limites du modèle 96
5.5 Conclusion 97

6 Une approche de découplage 99
6.1 Motivation et principe 99
6.2 Une première approche de l'équation 100
6.2.1 Description du modèle à résoudre 100
6.2.2 Commentaires et remarques sur le nouveau schéma 102
6.2.3 Résultats numériques 106
6.3 Une seconde approche de l'équation 123
6.3.1 Nouvelle équation pour le module thermodynamique à masses et volume constants 123
6.3.2 Un cas particulier pour la nouvelle équation thermodynamique à masses et volume constants 125

6.3.3 Résultats numériques 127
6.3.4 Loi de densité modifiée 140
6.4 Conclusion 141

7 Gestion du pas de temps 163
7.1 introduction 163
7.2 Raffinements en temps et en espace 163
7.2.1 Simulation sur un maillage 10×10 sans raffinement en temps 163
7.2.2 Raffinement en temps sur un maillage 10×10 165
7.2.3 Raffinement en temps sur un maillage 10×20 166
7.2.4 Raffinement en temps sur un maillage 10×40 168
7.2.5 Raffinement en temps sur un maillage 20×10 170
7.2.6 Raffinement en temps sur un maillage 40×10 171
7.2.7 Raffinement en temps sur un maillage 20×20 172
7.2.8 Raffinement en temps sur un maillage 40×40 173
7.2.9 Conclusion 173
7.3 Motivation 200
7.4 Mise en œuvre d'un pas adaptatif 201
7.4.1 Une adaptation empirique 201
7.4.2 Limites et inconvénients de ce pas de temps 203
7.5 Nouvelle stratégie de pas de temps 205
7.5.1 Origine 205
7.5.2 Présentation de la stratégie 205
7.5.3 Simulation 207
7.6 Critique sur la mise en œuvre 209
7.7 Schéma du raffinement local en temps 210
7.7.1 Critère de choix des zones à raffiner 212
7.7.2 Algorithme du schéma numérique 214
7.8 Résultats numériques 215
7.8.1 Un cas incompressible 215
7.8.2 Un cas compressible 221
7.8.3 Description de la simulation 221
7.8.4 Résultats et conclusions 221
7.9 Conclusion 221

8 Estimateurs *a posteriori* pour une méthode de volumes finis 227
8.1 Introduction 227
8.2 Construction du maillage 228
8.3 Estimateurs *a posteriori* pour une équation elliptique 229
8.3.1 Discrétisation du problème 229
8.3.2 Estimateurs *a posteriori* 231
8.3.3 Tests numériques 234

8.4 Estimateurs *a posteriori* pour une équation parabolique 238
8.4.1 Discrétisation du problème 238
8.4.2 Tours d'horizon et rappels 240
8.4.3 Estimateur η_n pour le problème semi-discrétisé 245
8.4.4 Estimateur $\eta_{n,V}$ pour le schéma sans concentration de masse 249
8.4.5 Estimateur $\eta_{n,V}$ pour le problème initial 255
8.4.6 Tests numériques 259
8.4.7 Estimateurs *a posteriori* locaux en temps 272
8.5 Conclusion 276

9 Conclusion et perspectives 277

Chapitre 1

Introduction

La modélisation des bassins sédimentaires permet de retracer l'histoire des hydrocarbures depuis leur génèse. Elle prend en compte de nombreux phénomènes physiques et géologiques comme l'érosion, la compaction, la formation des failles, le jeu tectonique des plaques, les réactions chimiques, *etc.* Cette modélisation est primordiale en engineering pétrolier car elle permet en particulier une sélection efficace des sites de forage. D'autres domaines sont aussi couverts par cette modélisation comme l'étude des nappes phréatiques, des risques de pollution dans le sol par un ou plusieurs contaminants, des recherches minières...
Le but de cette thèse est l'étude de schémas numériques en temps pour la prise en compte des phénomènes liés à un bassin sédimentaire et tout particulièrement l'étude des écoulements des fluides dans ce bassin depuis leur génèse et jusqu'à leur piégeage dans les roches magasins.
La difficulté dans l'étude des écoulements des fluides est la prise en compte de la thermodynamique qui régit les échanges de constituants entre les phases. Cette thermodynamique est très coûteuse en temps de calcul du fait de la complexité des phénomènes simulés et pénalise donc le reste de la simulation. On cherche donc a établir un schéma numérique qui soit stable, robuste, peu côuteux en temps calcul. Pour ce faire, on essayera de limiter au maximum les appels à ce module thermodynamique. Afin de pouvoir satisfaire à toutes ces contraintes, on reformule le système d'équations qui permet de simuler ces écoulements par rapport à celui qui est usuellement utilisé pour la simulation des écoulements des fluides dans les réservoirs.
Ayant présenté les objectifs de la thèse, on présente maintenant le plan détaillé de chaque chapitre de la thèse.

Dans le premier chapitre, on présente tout d'abord un bassin sédimentaire en exposant succinctement les principaux phénomènes et mécanismes que l'on va modéliser et étudier par la suite. Dans la deuxième partie de ce chapitre, on présente la modélisation mathématique des phénomènes de compaction d'un bassin, du craquage primaire et du craquage secondaire (phénomène de génération des hydrocarbures) et enfin un modèle de migra-

tion de ces hydrocarbures dans le bassin. Ce modèle d'écoulement est directement issu de la modélisation des écoulements dans un réservoir pétrolier. La différence entre la modélisation d'un réservoir et celle d'un bassin est la loi de porosité, l'échelle de temps (qui est de plusieurs millions d'années) et d'espace (des centaines de kilomètres). Ce modèle est le point de départ des modèles étudiés par la suite.

Le deuxième chapitre présente les trois modélisations retenues pour l'étude des écoulements. La première modélisation est une formulation en masses-saturations. Cette formulation permet de réduire le nombre d'inconnues par rapport à la modélisation utilisée pour décrire les écoulements dans les réservoirs grâce à l'introduction d'une nouvelle grandeur thermodynamique appelée cœfficient de répartition. Cette grandeur thermodynamique, que l'on note β, exprime la répartition (ou de façon plus simple, le pourcentage) de la masse du constituant au sein de toutes les phases présentes. Cette notion est différente de celle des fractions massiques qui exprime la répartition (ou pourcentage) de tous les constituants présents dans une phase au sein de cette phase. Il existe toutefois une relation entre ces deux quantités. Une fois exposée la modélisation du modèle en masses-saturations, on le compare avec le modèle compositionnel usuel de modélisation des écoulements dans les réservoirs. Il ressort de cette comparaison, outre le fait d'un nombre moins important d'inconnues comme on l'a déjà signalé, une plus grande facilité de la prise en compte des changements de phase au sein du bassin. En effet, la modélisation en masses-saturations ne change pas de type d'inconnue selon les états de phase des zones du domaine contrairement au modèle compositionnel développé dans le milieu de la modélisation des réservoirs. On présente ensuite un deuxième modèle en masse de mélange qui permet de réduire encore le nombre d'inconnues par rapport au modèle en masses-saturations. On a pu, dans cette formulation, éliminer les saturations de la modélisation comme inconnues principales. Cependant, les saturations restent présentes dans la modélisation par l'intermédiaire des perméabilités relatives. Le dernier modèle, appelé modèle en masses de composés, garde le même nombre d'inconnues que le modèle en masse de mélange, mais permet de s'affranchir de la loi de densité de mélange en écrivant de manière différente la loi de conservation du volume poreux. Enfin, pour terminer ce chapitre, on présente les hypothèses simplificatrices appliquées à tous ces modèles: la négligence de la pression capillaire, pas de dissolution des constituants hydrocarbures dans la phase eau et pas de dissolution du constituant eau dans les phases hydrocarbures (ceci n'est pas une hypothèse très contraignante puisqu'elle est observée de façon naturelle), deux phases hydrocarbures et deux constituants hydrocarbures qui peuvent se répartir au sein des phases (cette hypothèse tient plus du fait de ne pas avoir de module thermodynamique prenant en compte plusieurs constituants et plusieurs phases que de problèmes techniques de mise en œuvre), une température constante au cours du temps (hypothèse très forte du fait du temps retenu pour la simulation), une compaction simplifiée qui est incluse dans la loi de porosité et enfin une simulation sur un domaine en deux dimensions.

Le troisième chapitre est consacré en premier lieu aux techniques de discrétisation en

temps et en espace que l'on a retenues pour l'étude des différents modèles. La première partie de ce chapitre est consacré à un rappel sur la méthode des volumes finis et son application sur le cas du Laplacien. On ne s'étend pas sur cette méthode puisque ce n'est pas le but de la thèse. Toutefois, le fait d'avoir retenu une méthode de volumes finis différences finies cinq points, impose un maillage cartésien du domaine. En effet, comme le montre I.Faille [31], les volumes finis différences finies cinq points (et neuf points) sont mal adaptés pour des maillages déformés. La deuxième partie de ce chapitre est consacrée aux techniques de discrétisation en temps des équations qui ont guidé cette thèse. On décrit, d'abord la méthode de splitting du terme source, puis ensuite la méthode de résolution en temps des équations avec la technique IMPES qui a inspiré nos méthodes de discrétisation. Cette technique, dont le principe est de découpler les équations en prenant la pression en implicite et les grandeurs intervenant dans les flux (qui dépendent essentiellement des saturations) de façon explicite, est présentée sur un cas simple d'écoulement diphasique eau-huile, incompressible et immiscible dans un milieu homogène. Cette technique sera adaptée à nos modèles, notamment en prenant de façon explicite les termes de masses et de saturations. On présente dans le paragraphe suivant la motivation principale de cette thèse, à savoir la prise en compte de façon explicite les cœfficients de répartition nouvellement introduits. En effet, les autres grandeurs thermodynamiques intervenant dans les modèles (densité, viscosité, fractions massiques...) dépendent de ces quantités. Ces cœfficients de répartition sont donnés par un module thermodynamique qui peut s'avérer coûteux en temps calcul lorsqu'il est complexe, d'où la nécessité de les découpler des équations de transport. Il ressort alors que cette prise en compte des cœfficients de répartition de façon explicite est indépendante du choix de la méthode de résolution des équations (on pourrait envisager de résoudre les équations en implicitant tous les termes à l'exception des cœfficients de répartition). Répétons que le choix de la méthode IMPES pour la résolution se jusitifie par le souci de rechercher un modèle peu coûteux en temps calcul. Enfin, on termine ce chapitre par la description de la méthode numérique utilisée pour la prise en compte de la compaction à l'aide du calcul de la loi de porosité (modèle de compaction simplifié qui est un cas limite de modèles plus complexes).

Le quatrième chapitre est consacré à la discrétisation et aux résultats numériques de chacun des modèles retenus. Lors des simulations se rapportant au modèle en masses-saturations, la simulation de l'écoulement des hydrocarbures par la seule variation du gradient de pression est impossible. En effet, lorsque la compaction (principal phénomène moteur dans les écoulements) et la génération des hydrocarbures disparaissent (cette situation se produisant lorsque la roche mère est épuisée et qu'il y a un moment de calme -*i.e.* peu de dépôts de sédiments et jeu des plaques tectoniques inexistant- lors de la formation des bassins sédimentaires. Ces phénomènes peuvent durer quelques millions d'années); la pression devient alors constante dans tout le bassin et prend la valeur imposée au toit du bassin. Les écoulements cessent. Ce phénomène n'est pas très physique et constitue une limite de la modélisation. Pour le modèle en masse de mélange, une première difficulté intervient avec le choix de la loi de mélange. On montre qu'avec la loi de mélange retenue

laquelle est une moyenne des densités de phase pondérée par les saturations de ces mêmes phases, le modèle en masse de mélange est une conséquence directe du modèle en masses-saturations. La différence entre les deux modèles provient du schéma en temps qui est plus implicite dans le cas du modèle en masse de mélange que dans le modèle en masses-saturations (les densités des phases sont prises de façon implicite dans le modèle en masse de mélange). On montre également une limite du modèle dans le cas de très faibles densités de phase (cas des gaz très volatils dans les réservoirs) puisque, en considérant des faibles densités, les simulations numériques échouent (des pas de temps de l'ordre de la seconde ne sont pas suffisants pour effectuer la simulation; en conséquance, on a donc conclu à l'échec de la simulation). Pour terminer ce chapitre, on présente les résultats numériques du modèle en masses de composés. Ce modèle permet de simuler les écoulements au travers du bassin dans le cas de l'arrêt de la compaction et de la génération des hydrocarbures, ainsi que de faibles densités pour les hydrocarbures. Le modèle en masses de composés pallie donc aux limites des modèles précédents. C'est pourquoi on a retenu le modèle en masses de composés pour la suite de cette thèse.

Le cinquième chapitre est consacré à l'étude de l'approximation retenue sur les cœfficients de répartition. En effet, on a choisi de prendre en explicite, indépendamment de la méthode utilisée pour la résolution des équations de transport, les cœfficients de répartition. Ce choix suppose que l'équation de conservation du volume poreux ne soit plus vérifiée. On obtient deux types de volume, le volume issu de la porosité du domaine et le volume issu de la thermodynamique. Il n'y a aucune raison apparente pour que ces deux volumes coïncident. En conséquence, l'équilibre thermodynamique n'est donc pas vérifié. C'est pourquoi on introduit une nouvelle équation afin de corriger ces méfaits. Celle-ci, appelée équation thermodynamique à masses et volume constants, recalcule de nouveaux cœfficients de répartition. Pour cela, les masses et le volume poreux sont fixés et issus de la résolution des équations de transport; la pression,l'inconnue de cette équation, est modifiée. On présente alors deux formulations pour cette équation de thermodynamique à masses et volume constants. La première formulation n'admet pas de solution réaliste (masses nulles ou densités infinies) dans le cas où les cœfficients de répartition ne sont pas mis à jour après le transport et est automatiquement vérifiée dès que l'on met à jour les cœfficients de répartition après le transport. On conclut donc que l'étape de résolution de l'équation thermodynamique à masses et volume constants afin de récupérer l'équilibre thermodynamique n'est pas utile dans ce cas. L'inconvénient est qu'il faut mettre à jour les cœfficients thermodynamiques. Pour éviter la mise à jour de ces cœfficients de répartition, on introduit une nouvelle équation thermodynamique à masses et volume constants. On montre dans le cas où les densités de constituants ne dépendent pas des phases dans lesquelles ils se situent, que cette équation de thermodynamique à masses et volume constants est identique à l'équation de conservation du volume poreux, mais qu'elle diffère dans le cas où les densités de constituants dépendent des phases dans lesquelles ils se trouvent. Toutefois, le fait de la compatibilité de l'équation thermodynamique à masses et volume constants suggère l'impossibilité de calculer de nouveaux cœfficients de

répartition. On montre cette situation dans le cas d'un constituant se répartissant au sein de deux phases hydrocarbures. On passe ensuite aux résultats numériques. Il apparaît que le cas incompressible est très difficile à simuler puisqu'il nécessite un pas de temps inférieur à l'année pour pouvoir terminer la simulation. Cependant, la densité de constituants incompressible n'est pas très réaliste ni physique. On peut quand même noter que l'ordre de grandeur du pas de temps est comparable dans le cas de fluides très faiblement compressibles. Dans le cas de la simulation compressible, il apparaît dans le drain des pics de saturation. Ces pics sont liés à la modification locale de la pression. Ces pics n'ont pas de réalité physique puisque, lorsque l'on raffine en temps et en espace, ils disparaissent. De plus, pour pouvoir effectuer ces simulations, il a été nécessaire d'imposer un critère très restrictif sur les variations du pas de temps: en interdisant une trop grande variation entre la pression issue de la résolution du transport et celle issue de la résolution de l'équation thermodynamique à masses et volume constants. On a également programmé une méthode de point fixe pour les deux modèles afin d'augmenter le pas de temps et d'impliciter de façon simple les cœfficients de répartition. Dans les deux cas, la méthode de point fixe donne les résultats obtenus par le modèle en masses de composés ne tenant pas compte de l'équation de thermodynamique à masses et volume constants et avec les cœfficients de répartition pris de façon explicite. Pour terminer, on présente une simulation avec une loi de densité tronquée à partir d'un certain seuil de pression. Cette simulation a pour effet de prendre en compte une physique plus importante et plus difficile à simuler pour les cœfficients thermodynamiques, afin de comparer le comportement du modèle tenant compte de l'équation thermodynamique à masses et volume constants à celui du modèle ne tenant pas compte de cette équation thermodynamique. Les résultats de comparaison sont identiques à ceux exposés précédemment.

Le sixième chapitre est consacré, dans un premier temps, aux résultats de stabilité numérique du modèle (différents raffinements en temps et en espace ont été opérés) et, dans un deuxième temps, à l'étude d'une gestion du pas de temps pour le modèle en masses de composés. La motivation d'une telle étude de gestion du pas de temps s'explique par des variations importantes des phénomènes au cours du temps et selon le milieu rencontré. Lorsqu'on effectue les simulations avec un pas de temps fixé, ce pas de temps doit être adapté au phénomène le plus restrictif au cours de la période simulée afin de pouvoir garantir la fin de la simulation. La question du choix de la valeur de ce pas de temps se pose alors. Faute de pouvoir déterminer à l'avance cette valeur, plusieurs simulations doivent être effectuées au préalable afin d'en déterminer la grandeur. Cette valeur n'est efficace que pour un jeu de données fixé. Sa détermination doit de nouveau être effectuée dès que le jeu de données est modifié. De plus, en supposant que la valeur "optimale" soit évaluée, il apparaît un surcoût de calcul pour les phénomènes précédents, qui auraient pu être calculés avec des pas de temps plus importants. Pour ces raisons, un pas de temps adaptatif a été retenu. On commence par décrire la stratégie de pas de temps développée dans le modèle TEMISCOMP (thèse d'Isabelle Faille [31] et repris dans la thèse de Sophie Verdière [56] pour le modèle des réservoirs). Cette stratégie est dite "empirique" au sens

où les valeurs de variation du pas de temps sont données par l'utilisateur et doivent être adaptées à chaque cas. De plus, cette stratégie de prédiction de pas de temps ne prend pas en compte de façon satisfaisante le passage du front de saturation lors des changements de couche géologique. Enfin, cette méthode est basée sur les variations des saturations alors que le modèle étudié se formule en masses. On présente donc une nouvelle prédiction de pas de temps basée sur les variations de masse au cours du temps, en tenant compte des flux aux interfaces de chaque maille. Cette prédiction permet de mieux tenir compte du passage du front de saturation entre les couches géologiques et minimise l'intervention de l'utilisateur (il fixe uniquement le seuil de variation des masses). Néanmoins, une telle stratégie nécessite de nombreuses annulations du pas de temps. En outre, la gestion du pas de temps est globale; cela pénalise le temps d'exécution de la simulation (les calculs pouvant être effectués dans certaines zones avec des pas de temps plus importants). On a donc développé une stratégie de pas adaptif local en repérant les zones nécessitant des petits pas de temps. Ces zones peuvent varier au cours du temps. Une fois ces zones identifiées, on y raffine le pas de temps en supposant qu'à l'extérieur de ces zones, la solution calculée est acceptable. La difficulté est alors de déterminer la "taille" de ces zones à raffiner. On termine ce chapitre en présentant deux simulations. On compare alors le gain de temps calcul apporté par la méthode de raffinement local du pas de temps à celui donné par la méthode de gestion du pas de temps global.

Le dernier chapitre de cette thèse développe l'étude d'estimateurs *a posteriori* dans le cas d'une équation elliptique linéaire et d'une équation d'évolution parabolique linéaire pour le cas d'une discrétisation en Volumes Finis issue d'une formulation mixte primale-duale. La motivation d'une telle étude théorique est issue du chapitre se rapportant sur l'étude d'une gestion du pas de temps. On avait alors introduit un raffinement local du pas de temps en considérant des "zones" dans lesquelles la solution était correctement calculée et des "zones" dans lesquelles cette solution était considérée comme "mauvaise". Il était alors apparu des difficultés quant au choix de tels zones et l'on avait montré les limites de notre méthode. Afin d'obtenir des critères un peu moins empiriques, on s'est tout naturellement orienté vers les estimateurs *a posteriori*. Dans un premier temps, on établit un estimateur pour une équation linéaire elliptique: dans le cas où la fonction du terme source est constante par volume de discrétisation, on montre que l'estimateur est égal à l'erreur exacte. Dans le cas où cette fonction n'est plus constante, on établit une majoration de l'erreur par l'estimateur, puis une minoration de l'erreur par l'estimateur. On confirme ces résultats par des tests numériques. On passe ensuite au cas de l'équation linéaire parabolique. On propose deux approches pour le calcul des estimateurs. Le premier estimateur s'appuit sur les travaux de Bergam *et al.*[12, 13, 14, 15]. Cet estimateur se compose d'un estimateur en temps et d'un estimateur en espace que l'on étudie séparément. On montre, comme dans le cas elliptique, que cet estimateur majore et minore l'erreur exacte. On constate également que l'on retrouve, pour l'estimateur en espace, l'estimateur établit dans le cas elliptique. La deuxième approche s'appuie sur les travaux de Ericksson et Jhonson [26] qui construisent un estimateur à la fois en temps et en espace. L'estimateur

obtenu est général et il est indépendant de la méthode numérique utilisée pour résoudre le problème. Cependant, il est nécessaire que les espaces discrets soient inclus dans les espaces continus que l'on a définis. L'estimateur obtenu s'adapte bien aux formulations primales, duales et primales-duales. On termine par une application du théorème au cas étudié dans la première partie du chapitre, et l'on constate que l'on retrouve un estimateur semblable à celui obtenu avec la méthode de Bergam. Enfin, on remarquera que les estimateurs obtenus sont pour des erreurs globales et que l'on a aucune information quant à l'estimation de l'erreur sur chaque élément. Cependant, les essais numériques montrent, dans notre cas, qu'ils donnent une bonne répartition des erreurs locales.

Chapitre 2

Présentation et modélisation des phénomènes impliqués dans un bassin sédimentaire

Qu'est-ce qu'un bassin sédimentaire? Ce chapitre le présente comme un volume (le plus souvent représenté par un parallélépipède de plusieurs dizaines de kilomètres de long et de large pour une profondeur de cinq à dix kilomètres) dans lequel différents types de roches vont s'accumuler (sédimentation) et évoluer au cours du temps. Ces phénomènes se déroulent sur plusieurs millions d'années. Les principales évolutions dans un bassin sédimentaire sont la compaction, l'érosion, la création de failles, l'enfouissement et l'évolution des roches liée aux modifications thermiques du bassin. On peut alors rencontrer des phénomènes de création d'hydrocarbures, de migration et de piégeage de ceux-ci à l'intérieur d'un tel bassin. Tous ces phénomènes sont décrits dans ce chapitre ainsi que la modélisation mathématique pour certains d'entre eux.

2.1 Formation d'un bassin sédimentaire: les phénomènes mis en jeu

2.1.1 Création d'un bassin

La formation d'un bassin sédimentaire trouve son origine dans le déplacement de la lithosphère par rapport à l'asténosphère [25].
Lorsque l'on a des mouvements verticaux et divergents dans l'asténosphère, la lithosphère s'étire et s'amincit. On observe alors des remontées de matériel chaud de l'asténosphère. Un affaissement topographique en surface de la lithospère (subsidence) apparaît alors dont la géométrie est controlée par des failles (subsidence tectonique). Cet affaissement s'appelle un rift. Cet espace créé permet des dépôts de sédiments qui formeront alors le bassin sédimentaire. Ce phénomène d'étirement peut se poursuivre et créer de nouveaux espaces

pour l'augmentation du dépôt de sédiments et l'enfouissement du bassin (on parle alors d'extension du bassin) ou s'arrêter. Lorsque ces phénomènes de convection, de remontée de matière chaude de l'asténosphère et d'étirement de lithosphère cessent, la lithosphère se refroidit. Ce refroidissement crée alors un affaissement plus lent de la surface lithosphérique et génère alors un nouvel espace pour du dépôt de sédiments. C'est le phénomène de compaction thermique ou subsidence thermique. Les bassins ainsi formés sont dits formés par extension. Une deuxième classe de bassin existe. Il s'agit de bassins flexuraux. Ces bassins apparaissent après une phase de subduction (glissement d'une plaque océanique sous une plaque continentale) lorsque deux plaques continentales s'opposent (mécanisme de création des montagnes). Ce type de bassin est difficile à modéliser [45] car chacun nécessite une connaissance détaillée de la région et des phénomènes impliqués.
Tous ces phénomènes permettent de créer de "l'espace" afin de générer des bassins sédimentaires par dépôt de sédiments. On va donc présenter, dans le paragraphe suivant, la sédimentation.

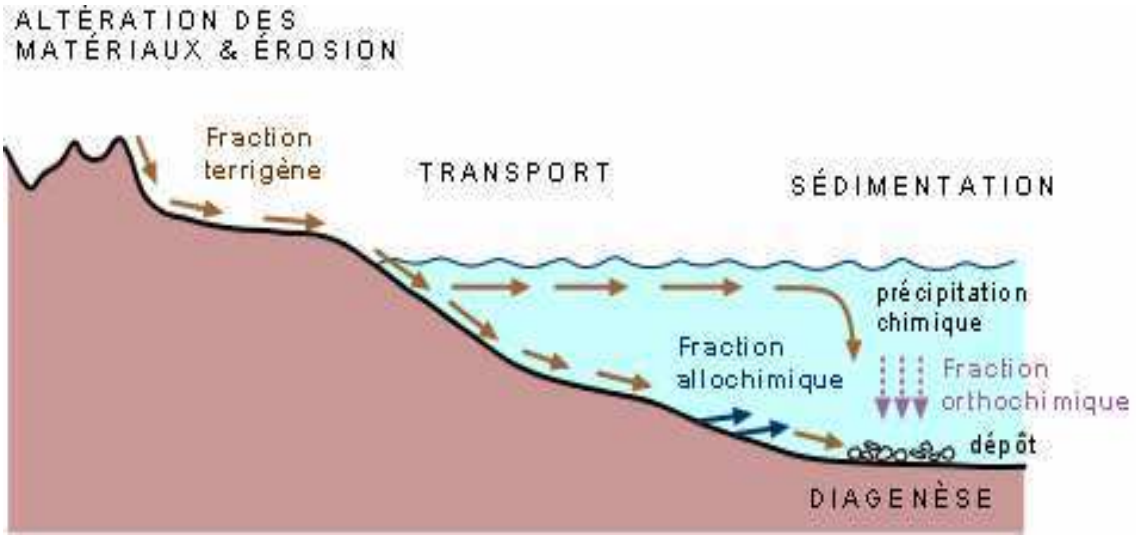


Figure 2.1: Processus de sédimentation

2.1.2 La sédimentation

Un bassin sédimentaire est un milieu poreux de plusieurs kilomètres de long et de large (en général une centaine de kilomètres) pour une profondeur de quelques kilomètres (entre 5 et 10 kilomètres) qui se forme, comme on l'a vu au paragraphe précédent, par le dépôt et l'enfouissement de sédiments. C'est la sédimentation.
La sédimentation est un phénomène lent et complexe. Il a principalement deux origines: une origine minérale avec l'érosion de la croûte terrestre des continents (en particulier l'érosion des montagnes) et une origine organique provenant des coquillages et autres organismes marins (*cf.* figure 2.1). La répartition de ces sédiments sur le toit du bassin se fait de façon inégale; les sédiments grossiers sont peu transportés contrairement aux sédiments les plus fins. La superposition des différents types de sédiments ainsi que leur compaction (tassement) forment des couches inégales appelées couches stratigraphiques. L'ensemble de ces couches stratigraphiques forme le bassin sédimentaire.
Un autre phénomène intervient lors de la sédimentation: l'érosion. Ce dernier phénomène concerne seulement les couches superficielles du bassin. Ainsi des couches peuvent être amenées à disparaître partiellement, comme le montre le schéma de la figure (2.2). Des phénomènes de remaniement des sédiments et des couches géologiques interviennent également pendant la formation de ces dépôts ainsi que la création de failles. Ces phénomènes ne seront pas abordés puisqu'ils sont difficiles à modéliser.

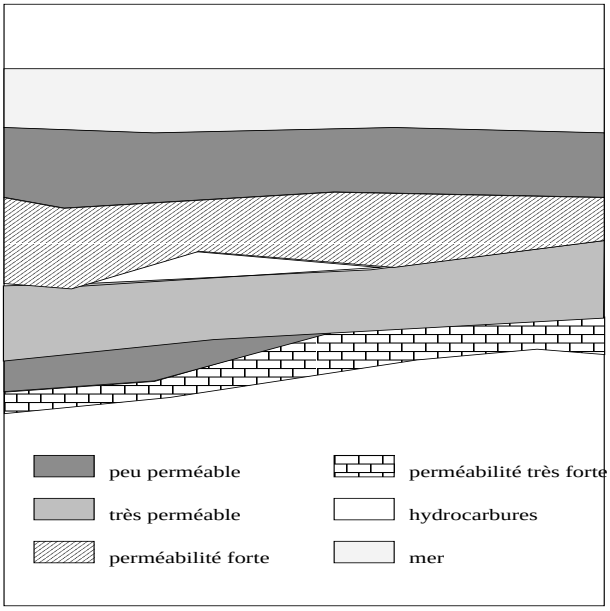
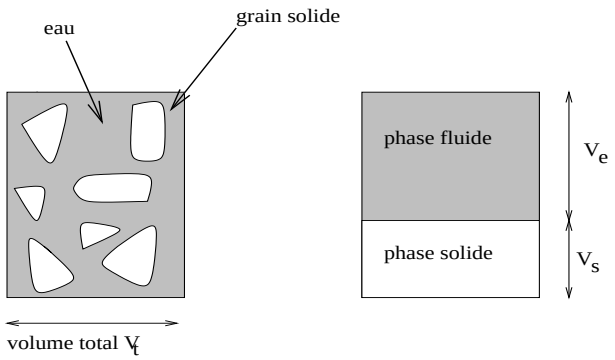


Figure 2.2: Représentation d'un bassin sédimentaire avec disparition de certaines couches géologiques

2.1.3 La compaction

Les couches géologiques, en se déposant, forment un milieu poreux dont les interstices sont comblés par l'eau environnante. Ces interstices sont mesurés par une grandeur appelée porosité qui représente le rapport du volume de fluide -ou vide- au volume total.



$$\phi = \frac{\text{volume fluide}}{\text{volume total}} = \frac{V_e}{V_t}$$

$$1-\phi = \frac{\text{volume solide}}{\text{volume total}} = \frac{V_s}{V_t}$$

Figure 2.3: représentation et définition de la porosité

Ce milieu poreux a tendance à se déformer par empilement des couches sus-jacentes et par le mouvement des plaques comme décrit précédemment. Cela se traduit par une diminution de la porosité en fonction de la profondeur. Principalement deux contraintes engendrent le phénomène de compaction: une contrainte liée au "poids" de l'eau et une autre liée au "poids" des solides (ou roches). Pour les décrire, on considère une colonne de sédiments.
La contrainte solide, σ_s, que l'on mesure en un point de cette colonne dépend de la hauteur solide sus-jacent en ce point. La formulation s'écrit de la façon suivante:

$$\sigma_s = \rho_s(1 - \Phi)g\Delta z,$$

où

- ρ_s est la densité de la roche au point de mesure,

- Φ est la porosité de la couche au point de mesure,
- g estla constante de gravité,
- Δz est la variation de la hauteur entre le point de mesure et le toit du bassin.

La deuxième contrainte, σ_w, quantifie le "poids" de l'eau sus-jacente au point de mesure. Elle se traduit par la formule:

$$\sigma_w = \rho_w \Phi g \Delta z,$$

ρ_w étant la densité de l'eau au point de mesure.
En sommant ces deux contraintes, on obtient une contrainte appelée par Terzaghi [52] "contrainte totale", notée σ_T:

$$\sigma_T = \sigma_s + \sigma_w.$$

Ces contraintes ne sont pas suffisantes pour caractériser la compaction. Il faut ajouter une contrainte de réaction du fluide sur la roche. Elle est représentée par la pression du pore, notée P.
Pour tenir compte de ces deux phénomènes, on introduit une contrainte, appelée "effective" et notée σ_e, qui est la différence entre la contrainte totale et la pression du fluide. Elle s'écrit comme suit [17][50]:

$$\sigma_e = \sigma_T - P.$$

2.1.4 La température

La température ou plus précisément le gradient géothermique, est un paramètre essentiel dans l'évaluation de la maturité de la roche mère [44], roche qui permet la génération des composés hydrocarbures solide (charbon), liquide (huile) ou vapeur (gaz). Ce gradient géothermique est lié au comportement de la lithosphère (réchauffement ou refroidissement) *i.e.* à la manière dont se forme le bassin, mais également à la radioactivité des sédiments qui constituent le bassin.

2.1.5 Le craquage et la migration des fluides

Lors de la phase de sédimentation, des matières organiques sont emprisonnées et s'accumulent dans les sédiments. Pendant l'enfouissement, on assiste à une dégradation de celles-ci par des bactéries anaérobies. Le produit résultant est appelé kérogène et est localisé dans une roche appelée roche mère. Ce kérogène commence à se dégrader, dans un premier temps, à une profondeur de 1500 à 2000m et à une température de 60^oC par l'action de bactéries. Cette dégradation s'accélère avec l'augmentation de la température jusqu' à 100^oC (qui correspond à une profondeur d'environ 3000m), et diminue pour des températures autour

de 140^oC (environ 4000m). A cette profondeur, on constate une dégradation naturelle et bactériologique. Toutes ces étapes forment le craquage primaire. Le produit de cette dégradation consiste en deux types, les hydrocarbures solides (coke) qui sont peu mobiles et les hydrocarbures fluides (huile et gaz) mobiles. Plus précisemment, le craquage primaire génère des constituants hydrocarbones qui vont se regrouper pour former des phases hydrocarbures d'huile, de gaz et de coke. Ces constituants, ainsi générés, peuvent s'avérer instables. Ils vont donc se dégrader en d'autres constituants (on supposera cependant que les constituants ainsi générés sont de même nature que ceux générés par le craquage primaire). C'est le craquage secondaire. Ce phénomène se produit également pendant la migration. Les phases ainsi formées, vont s'accumuler dans la roche mère et lorsqu'elles auront atteint une concentration suffisante, migreront vers le toit du bassin. Cette migration est rendue possible grâce à la différence de pression qui règne dans le bassin. Pour retenir ces hydrocarbures, le bassin doit comporter des couches perméables au travers desquelles les fluides vont migrer et des couches imperméables sus-jacentes qui empêchent les fluides de se disperser et permettre leur accumulation. Ces couches imperméables sont appelées couvertures. Ainsi, les hydrocarbures vont s'accumuler dans une cavité appelée roche magasin. Le schéma de la figure (2.4) montre un exemple de roche magasin.

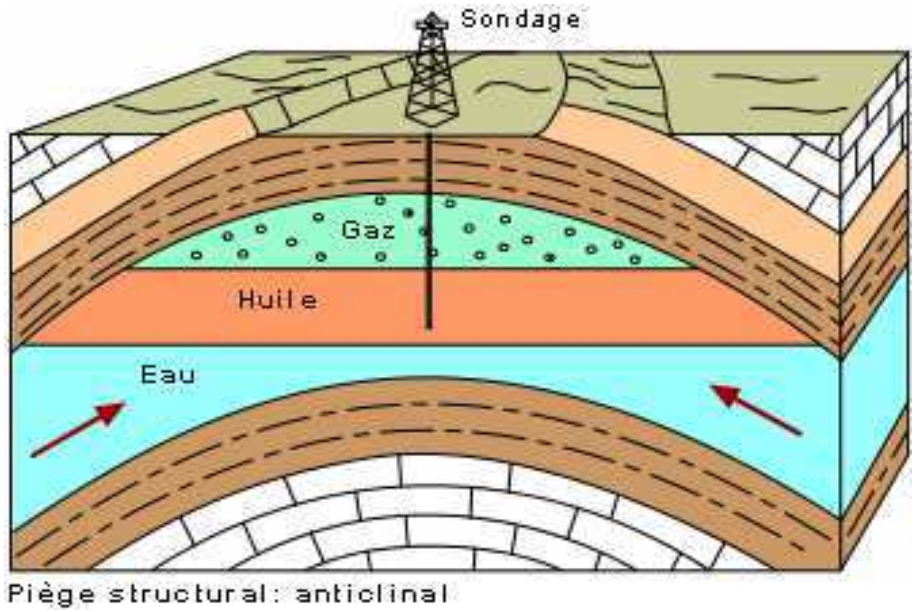


Figure 2.4: Exemple de roche magasin

La migration des fluides tient compte de la nature des couches géologiques, caractérisées par la porosité et la perméabilité absolue (ou intrinsèque), de la compaction ainsi que des interactions entre les fluides.

On regarde maintenant l'influence de chacun de ces éléments sur les écoulements des fluides:

- la cause principale de migration des hydrocarbures de la roche mère à la roche magasin est la compaction des sédiments. En effet, la compaction traduit une diminution de la porosité, ce qui expluse le surplus de fluide vers les pores voisins. La compaction induit aussi l'augmentation de la pression dans les pores puisque leur volume diminue. Cette augmentation de pression favorise la migration des hydrocarbures dans le bassin. Le phénomène mécanique n'est pas seul responsable de la migration des hydrocarbures, la géologie du bassin joue aussi un rôle important. Une roche ayant une faible porosité a peu de chance de voir des hydrocarbures migrer en son sein. Il faut une porosité minimale pour permettre un écoulement au travers de celle-ci. Mais cela n'est pas suffisant. En effet, dans une roche très poreuse mais dans laquelle les pores ne communiqueraient pas entre eux, on constaterait qu'il n'y aurait pas de migration des fluides dans cette roche (ou une migration très faible et extrèmement lente puisque rien ne peut être considéré comme imperméable à l'échelle géologique). Il faut donc introduire une grandeur qui mesure aussi l'interconnectivité des pores du milieu (ou des couches). C'est ce que mesure la perméabilité absolue. Elle est fonction de la porosité.

- l'interaction entre les fluides est aussi un paramètre significatif dans les écoulements. Elle est représentée par deux grandeurs:

* la perméabilité relative qui mesure l'influence que peut avoir une ou plusieurs phases sur l'écoulement d'une phase (on verra plus loin l'allure de telles courbes),

* la pression capillaire qui mesure les forces aux interfaces des fluides en contact. Elle est spécifiée pour chaque phase et dépend de la saturation de celle-ci.

On vient de décrire un certain nombre de phénomènes impliqués dans la vie d'un bassin sédimentaire. On va maintenant les modéliser en vue de les simuler.

2.2 Modélisation des phénomènes d'un bassin

2.2.1 Modélisation de la compaction

La compaction joue un rôle important lors des écoulements des fluides. Elle est prise en compte au travers de la porosité qui s'exprime sous la forme:

$$\Phi = \Phi(\sigma_e),$$

où Φ suit une loi rhéologique vérifiant trois conditions:

- $\Phi(0) = \Phi_0$,
  où Φ_0 est la valeur de porosité de dépôt du sédiment (en général de l'ordre de 50-60%).
- Φ tend vers une porosité résiduelle Φ_r lorsque σ_e tend vers l'infini.
- Φ est une fonction décroissante de la contrainte effective σ_e.

La loi que l'on considèrera, est la suivante [33] [64]:

$$\Phi(\sigma_e) = \Phi_r + \Phi_a e^{-(\frac{\sigma_e}{\sigma_a})} + \Phi_b e^{-(\frac{\sigma_e}{\sigma_b})},$$

où Φ_r, Φ_a, Φ_b, σ_a, σ_b sont des paramètres donnés pour chaque lithologie.
Il est aussi nécessaire de tenir compte du "rebond" du bassin qui apparaît lorsque l'on simule le phénomène d'érosion (celui-ci se traduit par une vitesse de sédimentation négative). Ce "rebond" correspond au gonflement des sédiments. Il ne faut pas que celui-ci soit trop important. Comme la compaction est un phénomène irréversible, la porosité ne peut pas suivre la courbe décrite par la compaction. On supposera qu'elle suit une forme linéaire. Pour tenir compte de ce phénomène, Faille *et al* [32] proposent le modèle élastoplastique suivant:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Phi}{\partial t} = -\beta(\Phi, \sigma_e)\dfrac{\partial \sigma_e}{\partial t}, & \\ \beta(\Phi, \sigma_e) = \dfrac{\Phi_a}{\sigma_a} e^{-(\frac{\sigma_e}{\sigma_a})} + \dfrac{\Phi_b}{\sigma_b} e^{-(\frac{\sigma_e}{\sigma_b})} & \text{si} \quad \sigma_e \geq \sigma_{max} \quad (1), \\ \beta(\Phi, \sigma_e) = \dfrac{1}{E_e} & \text{si} \quad \sigma_e < \sigma_{max} \quad (2). \end{cases}$$

L'expression (1) est la partie plastique de la loi. Elle traduit la compaction des sédiments (et donc du bassin). Ce comportement a lieu tant que la contrainte effective, σ_e, est plus grande que la contrainte effective maximale, σ_{max}, atteinte au cours de l'histoire géologique du bassin. Si le seuil est atteint (cas de l'érosion), on considère qu'il y a un rebond et la porosité suit alors une fonction linéaire. Le cœfficient, E_e, traduit l'élasticité de la roche

et donc le rebond. Plus ce cœfficient est grand, moins les sédiments (et donc la porosité) sont élastiques. La plage des valeurs de E_e est:

$$10^9 Pa \leq E_e \leq 10^{15} Pa.$$

Le point (2) simule ce rebond.
Finalement, la loi de porosité retenue s'exprime sous la forme:

$$\begin{cases} \Phi(\sigma_e) = \Phi_r + \Phi_a e^{-(\frac{\sigma_e}{\sigma_a})} + \Phi_b e^{-(\frac{\sigma_e}{\sigma_b})} & \text{si} \quad \sigma_e \geq \sigma_{max}, \\ \Phi(\sigma_e) = \Phi_0 + \frac{1}{E_e}\sigma_e & \text{si} \quad \sigma_e < \sigma_{max}. \end{cases}$$

2.2.2 Modélisation du craquage

On détaille et modélise maintenant chacune de ces deux étapes du craquage: le craquage primaire et le craquage secondaire.

Le craquage primaire

Le craquage primaire s'obtient par dégradation du kérogène dans la roche mère. Il produit des composés hydrocarbures solides ou liquides. Chaque type de kérogène, x_l, se dégrade selon une loi cinétique du premier ordre. On suppose que l'on a L réactions en parallèle qui produisent N_c composés hydrocarbures notés m_j.
Les réactions sont modélisées de la façon suivante:

$$x_l \xrightarrow{k_l} \alpha_{l1} m_1 + ... + \alpha_{lN_c} m_{N_c}, \qquad l = 1, ..., L,$$

où α_{lj} est la fraction de composé j produite par la réaction l à partir du kérogène x_l à la vitesse k_l .
Les potentiels x_l vérifient de plus l'équation suivante:

$$\frac{dx_l}{dt} = -k_l x_l, \qquad l = 1, ..., L.$$

Deux relations doivent être en plus vérifiées:

- pour les potentiels initiaux que l'on note x_l^0, $\quad l = 1, ..., L$:

$$\sum_{l=1}^{L} x_l^0 = 1,$$

- pour les fractions de composés:

$$\sum_{j=1}^{N} \alpha_{lj} = 1, \qquad l = 1, ..., L.$$

La vitesse de la réaction l est donnée par la loi d'Arrhénius [64] suivante:

$$k_l = A_l e^{-(\frac{E_l}{RT})}, \qquad l = 1, ..., L,$$

où

- R est la constante des gaz parfaits ($R = 8.31441\ J.mol^{-1}.K^{-1}$),
- T est la température en degrés Kelvin,
- A_l est un cœfficient préexponentiel (s^{-1}),
- E_l est l'énergie d'activation ($J.mol^{-1}$).

Le craquage secondaire

Certains composés formés par le craquage primaire peuvent être instables. Les composés instables vont se dégrader pour donner d'autres constituants stables ou instables. On suppose que lorsque ces composés craquent, ils se dégradent en des constituants déjà présents, autres qu'eux-mêmes. Comme le craquage primaire, le craquage secondaire est modélisé par des lois cinétiques du premier ordre. On obtient les expressions suivantes:

$$m_i \xrightarrow{k'_i} \beta_{i1} m_1 + .. + \beta_{ij} m_j .. + \beta_{iN_c} m_{N_c}, \qquad i = 1, ..., N_c,$$

où β_{ij} est la fraction de produit j formée par la réaction i:

$$\sum_{j=1}^{N_c} \beta_{ij} = 1 \quad et \quad \beta_{ii} = 0, \qquad i = 1, .., N_c,$$

$\beta_{ii} = 0$ traduit le fait que le composé i ne peut pas se transformer en composé i.
De même que précédemment, la vitesse de la réaction i est donnée par:

$$k'_i = A'_i e^{(-\frac{E'_i}{RT})}, \qquad i = 1, ..., N_c.$$

où

- R est la constante des gaz parfaits ($R = 8.31441\ J.mol^{-1}.K^{-1}$),
- T est la température en degrés Kelvin,
- A'_l est un cœfficient préexponentiel (s^{-1}),
- E'_l est l'énergie d'activation ($J.mol^{-1}$).

Remarque 1. *En regroupant le craquage primaire et le craquage secondaire, on obtient le terme source de notre modèle. Il se formule de la façon suivante:*

$$q_j = x_0 \sum_{l=1}^{L} a_{lj} x_l + \sum_{i=1}^{N_c} b_{ij} m_i, \qquad j = 1, .., N_c,$$

où

- $a_{lj} = k_l \alpha_{lj}$,
- $b_{ij} = k'_i \beta_{ij}$,
- x_0 *est un cœfficient donné.*

2.2.3 Modélisation des écoulements

Pour la modélisation des écoulements des fluides au travers du bassin, on se réfère au modèle mis en œuvre à l'I.F.P. connu sous le nom de *TEMISCOMP* [64]. Ce modèle est un modèle compositionnel triphasique que l'on retrouve également dans la modélisation des réservoirs. Le principe est décrit ci-dessous.
Le craquage génère des constituants qui vont s'accumuler dans la roche mère. Arrivés à un certain seuil, ceux-ci vont migrer dans le bassin vers le toit.
Pour modéliser ce mouvement, on fait appel à trois principes:

1. conservation de la masse de chaque constituant,
2. loi de comportement des vitesses pour chaque phase,
3. loi d'équilibre thermodynamique pour la répartition des constituants dans chaque phase.

On présente le modèle dans le cas de N constituants j qui se répartissent en n_α phases. On ne distingue pas, pour exposer la modélisation, la phase eau des phases hydrocarbures. On autorise donc des échanges de constituants entre les phases eau et hydrocarbures.
On a l'équation de conservation de la masse suivante:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} C_j^\alpha \rho_\alpha S_\alpha \Phi) = -div(\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} C_j^\alpha \rho_\alpha \vec{U}_\alpha) + q_j, \quad j = 1, ..., N,$$

avec:

- C_j^α fraction massique du constituant j dans la phase α,
- ρ_α densité de la phase α,
- $\vec{U}_\alpha$ vitesse de la phase α,
- q_j terme source qui modélise le craquage.

Comme on a N constituants, on obtient N **équations.**
On donne maintenant une interprétation plus physique, habituelle dans le monde pétrolier, de ces équations [3] [41][49].
On introduit, pour cela, une variation en temps δt et un volume δV.
La loi de conservation s'exprime alors de la manière suivante:

"la différence des flux massiques entrant dans la maille et des flux sortant de celle-ci est égale à la variation de masse de cette maille pendant l'intervalle de temps considéré."

La variation du constituant j pendant l'intervalle de temps considéré, dans le volume δV s'exprime par:

$$\frac{\delta}{\delta t}(\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} C_j^\alpha \rho_\alpha S_\alpha \Phi).$$

Le bilan des flux aux interfaces de ce volume δV s'écrit:

$$\sum_\alpha Q_j^\alpha.$$

Pour exprimer $\sum_\alpha Q_j^\alpha$, on considère le volume δV dans le cas à une dimension, comme le montre la figure ci-dessous:

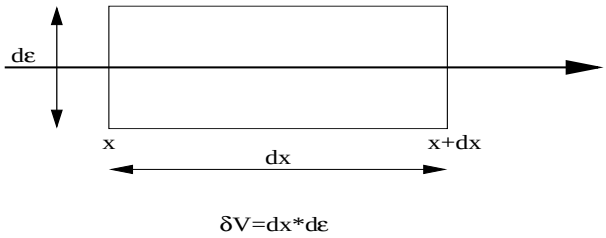


Figure 2.5: volume en 1D

Comme le constituant j est présent dans plusieurs phases, il se déplace à la vitesse de ces phases. Sa vitesse est représentée par le vecteur $\vec{V_j^\alpha}$ qui s'exprime sous la forme $\vec{V_j^\alpha} = C_j^\alpha \rho_\alpha \vec{U_\alpha}$.
Le bilan des flux aux interfaces du volume δV est la différence entre le flux entrant $(\vec{V_j^\alpha})_x$ et le flux sortant $(\vec{V_j^\alpha})_{x+\delta x}$. De plus, le constituant j peut être produit au sein du volume δV. On note q_j ce terme source. On obtient alors le bilan suivant:

$$\sum_\alpha Q_j^\alpha = \frac{(\sum_\alpha \vec{V_j^\alpha})_{x+\delta x} - (\sum_\alpha \vec{V_j^\alpha})_x}{\delta x} + q_j.$$

La loi de conservation de la masse j sur un volume δV et sur un pas de temps δt s'écrit alors:

$$\frac{\delta}{\delta t}(\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} C_j^\alpha \rho_\alpha S_\alpha \Phi) = -\frac{(\sum_\alpha \vec{V_j^\alpha})_{x+\delta x} - (\sum_\alpha \vec{V_j^\alpha})_x}{\delta x} + q_j.$$

Si on considère une distance δx, et un temps δt infinitésimaux, en passant à la limite vers zéro sur ces quantités, on obtient l'équation de conservation de la masse du constituant j déjà citée, à savoir:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} C_j^\alpha \rho_\alpha S_\alpha \Phi) = -div(\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} C_j^\alpha \rho_\alpha \vec{U_\alpha}) + q_j.$$

On voit apparaître dans ces bilans les vitesses de phase $\vec{U_\alpha}$. Ces vitesses sont produites par les différences de pression. Elles doivent aussi tenir compte du milieu poreux dans lequel ces fluides évoluent, de la présence d'autres fluides ainsi que de la gravité. On utilise pour cela la loi de Darcy, loi qui provient de mesures expérimentales faites pour des fluides homogènes et monophasiques. Les expériences ont montré que l'on pouvait l'appliquer aux écoulements polyphasiques en introduisant le concept de perméabilité relative. Cette loi s'exprime de la manière suivante:

$$\vec{U_\alpha} = -\underline{\underline{K}}\frac{kr_\alpha}{\mu_\alpha}(\vec{\nabla} P_\alpha - \rho_\alpha \vec{g}),$$

où l'on a noté $\underline{\underline{K}}$ la perméabilité absolue (ou intrinsèque), kr_α la perméabilité relative de la phase α, fonction qui dépend de la saturation S_α. La densité, la viscosité et la pression de la phase α sont notées respectivement μ_α, ρ_α, P_α. $\vec{g}$ représente le vecteur accélération de la pesanteur.
Cette loi étant valable pour chacune des n_α phases, on obtient donc n_α **équations** supplémentaires.
Le troisième principe fournit la répartition de chaque constituant dans chacune des phases. On utilise pour cela la notion de fraction massique que l'on note C_j^α. Elle represente la proportion de masse du constituant j de la phase α (m_j^α) présent dans la phase α sur la masse de la phase α (m_α). Ceci se traduit par l'expression $C_j^\alpha = \frac{m_j^\alpha}{m_\alpha}$.
Les relations liant les fractions massiques s'écrivent (conséquence immédiate de la définition):

$$\sum_{j=1}^{N} C_j^\alpha = 1 \quad \alpha = 1, \ldots, n_\alpha.$$

On a donc n_α **équations** supplémentaires.

De plus, on a les relations thermodynamiques suivantes:
soient $\alpha, \beta \in \{1, \ldots, n_\alpha\}$ $\alpha \neq \beta$ deux phases dans lesquelles le constituant j apparaît. La relation traduisant la répartition de ce constituant dans les phases α et β s'exprime de la manière suivante:

$$C_j^\alpha = K_j^{\alpha\beta} C_j^\beta.$$

On obtient alors $\sum_{j=1}^{N}(n_{\alpha_j} - 1)$ **équations,** où n_{α_j} représente le nombre de phases dans lesquelles le constituant j est présent.
Avant de passer au bilan des inconnues du système, on remarque qu'en regroupant les équations obtenues à partir des points 1 et 2, on élimine les vitesses.
Il reste alors N **équations** qui s'écrivent:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} C_j^\alpha \rho_\alpha S_\alpha \Phi) - div\left(\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} C_j^\alpha \rho_\alpha \underline{\underline{K}} \frac{kr_\alpha}{\mu_\alpha}(\vec{\nabla} P_\alpha - \rho_\alpha \vec{g})\right) = q_j.$$

En résumé, on obtient après application de ces trois principes,
$N + n_\alpha + \sum_{j=1}^{N}(n_{\alpha_j} - 1)$ équations *i.e.* $n_\alpha + \sum_{j=1}^{N} n_{\alpha_j}$ **équations.**
Une dernière remarque concerne la pression P_α de chaque phase. On peut la décomposer en une pression P commune à toutes les phases et en une pression capillaire que l'on note P_{c_α}. On obtient la décomposition suivante:

$$P_\alpha = P + P_{c_\alpha}.$$

La pression P peut être soit la pression d'une phase, soit une pression moyenne de toutes les phases [23][36]. Les pressions capillaires P_{c_α} ne sont pas des inconnues du problème. Elles peuvent s'exprimer comme fonction de la saturation. Cette fonction est établie de façon expérimentale en mettant deux fluides en présence. Par exemple, si on prend deux phases α et β, on a la relation suivante:

$$P_{c_\alpha} - P_{c_\beta} = P_{c_{\alpha\beta}}(S_\beta).$$

Les pressions capillaires se présentent sous la forme schématique suivante [41][43]:

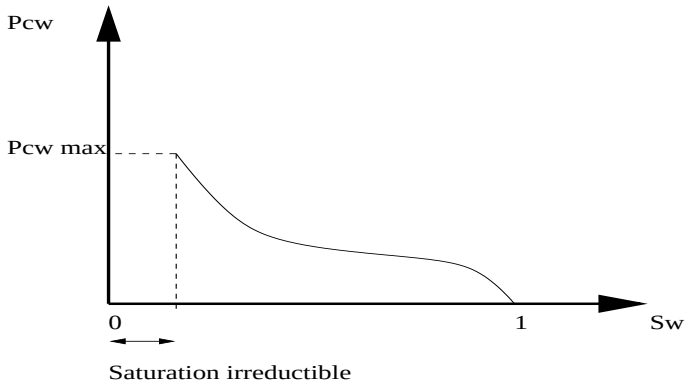


Figure 2.6: allure de la pression capillaire

On dresse maintenant le bilan des inconnues du système. Elles sont les suivantes:

- la pression P: 1 inconnue,
- les fractions massiques $(C_j^\alpha)_{j=1,\dots,N;\alpha=1,\dots,n_\alpha}$: $\sum_{j=1}^{N} n_{\alpha_j}$ inconnues,
- les saturations $(S_\alpha)_{\alpha=1,\dots,n_\alpha}$: n_α inconnues.

Le bilan est alors de $1 + n_\alpha + \sum_{j=1}^{N} n_{\alpha_j}$ **inconnues.** Il manque donc une équation. Cette équation sera introduite en considérant la conservation du volume poreux. Cette formule traduit le fait que chaque volume élémentaire (ici représenté par la saturation des phases) ne peut dépasser le volume total (ici l'espace de "vide" du bassin normalisé à 1).
On obtient la formule suivante:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} S_\alpha = 1.$$

Cette dernière équation permet de fermer le système.

En résumé, le système d'équation à résoudre se formule comme suit:

$$\begin{cases} q_j = x_0 \sum_{l=1}^{L} a_{lj} x_l + \sum_{i=1}^{N_c} b_{ij} m_i, \quad j = 1, .., N_c, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} C_j^\alpha \rho_\alpha S_\alpha \Phi) - div \left(\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} C_j^\alpha \rho_\alpha \underline{\underline{K}} \frac{kr_\alpha}{\mu_\alpha} (\vec{\nabla} P_\alpha - \rho_\alpha \vec{g}) \right) = q_j, \\ \sum_{j=1}^{N} C_j^\alpha = 1 \quad \alpha = 1, \ldots, n_\alpha, \\ \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} S_\alpha = 1. \end{cases} \tag{2.1}$$

Pour que le système soit complet, on considère des conditions initiales et aux limites. Les conditions initiales portent sur la pression et les saturations tandis que les conditions aux limites peuvent être de deux types: soit sur la pression P (condition de Dirichlet), soit sur les flux $\vec{U}_\alpha.\vec{n}$ avec $\vec{n}$ normale extérieure au domaine (condition de Neumann). Elles peuvent être appliquées soit sur le bord en entier, soit sur une partie du bord, une condition étant sur le bord complémentaire de l'autre.

Remarque 2. *On remarque que le nombre d'inconnues comptabilisées pour les fractions massiques est de* $\sum_{j=1}^{N} n_{\alpha_j}$ *et non* $N \times n_\alpha$ *comme cela pourrait être naturel.*

$\sum_{j=1}^{N} n_{\alpha_j}$ *compte seulement le nombre de phases dans lesquelles les constituants sont présents alors que* $N \times n_\alpha$ *suppose, dans son évaluation, que tous les constituants sont présents dans toutes les phases, ce qui n'est pas forcément le cas a priori. Pour illustrer ce cas, on prend l'exemple d'un cas diphasique eau-huile pour lequel il n'y a aucune miscibilité des constituants entre les phases. Calculons maintenant les inconnues à retenir pour la modélisation par les deux méthodes de calcul.*

$\sum_{j=1}^{N} n_{\alpha_j} = n_{w_w} + n_{o_1} = 1 + 1 = 2$ *inconnues (l'indice* w*, indique le constituant et la phase eau et l'indice* 1 *celui du constituant hydrocarbure présent dans la phase huile représentée par l'indice* o*). Avec l'autre mode de calcul on obtient* $N \times n_\alpha = 2 \times 2 = 4$ *inconnues. On ne tient pas compte dans ce calcul du fait que l'on n'a pas d'échange de constituants entre les phases. On va devoir introduire de nouvelles équations pour prendre en compte cet aspect de la modélisation.*

On résume dans le tableau ci-dessous les équations nécessaires pour les deux modes de calcul des inconnues.

cas	$\sum_{j=1}^{N} n_{\alpha_j}$	$N \times n_\alpha$
relation découlant de la définition des C_j^α	$C_w^w = 1$ $C_1^o = 1$	$C_w^o + C_1^o = 1$ $C_w^w + C_1^w = 1$
relations thermodynamiques	X	$C_w^o = 0$ $C_1^w = 0$

On a donc introduit, dans ce cas simple pour le décompte des inconnues par la méthode $N \times n_\alpha$ *deux équations supplémentaires.*
Cet exemple simplifié illustre la difficulté du choix des inconnues qui va grandissant avec la complexité des problèmes. On verra dans le chapitre suivant les difficultés de ce choix lorque, dans le bassin, divers états thermodynamiques sont présents.

Chapitre 3

Modèles d'écoulement de phases

3.1 Introduction

On présente les modèles dans le cas de N constituants qui se répartissent en n_α phases. Comme dans la modélisation précédente, on suppose qu'il peut y avoir des échanges de constituants entre les phases hydrocarbures et la phase eau. De plus, comme on l'a remarqué dans le chapitre précédent lors de la modélisation des écoulements, on peut décomposer la pression de la phase α, notée P_α, en une pression commune à toutes les phases plus une pression capillaire, notée Pc_α. Tenant compte de cette remarque, on ne tiendra plus compte, pour la suite des exposés, de la pression capillaire et l'on ne considèrera donc qu'une pression commune à toutes les phases (ceci étant une hypothèse faite dans notre étude des modèles).
Pour modéliser les écoulements des fluides complexes, le modèle physique présente un très grand nombre de grandeurs comme la pression, la température, les fractions massiques, les cœfficients de répartition, les vitesses de filtration, les masses des constituants, les saturations ... Toutes ces grandeurs ne sont pas indépendantes et le choix que l'on fait pour les inconnues du système conditionne les autres grandeurs physiques qui en dépendront ainsi que les équations qui serviront à la modélisation. On présente donc, dans ce chapitre, trois choix différents d'inconnues principales avec le système d'équations associées à ces choix. La discussion sur la validité des modèles sera traité dans un chapitre ultérieur par le biais de la simulation numérique. On rappelle (énoncé au paragraphe 2.2.3) les principes qui régissent ce modèle physique global:

1. conservation de la quantité de masse de chaque constituant,
2. loi de comportement des vitesses de filtrations pour chaque phase,
3. loi d'équilibre thermodynamique pour la répartition des constituants dans chaque phase.

Enfin, on rappelle l'expression commune à toutes les modélisations du terme source qui traduit le craquage primaire et secondaire:

$$q_j = x_0 \sum_{l=1}^{L} a_{lj} x_l + \sum_{i=1}^{N} b_{ij} m_i \quad j = 1, \ldots, N,$$

avec une valeur de $q_j = 0$ pour le constituant eau.

3.2 Grandeurs et dépendances

Dans ce paragraphe, on présente les expressions et les grandeurs des diverses quantités physiques intervenant dans les modèles que l'on étudie.

3.2.1 Présentation des grandeurs et de leur dépendance

- L'indice α désigne les phases et l'indice j désigne les constituants (eau et hydrocarbures).
- P : pression en Pa.
- Φ : porosité. Elle représente le pourcentage de "vide" dans lequel les fluides pourront évoluer. Grandeur *sans dimension*. Pour simuler la compaction et la sédimentation, la porosité est une fonction de la pression P (*cf.* 3.6.3).
- $\underline{\underline{K}}$: perméabilité absolue. Elle dépend de la porosité Φ. C'est en général une fonction analytique (*cf.* (3.18)). Grandeur s'exprimant en miliDarcy mD (Darcy$\times 9,869233 = m^2$).
- S_α : saturation de la phase α. Elle représente le pourcentage de volume occupé par la phase dans le domaine. C'est une grandeur *sans dimension*.
- S_j^α : saturation du constituant j dans la phase α. Elle représente le pourcentage du volume occupé par le constituant j dans la phase α. C'est une grandeur *sans dimension*.
- ρ_α : densité ou masse volumique de la phase α. Grandeur s'exprimant en $kg.m^{-3}$. Elle dépend de la pression P, de la température T, des masses m_j et des fractions massiques C_j^α (*cf.* 3.6.3).
- ρ_j^α : densité ou masse volumique du constituant j dans la phase α. Grandeur s'exprimant en $kg.m^{-3}$. Elle ne dépend que de la pression P, de la température T et de constantes physiques déterminées par la nature du constituant étudié et de la phase dans laquelle il se situe(*cf.* 3.6.3).
- ρ_j : densité ou masse volumique du constituant j qui, contrairement à ρ_j^α ne dépend pas de la phase dans laquelle il se trouve. Grandeur s'exprimant en $kg.m^{-3}$. Elle ne dépend que de la pression P, de la température T et de constantes physiques déterminées par la nature du constituant étudié (*cf.* 3.6.3).
- ρ : densité de mélange. Grandeur s'exprimant en $kg.m^{-3}$. C'est une grandeur dépendant de la pression P, des masses m_j, des fractions massiques C_j^α (ou des cœfficients de répartition β_j^α). Elle est déterminée soit par une boîte noire (programme issu d' expérimentations thermodynamiques complexes avec un "calage" des paramètres sur des composantes particulières), soit par une moyenne (*cf.*(3.7)).

- μ_α : viscosité de la phase α. Grandeur s'exprimant en cp ($cp \times 10^{-3} = Pa.s$). Elle dépend de la température T et des fractions massiques C_j^α (*cf.* 3.6.3).

- kr_α : perméabilité relative. Grandeur *sans dimension.* C'est une grandeur qui ne dépend que des saturations de phases S_α. Elle peut être soit analytique (ce qui est le cas dans cette thèse -*cf.* 3.6.3), soit établie à partir de tables de mesures.

- m_j^α : masse du constituant j dans la phase α. C'est une grandeur dont l'unité est *une masse par unité de volume*, mais par "abus" de langage on appelera cette quantité "masse".

- m_j : masse du constituant j. Comme pour la masse m_j^α, m_j est *une masse par unité de volume*, que l'on appelera dans la suite "masse" du constituant j.

- m_α: masse de la phase α. Comme pour les masses précédentes, m_α est *une masse par unité de volume.*

- C_j^α : fraction massique du constituant j dans la phase α. Grandeur *sans dimension.* C'est le rapport entre la masse du constituant j présent dans la phase α sur la masse de la phase α. Elle dépend de la pression P, de la température T, des masses des constituants m_j et éventuellement des cœfficients de répartition β_j^α (cela dépend du module thermodynamique utilisé). Elle peut être calculée soit à partir de lois analytiques (*cf.* 3.6.3) dans des cas simples comme le Black-Oil, soit donné par une "boîte noire" (module établi selon des tables de mesures qui sont issues d'expérimentations thermodynamiques complexes effectuées en laboratoire. Ce type de module thermodynamique sont confidentiels et ils ne sont fournis que sous forme de fichiers executables d'où le nom de boîte noire).

- β_j^α : cœfficient de répartion. Grandeur *sans dimension.* Cette grandeur exprime le rapport de la masse du constituant j présent dans la phase α sur la masse du constituant j. Elle dépend de la pression P, de la température T, des masses m_j et éventuellement des fractions massiques C_j^α. Tout comme les fractions massiques, les cœfficients de répartition sont donnés soit par à partir de lois analytiques , soit à partir d'une boîte noire.

3.2.2 Relations entre certaines grandeurs

On utilise les relations suivantes qui découlent des définitions physiques:

- $\sum_\alpha S_\alpha = 1,$

- $\sum_j S_j = S_\alpha,$

- $m_j^\alpha = \Phi \rho_j^\alpha S_j^\alpha,$

- $m_j^\alpha = \beta_j^\alpha m_j = C_j^\alpha m_\alpha$,
- $m_j = \Phi \sum_\alpha C_j^\alpha \rho_\alpha S_\alpha$,
- $m_j = \sum_\alpha m_j^\alpha$,
- $m_\alpha = \Phi \rho_\alpha S_\alpha$,
- $C_j^\alpha = \dfrac{m_j^\alpha}{m_\alpha}$,
- $\sum_j C_j^\alpha = 1$,
- $\beta_j^\alpha = \dfrac{m_j^\alpha}{m_j}$,
- $\sum_\alpha \beta_j^\alpha = 1$.

Selon le type de module thermodynamique utilisé pour simuler les échanges multiphasiques, le choix de la dépendance des paramètres évoluent. En effet, si le module thermodynamique calcule les fractions massiques C_j^α (ce qui est le cas dans notre thèse à l'aide du modèle Black-Oil), on évalue alors les cœfficients de répartition grâce à la relation $\beta_j^\alpha = \dfrac{C_j^\alpha m_\alpha}{m_j}$. Si, en revanche, le module thermodynamique évalue les cœfficients de répartition, on utilise la relation $C_j^\alpha = \dfrac{\beta_j^\alpha m_j}{m_\alpha}$ pour évaluer les fractions massiques.

3.3 Modèle d'écoulement en Masses-Saturations

3.3.1 Modélisation mathématique

La modélisation des écoulements se fait, comme on vient de le rappeler dans l'introduction, à partir des principes de conservation de la masse, des lois de comportement des vitesses de phase et des équations traduisant les échanges ou la miscibilité des phases les unes par rapport aux autres.
Pour le modèle que l'on présente, on retient comme inconnues principales:

- la pression P: 1 inconnue,
- les masses $(m_j)_{j=1,\dots,N}$: N inconnues,
- les saturations $(S_\alpha)_{\alpha=1,\dots,n_\alpha}$: n_α inconnues.

Le bilan est alors de $1 + N + n_\alpha$ **inconnues**.
On dresse maintenant le bilan des équations liées au choix de ces inconnues principales.
L'équation de conservation de la masse m_j s'exprime de la manière suivante:

$$\frac{\partial m_j}{\partial t} = -div(\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} C_j^\alpha \rho_\alpha \vec{U}_\alpha) + q_j, \tag{3.1}$$

avec:

- C_j^α fraction massique du constituant j dans la phase α,
- ρ_α densité de la phase α,
- $\vec{U}_\alpha$ vitesse de la phase α,
- q_j terme source qui modélise le craquage.

Comme on a N constituants, on obtient alors N **équations.**
Comme dans le chapitre précédent, la loi de Darcy généralisée à des écoulements multiphasiques modélise les vitesses de filtration de chaque phase $\vec{U}_\alpha$. Cette loi s'exprime de la façon suivante (en négligeant, comme signalé en introduction, la pression capillaire):

$$\vec{U}_\alpha = -\underline{\underline{K}} \frac{kr_\alpha}{\mu_\alpha} (\vec{\nabla} P - \rho_\alpha \vec{g}), \tag{3.2}$$

où l'on a noté $\underline{\underline{K}}$ la perméabilité absolue (ou intrinsèque), k_{r_α} la perméabilité relative de la phase α, fonction qui dépend de la saturation S_α. La densité, la viscosité de la phase α et la pression sont notées respectivement μ_α, ρ_α, P. $\vec{g}$ représente le vecteur accélération de la pesanteur.
Cette loi étant valable pour chacune des n_α phases, on obtient donc n_α **équations** supplémentaires.

Enfin, comme pour la modélisation des écoulements présentés dans le chapitre précédent, on doit définir une équation pour la répartition de chaque constituant dans chacune des phases. On introduit pour cela le concept de cœfficient de répartition que l'on note β_j^α. A l'inverse des fractions massiques qui traduisent la quantité de masse du constituant j présent dans la phase α par rapport à cette phase (on a donc $\sum_{j=1}^{N} C_j^\alpha = 1$ $\alpha = 1, \ldots, n_\alpha$), les cœfficients de répartition représentent la quantité de masse du constituant j présent dans la phase α par rapport à toutes les phases qui le contiennent (on a donc $\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \beta_j^\alpha = 1$ $j = 1, \ldots, N$).
La relation qui lie les fractions massiques et les cœfficients de répartition est la suivante:

$$C_j^\alpha = \frac{\beta_j^\alpha m_j}{m_\alpha} \iff \beta_j^\alpha = \frac{C_j^\alpha m_\alpha}{m_j}.$$

De plus, on suppose que les fractions massiques $(C_j^\alpha)_{j=1,\ldots,N\ \alpha=1,\ldots,n_\alpha}$,dépendent des inconnues pression, masse et saturation $\left(C_j^\alpha(P, (m_j)_{j=1,\ldots,N}, (S_\alpha)_{\alpha=1,\ldots,n_\alpha})\right)$ et qu'elles sont données par un module thermodynamique. Par conséquent, on suppose que les cœfficients de répartition $(\beta_j^\alpha)_{j=1,\ldots,N\ \alpha=1,\ldots,n_\alpha}$ ne dépendent que des cœfficients de répartition et des masses de constituants $\left(\beta_j^\alpha((C_j^\alpha)_{j=1,\ldots,N\ \alpha=1,\ldots,n_\alpha}, (m_j)_{j=1,\ldots,N})\right)$.
Les relations thermodynamiques se modélisent de la façon suivante:

$$\Phi \rho_\alpha S_\alpha = \sum_{j=1}^{N} \beta_j^\alpha m_j \quad \alpha = 1, \ldots, n_\alpha,$$

où

- Φ est la porosité,
- ρ_α est densité de la phase α,
- S_α est saturation de la phase α.

Ces équations expriment la conservation de la masse de la phase α en fonction de la quantité des constituants j présents dans cette phase. On obtient alors n_α **équations** supplémentaires.
Avant de dresser le bilan final du nombre d'équations obtenues à l'aide des trois principes exposés dans le chapitre précédent, on remarque qu'en regroupant les équations (3.1) et (3.2), il reste alors N **équations** qui s'écrivent:

$$\frac{\partial m_j}{\partial t} - div\left(\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} C_j^\alpha \rho_\alpha \underline{\underline{K}} \frac{kr_\alpha}{\mu_\alpha}(\vec{\nabla} P - \rho_\alpha \vec{g})\right) = q_j.$$

En résumé, on obtient $N + n_\alpha$ **équations** issues des trois principes. Il manque donc une équation. Cette équation traduit, comme dans le chapitre précédent, la conservation du volume poreux.
On obtient la formule suivante:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} S_\alpha = 1.$$

Cette dernière équation permet la fermeture du système.
En résumé, le modèle final, que l'on nomme "modèle en masses-saturations", s'écrit de manière suivante:

$$\begin{cases} \text{Chercher } P, (S_\alpha)_{\alpha=1,\dots,n_\alpha}, (m_j)_{j=1,\dots,N} \text{ tel que} \\ \dfrac{\partial m_j}{\partial t} - div\left(\displaystyle\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} C_j^\alpha \rho_\alpha \underline{\underline{K}} \frac{kr_\alpha}{\mu_\alpha}(\vec{\nabla} P - \rho_\alpha \vec{g})\right) = q_j \quad j = 1, \dots, N \\ \Phi \rho_\alpha S_\alpha = \displaystyle\sum_{j=1}^{N} \beta_j^\alpha m_j \quad \alpha = 1, \dots, n_\alpha, \\ \displaystyle\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} S_\alpha = 1. \end{cases} \tag{3.3}$$

Pour que le système soit complet, on considère des conditions initiales et aux limites. Les conditions initiales, comme pour le modèle présenté au chapitre précédent, portent sur la pression et les masses tandis que les conditions aux limites peuvent être de deux types: soit sur la pression P (condition de Dirichlet), soit sur les flux $\vec{U}_\alpha.\vec{n}$ avec $\vec{n}$ normale extérieure au domaine (condition de Neumann). Elles peuvent être appliquées soit sur le bord en entier, soit sur une partie du bord, une condition étant sur le bord complémentaire de l'autre.

Dans ce paragraphe, on vient de présenter une nouvelle approche de la modélisation des écoulements des fluides dans un bassin sédimentaire. Il est naturel de comparer cette modélisation en masses-saturations avec la modélisation compositionnelle présentée dans le chapitre précédent. Ceci fait l'objet du second paragraphe.

3.3.2 Comparaison du modèle d'écoulement en masses-saturations avec un modèle classique d'écoulement compositionnel issu des milieux de la modélisation des réservoirs

Le modèle compositionnel a été présenté au paragraphe 2.2.3. On va présenter la principale différence entre les deux modèles sur l'exemple du module de thermodynamique "Black-oil". Ce modèle comporte trois phases: une phase eau notée par l'indice w, une phase huile notée par l'indice o et une phase gaz notée par l'indice g. Il se compose également de trois constituants répartis de la façon suivante:

- le constituant eau, noté w, est présent seulement dans la phase eau, ce qui implique $C_w^w = 1$ et $C_w^o = C_w^g = 0$.
- Le constituant huile ou lourd, noté 1, est présent seulement dans la phase huile , ce qui implique $C_1^w = C_1^g = 0$.
- Le constituant gaz ou léger, noté 2, est présent seulement dans les phases huile et gaz, ce qui implique $C_2^w = 0$ et $C_2^g = 1$.

Les inconnues pour le modèle d'écoulement compositionnel sont:

$$P,\ S_o,\ S_g,\ S_w,\ C_2^o,\ C_1^o.$$

On résout le problème suivant:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial t}(\rho_w S_w \Phi) + div\left(\rho_w \vec{U}_w\right) = 0, \\ \dfrac{\partial}{\partial t}(C_1^o \rho_o S_o \Phi) + div\left(C_1^o \rho_o \vec{U}_o\right) = q_1, \\ \dfrac{\partial}{\partial t}(C_2^o \rho_o S_o \Phi + \rho_g S_g \Phi) + div\left(C_2^o \rho_o \vec{U}_o + \rho_g \vec{U}_g\right) = q_2, \\ S_o + S_g + S_w = 1, \\ C_1^o + C_2^o = 1, \\ C_2^o = K_2^{og}(P). \end{cases}$$

On écrit maintenant le système pour le modèle en masses-saturations.
Comme précisé au paragraphe précédent, les inconnues considérées dans ce cas sont:

$$P,\ S_o,\ S_g,\ S_w,\ m_1,\ m_2$$

.

Le système d' équations s'exprime comme suit:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial(\rho_w S_w \Phi)}{\partial t} + div\left(\rho_w \vec{U}_w\right) = 0, \\ \dfrac{\partial m_1}{\partial t} + div\left(C_1^o \rho_o \vec{U}_o\right) = q_1, \\ \dfrac{\partial m_2}{\partial t} + div\left(C_2^o \rho_o \vec{U}_o + \rho_g \vec{U}_g\right) = q_2, \\ \Phi \rho_o S_o = m_1 + \beta_2^o m_2, \\ \Phi \rho_g S_g = \beta_2^g m_2, \\ S_o + S_g + S_w = 1. \end{cases}$$

La différence réside dans la prise en compte de la thermodynamique qui est liée au choix des inconnues principales. On suppose que l'eau est toujours présente. La difficulté apparaît dans les zones diphasiques huile (eau-huile) et triphasiques.
Commençons d'abord par les zones où les trois phases sont présentes. L'équilibre thermodynamique est présent.
Pour le modèle compositionnel, on obtient que $C_2^o = K_2^{og}(P)$ *i.e.* que C_2^o est une fonction connue de P. C_2^o n'est plus une inconnue. Le système comporte alors quatre inconnues principales qui sont: P, S_o, S_g, S_w.
Pour le modèle en masse, β_2^o qui est évalué à l'aide d'un module thermodynamique donne la répartition de la masse m_2 dans les phases huile et gaz (car on a la relation $\beta_2^o + \beta_2^g = 1$). C_2^o se déduit facilement puisque l'on a la relation $C_2^o = \dfrac{\beta_2^o m_2}{m_1 + \beta_2^o m_2}$. Les inconnues principales qui restent inchangées sont:P, m_1, m_2, S_o, S_g, S_w
Dans le cas diphasique eau-huile ($S_g = 0$), l'équilibre thermodynamique n'a plus lieu.
On le traduit, dans le modèle compositionnel, par la relation $C_2^o < K_2^{og}(P)$. C_2^o devient alors une inconnue du problème. On a alors les quatre inconnues suivantes: P, S_o, S_w, C_2^o.
Le modèle en masse ne change pas d'inconnues et la thermodynamique devient très simple puisque l'on a la relation suivante:

$$S_g = 0 \Rightarrow \beta_2^g = 0 \Rightarrow \beta_2^o = 1,$$

d'où

$$\Phi \rho_o S_o = m_1 + m_2.$$

Au vu de cet exemple simple, on constate que le modèle en masse est pratique à mettre en œuvre puisqu'il n'y a pas de changement d'inconnues au travers du domaine. De plus, lorsque l'on passe à des modèles avec miscibilité des constituants entre toutes les phases, le modèle en masses-saturations comporte moins d'inconnues que le modèle compositionnel [33].

3.4 Modèle en masse de mélange

On présente dans ce paragraphe un modèle que l'on dénomme "modèle en masse de mélange" qui a pour but de réduire le nombre d'inconnues par rapport au modèle en masses-saturations précédent. Pour cela, on élimine les inconnues en saturation qui apparaissent comme des inconnues secondaires. Les inconnues principales retenues pour ce modèle sont au nombre de $N+1$ et sont: P, $(m_j)_{j=1,\ldots,N}$. A titre de comparaison, le modèle en masses-saturations comptait pour les mêmes phénomènes $N+1+n_\alpha$ inconnues et équations. Cette nouvelle formulation permet donc un gain de n_α équations et inconnues. Il reste maintenant à établir les équations associées à ces inconnues principales.

La loi de conservation pour chaque constituant est la même que pour le modèle précédent. Sachant que la vitesse de filtration est donnée par la loi de Darcy pour chaque phase, on obtient les N **équations** de conservation de la masse du constituant j suivantes:

$$\frac{\partial m_j}{\partial t} - div\left(\underline{\underline{K}}\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} C_j^\alpha \frac{kr_\alpha}{\mu_\alpha}\rho_\alpha(\vec{\nabla P} - \rho_\alpha \vec{g})\right) = q_j \; j = 1, \ldots, N.$$

La différence par rapport au modèle en masses-saturations vient de la prise en compte des lois thermodynamiques. On remplace l'équation de conservation du volume poreux et les équations de répartition des constituants dans les phases par une équation de conservation de la masse totale présente dans le bassin. En d'autres termes, on ne considère dans notre bassin qu'un seul fluide, avec plusieurs constituants, le constituant eau étant inclus dans cette phase. La relation thermodynamique retenue pour modéliser ce phénomène est la suivante:

$$\rho\Phi = \sum_{j=1}^{N} m_j. \tag{3.4}$$

avec les notaions suivantes:

- ρ est la densité du mélange,
- Φ est la porosité du domaine,
- m_j est la masse du constituant j.

On obtient donc 1 **équation** supplémentaire. Le bilan des équations est alors de $N+1$ **équations**.

La mise en équation du modèle en masse de mélange devient la suivante:

$$\left\{\begin{array}{l} \text{Chercher } P, (m_j)_{j=1,...,N} \text{ tel que} \\ \dfrac{\partial m_j}{\partial t} - div\left(\underline{\underline{K}}\displaystyle\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} C_j^\alpha \frac{kr_\alpha}{\mu_\alpha}\rho_\alpha(\vec{\nabla P} - \rho_\alpha \vec{g})\right) = q_j, \quad j = 1, ..., N, \\ \rho\Phi = \displaystyle\sum_{j=1}^{N} m_j. \end{array}\right. \tag{3.5}$$

Les notations représentent les quantités suivantes:

- Φ la porosité,
- N le nombre de constituants,
- n_α le nombre total de phases,
- $(\rho_\alpha)_{\alpha=1,...,N}$ la densité de la phase α,
- $(\mu_\alpha)_{\alpha=1,...,N}$ la viscosité de la phase α,
- $(kr_\alpha)_{\alpha=1,...,N}$ la perméabilité relative de la phase α,
- $\underline{\underline{K}}$ la perméabilité absolue,
- $(m_j)_{j=1,...,N}$ la masse du constituant j,
- ρ la densité du mélange,
- $\vec{g}$ la gravité,
- $(C_j^\alpha)_{j=1,...,N\ \alpha=1,...,n_\alpha}$ la fraction massique du constituant j dans la phase α,
- $(q_j)_{j=1,...,N}$ le craquage primaire et secondaire.

On précise que la densité de mélange ρ est une fonction de la pression P, des masses m_j et des cœfficients de répartition β_j^α. Les cœfficients de répartition β_j^α sont des fonctions des masses m_j et des fractions massiques C_j^α, les fractions massiques C_j^α étant donnés par le module thermodynamique et dépendant de la pression P et des masses m_j.
Lorsque l'on regarde les grandeurs intervenant dans le modèle en masse de mélange (3.5), on constate que les saturations de chacune des phases apparaissent par l'intermédiaire des perméabilités relatives. Or, les saturations ne sont plus des inconnues du problème. Il est donc nécessaire d'introduire des équations secondaires pour pouvoir calculer ces quantités. Ces équations sont reprises du modèle en masses-saturations.

Elles sont les suivantes:

$$\rho_\alpha \Phi S_\alpha = \sum_{j=1}^{N} \beta_j^\alpha m_j \quad \alpha = 1, ..., N. \tag{3.6}$$

Une deuxième difficulté pour cette modélisation est la loi de densité de mélange ρ. Cette loi, non analytique, devait être fournie par un module thermodynamique. La difficulté à développer un tel module thermodynamique nous a orienté vers un choix plus analytique. La loi retenue pour l'étude s'exprime de la manière suivante:

$$\rho = \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \rho_\alpha S_\alpha. \tag{3.7}$$

On constate que cette loi tient compte de la phase eau. Ceci n'est pas génant puisque si le module thermodynamique ne fournit qu'une densité de mélange hydrocarbure, il suffira d'ajouter la quantité d'eau $\rho_w S_w$ pour obtenir la formule (3.7).

Remarque 3. *Au regard de la loi de mélange donnée par la formule 3.7, on peut s'étonner de ne pas voir apparaître sa dépendance en fonction des cœfficients de répartition et des masses mais plutôt en fonction des saturations. En fait, la dépendance en fonction des cœfficients de répartition et des masses vient justement au travers des saturations par la formule rappelée en 3.6.*

Enfin, pour terminer l'exposé du modèle en masse de mélange, on présente les conditions aux limites. On impose, comme pour le modèle en masses-saturations, des conditions de Neumann homogènes sur le fond et les bords latéraux du bassin, une condition de Dirichlet non homogène au toit du bassin. Pour les conditions initiales, on se donne une pression hydrostatique dans le bassin et des masses qui sont réparties dans le domaine.

Remarque 4. *Le fait d'introduire l'équation* (3.6) *pour le calcul des saturations et d'avoir retenu la loi* (3.7) *pour le calcul de la densité de mélange, on déduit que le modèle en masse de mélange* (3.5) *est équivalent au modèle en masses-saturations* (3.3). *En effet, les équations de conservation de la masse du modèle en masses-saturations sont identiques à celles du modèle en masse de mélange. De plus, par un calcul simple et en utilisant le fait que* $\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \beta_j^\alpha = 1$, *on a:*

$$\left.\begin{array}{l} \displaystyle\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} S_\alpha = 1 \\ \displaystyle\Phi \rho_\alpha S_\alpha = \sum_{j=1}^{N} \beta_j^\alpha m_j \quad \alpha = 1, \ldots, n_\alpha \end{array}\right\} \Longrightarrow \Phi \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \rho_\alpha S_\alpha = \sum_{j=1}^{N} m_j.$$

On obtient bien exactement la loi thermodynamique du modèle en masse de mélange (3.5). *Le modèle* (3.3) *implique bien le modèle* (3.5) *en supposant* $\rho = \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \rho_\alpha S_\alpha$. *La réciproque est immédiate puisque les relations* $\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \beta_j^\alpha = 1$ *et* $\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} S_\alpha = 1$ *sont conservées.*

3.5 Modèle en masses de composés

3.5.1 modélisation mathématique

On présente la dernière formulation en masse que l'on nommera "modèle en masses de composés". Cette nouvelle formulation se propose de lever la difficulté du choix de la densité de mélange à laquelle on a été confronté dans le paragraphe précédent. De plus, on a vu, dans le modèle précédent, que les saturations des phases apparaissaient dans les lois thermodynamiques alors qu'elles n'étaient pas présentes parmi les inconnues. On a alors été obligé d'introduire des équations secondaires pour calculer ces saturations.
Le nouveau modèle essaye de limiter l'utilisation des saturations dans le modèle en masse (les saturations apparaissent dans les équations de conservation de la masse par l'intermédiaire des perméabilités relatives de chaque phase). On propose donc une nouvelle formulation des équations de thermodynamique. La formule établie pour modéliser les relations thermodynamiques entre les phases et constituants est la suivante:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha}\sum_{j=1}^{N}\frac{\beta_j^\alpha m_j}{\rho_j^\alpha}=\Phi. \tag{3.8}$$

On détaille maintenant l'obtention de cette formule.
On part de la conservation du volume poreux:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} S_\alpha = 1. \tag{3.9}$$

On sait que les saturations de phase sont des quantités sommables.
On pose alors $S_j^\alpha = C_j^\alpha S_\alpha$. On a donc, de par la définition, la relation

$$\sum_{j=1}^{N} S_j^\alpha = S_\alpha. \tag{3.10}$$

En remplaçant la saturation de phase S_α par la relation (3.10) dans l'équation (3.9), on obtient la relation suivante:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha}\sum_{j=1}^{N} S_j^\alpha = 1. \tag{3.11}$$

De plus, la masse de constituant j présent dans la phase α s'écrit sous la forme:

$$m_j^\alpha = \Phi\rho_j^\alpha S_j^\alpha \quad j=1,...,N \ \alpha=1,...,n_\alpha. \tag{3.12}$$

En multipliant l'équation (3.11) par Φ et en utilisant les relations (3.12) on obtient la relation suivante:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha}\sum_{j=1}^{N}\frac{m_j^\alpha}{\rho_j^\alpha}=\Phi. \tag{3.13}$$

Enfin, on utilise une dernière définition des masses de constituants dans une phase à savoir:

$$m_j^\alpha=\beta_j^\alpha m_j \quad j=1,...,N \ \alpha=1,...,n_\alpha. \tag{3.14}$$

Cette relation exprime la répartition de la masse du constituant j dans la phase α connaissant la proportion de ce constituant contenu dans la phase et la quantité globale de masse du constituant j. En reportant cette définition (3.14) de la masse dans la relation (3.13), on trouve finalement la relation (3.8).
Ayant présenté les équations thermodynamiques, on présente le modèle. Il est basé, comme pour les deux modèles précédents, sur les équations de conservation des masses des constituants et sur la loi de comportement de chaque phase. Ce modèle a $N+1$ inconnues qui sont la pression P et les masses $(m_j)_{j=1,...,N}$ comme le modèle en masse de mélange. L'équation thermodynamique et les N lois de conservation de chaque constituant forment les $N+1$ équations associées aux inconnues. Le problème se formule de la façon suivante:

$$\begin{cases} \text{Chercher } P,(m_j)_{j=1,...,N} \text{ tel que} \\ \dfrac{\partial m_j}{\partial t}-div\left(\underline{\underline{K}}\displaystyle\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha}C_j^\alpha\frac{kr_\alpha}{\mu_\alpha}\rho_\alpha(\vec{\nabla}P-\rho_\alpha\vec{g})\right)=q_j, \quad j=1,...,N, \\ \displaystyle\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha}\sum_{j=1}^{N}\frac{\beta_j^\alpha m_j}{\rho_j^\alpha}=\Phi. \end{cases} \tag{3.15}$$

La dépendance des fractions massiques et des cœfficients de répartition est la suivante:

$$\begin{array}{l} C_j^\alpha(P,(m_j)_{j=1,...,N}) \\ \beta_j^\alpha(P,(C_j^\alpha)_{j=1,...,N\ \alpha=1,...,n_\alpha}) \end{array}$$

Les conditions aux limites sont identiques aux modèles précédents à savoir une condition de Neumann homogène sur le fond et les côtés du bassin, une condition de Dirichlet non homogène sur le toit pour simuler la compaction ou l'érosion du bassin. On se donne également une pression initiale hydrostatique et des masses réparties dans le domaine.

Remarque 5. *En regardant le terme de conservation du volume poreux* $\displaystyle\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha}\sum_{j=1}^{N}\frac{\beta_j^\alpha m_j}{\rho_j^\alpha}=\Phi.$ *et la relation qui lie les fractions massiques et les cœfficients de répartition* $\beta_j^\alpha=\dfrac{C_j^\alpha m_\alpha}{m_j}$,

on pourraît exprimer l'équation de conservation du volume poreux uniquement en fonction des fractions massiques (en reportant tout simplement la relation qui lie les fractions massiques aux cœfficients de répartition dans l'équation de conservation du volume poreux, on obtient la relation $\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha}\sum_{j=1}^{N}\frac{C_j^\alpha m_\alpha}{\rho_j^\alpha}=\Phi$*), les masses* m_α *étant données par le module thermodynamique.*
Le choix d'écriture de l'équation de conservation du volume poreux en fonction des cœfficients de répartition prend tout son sens lors de la discrétisation temporelle. En effet, on peut, grâce aux cœfficients de répartition, impliciter plus facilement l'équation à moindre coût de calcul (on implicite seulement les masses et les densités) par rapport à l'expression obtenue avec la formulation en fractions massiques (on est contraint d'utiliser une approximation de la dérivée des fractions massiques qui nécessite des appels coûteux au module thermodynamique). Ceci est un des buts poursuivi tout au long de cette thèse comme on le verra par la suite.

Le paragraphe suivant va être consacré à la comparaison succincte du modèle en masses de composés avec un modèle compositionnel utilisé dans le milieu pétrolier comme dans le cas du modèle en masses-saurations.

3.5.2 Comparaison du modèle en masses de composés avec un modèle compositionnel issu de la modélisation des réservoirs

On présente une formulation d'un modèle compositionnel développé dans le milieu pétrolier par Chen *et al.* [24] et on la compare à la formulation en masses de composés retenue.
La formulation proposée par Chen *et al.* est un modèle triphasique (phase eau, huile gaz par exemple), multiconstituant, compressible et tenant compte de la pression capillaire. De plus, la température est supposée constante et aucun échange de constituants n'intervient entre la phase eau et les phases hydrocarbures. Ces hypothèses correspondent à celles retenues pour notre formulation.
La modélisation des écoulements se fait de la même manière que pour les modèles précédents; on écrit donc le modèle finalisé:

$$\left\{\begin{array}{l} \text{Chercher } \tilde{P}, \tilde{m}_T, \tilde{m}_1, \ldots, \tilde{m}_N \text{ tel que} \\ \dfrac{\partial \tilde{\Phi}\tilde{m}_w}{\partial t} - div\left(\underline{\underline{K}}\dfrac{\tilde{kr}_w}{\tilde{\mu}_w}\tilde{\xi}_w(\vec{\nabla}\tilde{P}_w - \tilde{\rho}_w\vec{g})\right) = \tilde{q}_w, \\ \dfrac{\partial \tilde{\Phi}\tilde{m}_j}{\partial t} - div\left(\underline{\underline{K}}\displaystyle\sum_{\alpha=o,g}\tilde{C}_j^\alpha\dfrac{\tilde{kr}_\alpha}{\tilde{\mu}_\alpha}\tilde{\xi}_\alpha(\vec{\nabla}\tilde{P}_\alpha - \tilde{\rho}_\alpha\vec{g})\right) = \tilde{q}_j \quad j = 1, \ldots, N, \\ \dfrac{\tilde{m}_w}{\tilde{\xi}_w} + \displaystyle\sum_{j=1}^N \dfrac{\tilde{m}_{jg}}{\tilde{\xi}_g} + \sum_{j=1}^N \dfrac{\tilde{m}_{jo}}{\tilde{\xi}_o} = 1. \end{array}\right. \tag{3.16}$$

avec les notations:

- $\tilde{\Phi}$ la porosité,
- N le nombre de constituants,
- $\tilde{m}_j$ nombre total de moles par volume du constituant j,
- $\tilde{m}_T = \tilde{m}_w + \displaystyle\sum_{j=1}^N \tilde{m}_j$ nombre total de moles par volume de tous les fluides,
- $\tilde{\xi}_\alpha$ densité molaire de la phase α,
- $\tilde{m}_{j\alpha}$ nombre de moles par volume du constituant j dans la phase α,
- $\tilde{C}_j^\alpha$ fraction molaire du constituant j dans la phase α,
- $\tilde{\rho}_\alpha$ densité massique de la phase α,
- $\tilde{\mu}_\alpha$ viscosité de la phase α,
- $\underline{\underline{K}}$ perméabilité absolue,

- $\tilde{kr}_\alpha$ perméabilité relative,
- $\tilde{P}_\alpha$ pression de la phase α,
- $\vec{g}$ vecteur accélération.

On rappelle la formulation du modèle en masses de composés pour faciliter la comparaison:

$$\left\{\begin{array}{l} \text{Chercher } P, m_w, m_1, \ldots, m_N \text{ tel que} \\ \dfrac{\partial m_w}{\partial t} - div\left(\underline{\underline{K}}\dfrac{kr_w}{\mu_w}\rho_w(\vec{\nabla}P_w - \rho_w\vec{g})\right) = q_w, \\ \dfrac{\partial m_j}{\partial t} - div\left(\underline{\underline{K}}\displaystyle\sum_{\alpha=o,g} C_j^\alpha \dfrac{kr_\alpha}{\mu_\alpha}\rho_\alpha(\vec{\nabla}P_\alpha - \rho_\alpha\vec{g})\right) = q_j, \quad j = 1, ..., N, \\ \dfrac{m_w}{\rho_w} + \displaystyle\sum_{j=1}^N \dfrac{\beta_j^g m_j}{\rho_j^g} + \sum_{j=1}^N \dfrac{\beta_j^o m_j}{\rho_j^o} = \Phi. \end{array}\right. \tag{3.17}$$

La formulation entre les deux modèles (3.16) et (3.17) est très similaire, mais ne s'exprime pas dans les mêmes unités puisque pour le modèle compositionnel (3.16), les constituants sont des quantités molaires alors que dans le modèle en masses de composés, les quantités sont massiques.
Le modèle compositionnel retient le nombre total de moles des fluides, m_T, comme inconnue alors que la masse d'eau, m_w, est préférée dans le modèle en masses de composés. Les autres inconnues sont identiques et égales en nombre.
Les différences étant notées pour les inconnues, on concentre toute notre attention sur les équations modélisant les écoulements et tout particulièrement sur l'équation de conservation du volume poreux.
On rappelle que $m_j^\alpha = \beta_j^\alpha m_j$. Il vient alors la relation de conservation du volume poreux pour le modèle en masses de composés suivante:

$$\frac{m_w}{\rho_w} + \sum_{j=1}^N \frac{m_j^g}{\rho_j^g} + \sum_{j=1}^N \frac{m_j^o}{\rho_j^o} = \Phi.$$

Cette relation diffère de celle énoncée dans le modèle (3.16) par les points suivants:

- La porosité $\tilde{\Phi}$ du domaine intervient dans la relation de conservation du volume poreux du modèle (3.17) ce qui n'est pas le cas pour l'autre modèle. Cette différence provient des définitions prises pour les constituants. Dans le cas du modèle compositionnel (3.16), le nombre de moles est défini par $\tilde{m}_j = \sum_\alpha \tilde{C}_j^\alpha \tilde{\xi}_\alpha \tilde{S}_\alpha$, *a contrario*, la masse du constituant j est définie par $m_j = \Phi \sum_\alpha C_j^\alpha \rho_\alpha S_\alpha$ pour le modèle en masses de composés (3.17). Cette approche explique aussi le fait que la variation temporelle

du constituant j s'écrive $\dfrac{\partial \tilde{\Phi} \tilde{m}_j}{\partial t}$ dans le cas du modèle (3.16) et $\dfrac{\partial m_j}{\partial t}$ dans l'autre cas.

- Dans le modèle en masses de composés, on introduit la densité du constituant j dans la phase α, $\tilde{\rho}_j^\alpha$, tandis que le modèle compositionnel utilise la densité molaire de la phase α, $\tilde{\xi}_\alpha$.

Le dernier point qui différencie les deux modèles n'est pas lié à la modélisation, mais à la méthode de calcul de m_j^α.
Dans le cas du modèle en masses de composés (3.17), on calcule m_j^α par l'intermédiaire des cœfficients de répartition β_j^α qui sont donnés par un module thermodynamique. On n'est donc pas lié à une méthode particulière d'évaluation. *A contrario*, le modèle compositionnel utilise le potentiel chimique de Gibbs-Duhem pour calculer $\tilde{m}_{j\alpha}$. Les propriétés de ce potentiel sont essentielles pour la suite de la résolution de ce modèle.
On termine ce paragraphe sur deux remarques.

Remarque 6. *La méthode numérique utilisée pour résoudre le modèle* (3.16) *est la méthode d'éléments finis mixtes pour obtenir une bonne précision sur les flux et la pression, et la méthode* ***ELLAM*** *(**E**ulerian-**L**agrangian **L**ocalized **A**djoint **M**ethod) pour résoudre les équations de transport qui sont de type hyperbolique. L'équation en pression est obtenue en utilisant fortement les propriétés du potentiel chimique de Gibbs-Duhem. Ce schéma se propose d'être une alternative au schéma IMPES puisqu'il permet d'avoir de plus grands pas de temps et une meilleure approximation des flux et des constituants. Cette approche implique donc un découplage des cœfficients thermodynamiques. Ce dernier point nous amène à la seconde remarque.*

Remarque 7. *La méthode de résolution du modèle* (3.16) *conduit à découpler le calcul des cœfficients thermodynamique des équations de transport. Cette approche est identique à celle que nous poursuivons (cf. les chapitres 4 et 6). L'algorithme de résolution est le suivant:*

① *initialisation des données.*

② *calcul des cœfficients thermodynamiques.*

③ *calcul des flux et de la pression.*

④ *Résolution des équations de transport.*

⑤ *Si nécessaire, point fixe (ou quelques itérations) sur le système constitué de l'équation en pression, des équations de transport et du module de calcul des cœfficients thermodynamiques.*

⑥ *Retour à l'étape 2.*

Comme on pourra le constater au chapitre 4, l'algorithme énoncé ci-dessus est semblable à celui que l'on propose, à l'étape près de mise à jour des cœfficients thermodynamiques après le transport. Le chapitre 6, consacré à l'étude de la mise à jour des cœfficients thermodynamiques après le transport, permet de retrouver l'algorithme.
Bien que les algorithmes soient semblables, les méthodes utilisées de résolution de chacune de ces étapes sont totalement différentes.

3.6 Les hypothèses et paramètres d'étude

3.6.1 Le domaine d'étude

Le but de notre travail étant l'étude d'un schéma en temps, on considère une géométrie simple pour le bassin. On a retenu un domaine rectangulaire $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ de telle sorte que les couches géologiques soient horizontales. On tiendra compte dans ces couches géologiques de la présence d'un drain afin de pouvoir simuler l'accumulation des hydrocarbures dans la roche magasin. On présente à la figure (3.1) le schéma du bassin qui servira lors des simulations.

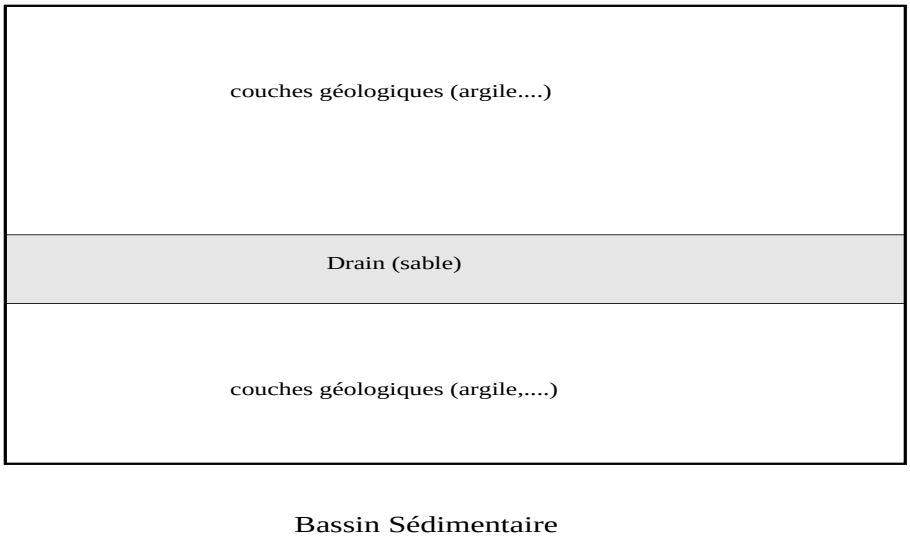


Figure 3.1: Schéma du bassin simulé

Pour les simulations, on considère ce bassin $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ dans le plan $(\vec{x}, \vec{z})$, $\vec{z}$ orienté vers le bas et un intervalle de simulation $[0, T]$.

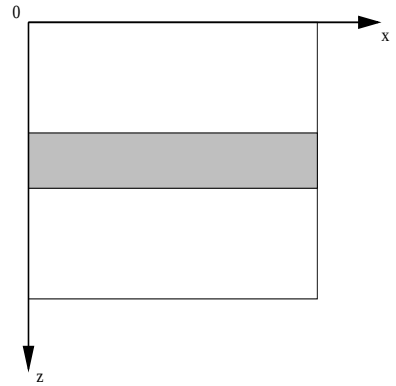


Figure 3.2: Orientation du domaine de simulation

3.6.2 Les hypothèses d'étude

On présente dans ce paragraphe les hypothèses d'étude que l'on a utilisées pour toutes les simulations. On considère deux constituants hydrocarbures, notés m_1 et m_2, qui se répartissent entre deux phases hydrocarbures appelées phase huile et phase gaz et représentées respectivement avec l'indice o et g. On ne tiendra pas compte des phases hydrocarbures solides (coke). Les constituants hydrocarbures présents dans la phase eau, indicée par w, seront supposés négligeables. On n'aura donc aucune miscibilité des phases hydrocarbures dans la phase eau. On supposera, en outre, que cette phase eau sera toujours présente dans le bassin. On suppose de plus que le constituant eau, représenté par l'indice w, ne se retrouve pas (ou de façon négligeable) dans les phases hydrocarbures, ce qui nous amène à identifier le constituant eau et la phase eau (on n'a donc pas de miscibilité de la phase eau dans les phases hydrocarbures). Les grandeurs thermodynamiques intervenant dans le modèle n'ont pas toutes une expression analytique (ainsi en est-il pour le calcul des fractions massiques et des cœfficients de répartition). Elles seront alors données par un module thermodynamique. La modélisation de tels modules thermodynamiques étant compliquée et difficile à obtenir, on a retenu pour l'étude un module thermodynamique quasi analytique appelé "Black-oil". Ce module décrit la miscibilité de deux constituants dans deux phases hydrocarbures. Il est capable de fournir, en tout point du domaine, le nombre de phases hydrocarbures présentes et la répartition des constituants au sein de ces phases. Les calculs de ces répartitions sont basés sur des fonctions analytiques. On rappelle que le modèle ne tient pas compte des pressions capillaires, hypothèse déjà faite lors de la présentation des différents modèles. On a donc une seule pression pour toutes les phases.

La porosité, que l'on a présentée au premier chapitre, dépend de la contrainte effective σ_e. Cette dernière dépend de la contrainte totale σ_T et de P. Cette porosité se caractérise donc par les deux grandeurs σ_T et P, lesquelles sont inconnues. On simplifie le problème de l'évaluation de la porosité en considérant la contrainte totale comme une donnée évoluant au cours du temps. Du fait de cette simplification, on perd une inconnue et donc une équation: la conservation de la matière solide (équation que l'on n'a pas, volontairement, énoncée), *i.e.*, de la roche du domaine. Par conséquent, dans toute la suite, la porosité sera considérée uniquement comme une fonction de la pression.
Enfin, on suppose que la température évolue peu au cours du temps et que ses variations ont peu d'influence sur les quantités thermodynamiques et les propriétés géologiques du bassin. Ces hypothèses, assez fortes (*cf.* 2.1.1, 2.1.4), nous amènent à considérer la température comme constante au cours du temps avec une répartition spatiale dans le bassin définie par un gradient géothermique. On a retenu un gradient de 30^oC par kilomètre avec une température de surface de 10^oC. Cette relation se formule par:

$$T = \frac{3}{100}z + 10.$$

3.6.3 Les paramètres d'étude

Ayant exposé les hypothèses générales d'étude qui s'appliquent à tous les modèles, on présente les différentes lois retenues pour les paramètres de ces modèles.

La porosité

La porosité joue un rôle important dans le comportement des modèles puisque c'est au travers de son comportement que l'on va simuler la compaction ou l'érosion du bassin. La loi retenue (que l'on a développée au paragraphe 2.2.1) pour la porosité est donc la suivante:

$$\begin{cases} \Phi(\sigma_e) = \Phi_r + \Phi_a e^{-(\frac{\sigma_e}{\sigma_a})} + \Phi_b e^{-(\frac{\sigma_e}{\sigma_b})} & \text{si} \quad \sigma_e \geq \sigma_{max}, \\ \Phi(\sigma_e) = \Phi_0 + \frac{1}{E_e}\sigma_e & \text{si} \quad \sigma_e < \sigma_{max}. \end{cases}$$

Il apparaît une dépendance de la porosité en fonction de la contrainte effective σ_e dont on a vu au premier chapitre qu'elle s'exprimait en fonction de la pression P et de la contrainte totale σ_T par la relation suivante:

$$\sigma_e = \sigma_T - P.$$

Il ne reste donc plus qu'à évaluer la contrainte totale pour déterminer entièrement la contrainte effective, et donc la porosité. On a retenu, pour la modélisation, une forme simple de la contrainte totale qui se formule par la relation intégrale suivante:

$$\sigma_T = \int_0^{z_r} (\rho_s(1-\Phi) + \rho_w \Phi) g dz,$$

z_r est la hauteur réelle du bassin, ρ_s la densité de la roche, ρ_w la densité de l'eau.
Φ_r, Φ_a, Φ_b, σ_a, σ_b sont des constantes liées à la géologie des couches.

La perméabilité absolue (ou intrinsèque) $\underline{\underline{K}}$

Le tenseur de perméabilité absolue est supposé diagonal dans le repère $(\vec{s}, \vec{v})$ lié à la géométrie de la couche. Il est, en outre, fonction de la porosité.

$$\underline{\underline{K}} = \underline{\underline{K'}}(\Phi) * \begin{pmatrix} \lambda_s & 0 \\ 0 & \lambda_v \end{pmatrix},$$

où

- λ_s: cœfficient d'anisotropie strate,
- λ_v: cœfficient d'anisotropie verticale,
- $\underline{\underline{K'}}(\Phi)$ est donné par la loi de Koseny-Carman modifiée pour prendre en compte l'effet des faibles porosités [64]. Elle s'exprime de la façon suivante:

$$\underline{\underline{K}}(\Phi) = \begin{cases} \dfrac{0.2\Phi^3}{S_c^2(1-\Phi)^2} & \text{si } \Phi > 0.1, \\ \dfrac{20\Phi^5}{S_c^2(1-\Phi)^2} & \text{sinon }, \end{cases} \tag{3.18}$$

où S_c est la surface spécifique du sédiment, constante pour chaque lithologie. On a par exemple:

- $S_c = 10^6\ m^2$ pour le sable,
- $S_c = 10^8\ m^2$ pour l'argile.

Les perméabilités relatives

Les perméabilités relatives permettent de tenir compte de l'interaction des fluides entre eux. Elles dépendent des saturations et de la lithologie. En générale, les perméabilités relatives sont établies à partir de perméabilités diphasiques qui sont qualibrées de façon expérimentale.
La figure (3.3) représente l'allure de la perméabilité diphasique kr_{ow} pour le couple (kr_{ow}, kr_w). C'est une fonction de la saturation en eau.
On obtient kr_o par des formules d'interpolation à partir des couples (kr_{ow}, kr_w) et (kr_{og}, kr_g). On présente les formules d'interpolation les plus usitées dans le milieu pétrolier [3][23].

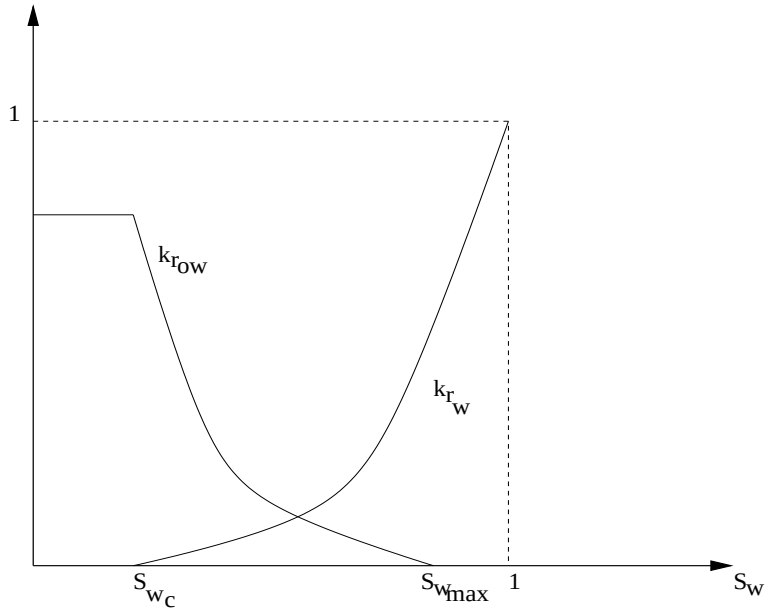


Figure 3.3: perméabilité relative eau-huile

- Formule de Stone I:

$$kr_o(S_g, S_w) = \frac{1 - S_w - S_g}{(1 - S_w)(1 - S_g)} kr_{ow}(S_w) kr_{og}(S_g).$$

- Formule de Stone II:

$$kr_o(S_g, S_w) = \begin{cases} 0 & \text{si } S_w + S_g = 1, \\ (kr_{ow}(S_w) + kr_w(S_w))(kr_{og}(S_g) + kr_g(S_g)) - (kr_w(S_w) + kr_g(S_g)) & \text{sinon .} \end{cases}$$

Pour notre modèle, on utilise une formule d'interpolation géométrique [64]. Elle se présente sous la forme suivante:
soient $\alpha,\ \beta,\ \theta \in \{o, g, w\},\ \alpha \neq \beta \neq \theta,$

$$kr_\alpha(S_\alpha) = \begin{cases} 1 & \text{si } S_\alpha = 1, \\ \dfrac{S_\beta}{S_\beta + S_\theta} kr_{\alpha\beta}(S_\alpha) + \dfrac{S_\theta}{S_\beta + S_\theta} kr_{\alpha\theta}(S_\alpha) & \text{sinon ,} \end{cases}$$

où

$$(kr_{\alpha\epsilon}(S_\alpha))_{\epsilon=\beta,\theta} = \begin{cases} (\dfrac{S_\alpha - S_{i\alpha}}{1 - S_{i\alpha}})^\gamma & \text{si } S_\alpha > S_{i\alpha}, \\ 0 & \text{si } S_\alpha \leq S_{i\alpha}, \end{cases}$$

avec

- $S_{i\alpha}$ saturation irréductible de la phase α,
- γ cœfficient qui vaut en général 1, 2 ou 3.

Les paramètres thermodynamiques

- Pour le calcul des fractions massiques, on utilise les lois suivantes pour évaluer les constantes d'équilibre:

$$K^{\alpha,\beta}(P) = \left(a_\alpha + \frac{b_\alpha}{P} + c_\alpha P\right) e^{(-\frac{e_\alpha}{T+d_\alpha})} \quad \alpha,\beta = o,g \quad \alpha \neq \beta.$$

  avec $(a_\alpha,\ b_\alpha,\ c_\alpha,\ d_\alpha,\ e_\alpha)_{\alpha=o,g}$ des constantes définies par l'utilisateur et T la température définie en Celsius.

- Pour les densités de constituants, les lois sont les suivantes:

$$\rho_j(P,T) = \rho_j^{ref}\left(1 + \alpha_j^{ref}(P - P_j^{ref} - \beta_j^{ref}(T - T_j^{ref})\right) \ j = 1,2,w.$$

  $(\alpha_j^{ref},\ \beta_j^{ref},\ \rho_j^{ref},\ P_j^{ref},\ T_j^{ref})_{j=1,2,w}$ sont des constantes définies par l'utilisateur.

- Pour les densités de constituants, les lois sont les suivantes:

$$\rho_j^\alpha(P,T) = \rho_j^{\alpha,ref}\left(1 + \alpha_j^{\alpha,ref}(P - P_j^{\alpha,ref} - \beta_j^{\alpha,ref}(T - T_j^{\alpha,ref})\right) \ j = 1,2,w \ \alpha = o,g,w.$$

  $(\alpha_j^{\alpha,ref},\ \beta_j^{\alpha,ref},\ \rho_j^{\alpha,ref},\ P_j^{\alpha,ref},\ T_j^{\alpha,ref})_{j=1,2,w\ \alpha=o,g,w}$ sont des constantes définies par l'utilisateur.

- Pour les densités de phases, on utilise les lois suivantes:

$$\rho_\alpha^{-1} = \sum_{j=1}^{2} \frac{C_j^\alpha}{\rho_j} \ \alpha = o,g.$$

- Les viscosités de constituants sont évaluées à partir des expressions suivantes:

$$\mu_j(T) = a\nu_j e^{\frac{b\nu_j}{T}} \ j = 1,2,w,$$

  où a, b, ν_j sont des constantes définies par l'utilisateur.

- Enfin, les viscosités des phases sont données par les expressions suivantes:

$$\mu_\alpha = \prod_{j=1}^{3} (\mu_j)^{C_j^\alpha} \ \alpha = o,g.$$

Ayant présenté les différents modèles d'écoulement, les hypothèses d'étude ainsi que les lois ou formules utilisées pour les paramètres de ces modèles, on s'intéresse maintenant au choix et à la discrétisation de ces différents modèles.

Chapitre 4

Techniques numériques utilisées

Dans ce chapitre, on présente la méthode de discrétisation en espace et le principe général de la discrétisation en temps qui a été retenu pour l'étude des modèles.
Pour la discrétisation en espace, on a retenu un schéma de volumes finis différences finies 5 points sur un maillage cartésien. Le choix des volumes finis semble bien adapté à la simulation des bassins, et on ne débattra pas ici de ce choix. On pourra se référer à I. Faille [31] et R. Belmouhoub [17] pour une discussion plus précise dans le choix de la méthode numérique entre les élements finis et les volumes finis. Le choix des volumes finis a également été induit par le rattachement au projet VISCO 3D [33] développé à partir de TEMISCOMP [64]. I. Faille signale dans sa thèse [31] le fait que les volumes finis 5 points sont mal adaptés aux maillages non réguliers (notamment lorsque le maillage est constitué de trapèzes). Pour cette raison,le choix d'un maillage cartésien a été retenu.

4.1 Présentation générale des Volumes Finis (VF)

La technique des volumes finis est utilisée afin de garder l'aspect conservatif des équations de conservation sur chacune des mailles de discrétisation [30]. On présente, dans ce paragraphe, les principes de cette technique en dimension deux qui se généralisent facilement à la dimension trois et dont le détail se trouve dans le paragraphe suivant.
On commence par discrétiser le domaine en mailles rectangulaires. On repère les centres de chacune des mailles qui serviront de nœuds de discrétisation. On intègre ensuite chacune des équations de conservation sur chaque maille, puis en utilisant une formule de Green, on se ramène à une intégrale de bord. Pour évaluer cette intégrale, on utilise un schéma aux différences finies. Si le schéma ne fait appel qu'aux valeurs des mailles contiguës à la maille de discrétisation, il est connu sous le nom de "schéma 5 points". On obtient alors un système linéaire à résoudre. Dans notre cas, la matrice du système est une matrice bande non symétrique.
Cette technique est connue sous le nom de Volumes Finis Différences Finies centrés sur les mailles.

Remarque 8. *Les résultats de convergence sont difficiles à obtenir lorsque ce type de maillage est déformé [31].*
Une technique pour traiter les géométries complexes consiste à placer d'abord les nœuds de discrétisation, puis à construire les volumes à partir de ces nœuds. L'intégrale sur le bord de ce volume est alors évaluée par une technique d'éléments finis. La technique de discrétisation est appelée Volumes Finis centrés sur les nœuds, connue dans la littérature sous l'appellation C.V.F.E. (Control Volume Finite Element). On renvoie le lecteur, pour plus d'information sur les CVFE, aux références, non exhaustives, suivantes: [34] [35] [51].

4.2 Le schéma de discrétisation en espace (VF5)

Ce paragraphe est consacré à la description du maillage de notre domaine. Celui-ci est construit dans l'optique de l'utilisation d'un schéma volumes finis différences finies centrés sur les mailles: le VF5 (Volumes Finis à 5 points).

4.2.1 Le maillage

On décrit dans ce paragraphe les conditions sur le maillage [17], [30] et[31].
On notera N_1 le nombre de découpages en x et N_2 le nombre de découpages en y.
On découpe le domaine en $N_1 \times N_2$ mailles. Soit Ω_h l'ensemble des mailles du domaine discrétisé: $\Omega_h = \{M_{ij}, 1 \leq i \leq N_1; 1 \leq j \leq N_2\}$. Les éléments de Ω_h sont des rectangles deux à deux disjoints et vérifiant

$$\overline{\Omega} = \bigcup_{i,j} M_{i,j}, \quad 1 \leq i \leq N_1,\ 1 \leq j \leq N_2.$$

On supposera que les côtés des mailles sont parallèles aux axes de coordonnées. Elles vérifient de plus les conditions suivantes:
soient $M_{ij}, M_{kl} \in \Omega_h$, on a:

$$M_{ij} \bigcap M_{kl} = \begin{cases} \emptyset & \text{ou ,} \\ \text{un sommet commun} & \text{ou} \\ \text{une arête commune.} & \end{cases}$$

On définit maintenant les centres des mailles qui représenteront les nœuds de discrétisation. A cette fin, on introduit les notations à l'aide du graphique (4.1).

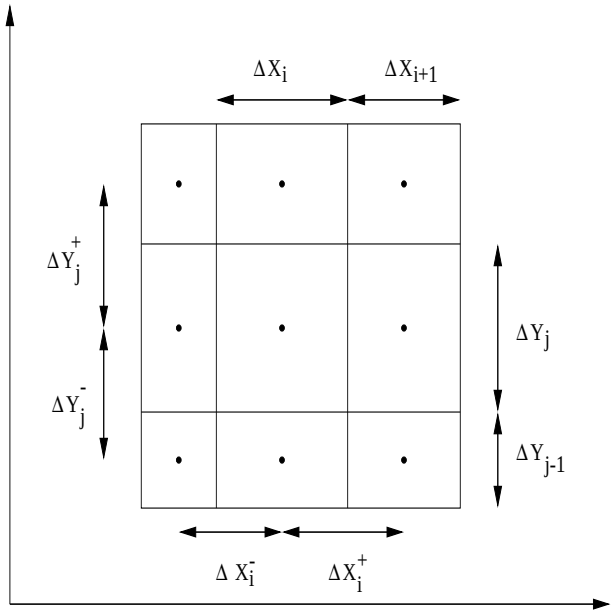


Figure 4.1: notation pour la discrétisation en volumes finis

Soit A_{ij} un point du domaine. A_{ij} a pour coordonnées (x_i, y_j). A_{ij} est le centre d'une maille si ses coordonnées vérifient l'une des quatre propriétés suivantes:

$$(1) \begin{cases} x_i = x_{i-1} + \Delta X_i^- \\ y_j = y_j \end{cases} ; \quad (2) \begin{cases} x_i = x_{i+1} - \Delta X_i^+ \\ y_j = y_j \end{cases} ;$$
$$(3) \begin{cases} x_i = x_i \\ y_j = y_{j-1} + \Delta Y_j^- \end{cases} ; \quad (4) \begin{cases} x_i = x_i \\ y_j = y_{j+1} - \Delta Y_j^+ \end{cases} ;$$

où l'on a défini

- pour les mailles aux bords:
$$\begin{cases} \Delta X_i^{\pm} = \dfrac{\Delta X_i}{2} \\ \Delta Y_j^{\pm} = \dfrac{\Delta Y_j}{2} \end{cases} ,$$
- pour les mailles à l'intérieur:
$$\begin{cases} \Delta X_i^{\pm} = \dfrac{\Delta X_{i\pm1} + \Delta X_i}{2} \\ \Delta Y_j^{\pm} = \dfrac{\Delta Y_{j\pm1} + \Delta Y_j}{2} \end{cases} .$$

Remarque 9. *On ne considère pas ici de raffinement local de maillage.*

Maintenant que l'on a défini le maillage de notre domaine, on peut passer à la discrétisation en espace. Dans le paragraphe suivant, on présente la méthode de discrétisation du VF5 sur l'exemple simple du Laplacien.

4.2.2 Un exemple de volumes finis: le VF5

On considère l'exemple suivant:

$$\begin{cases} -\Delta P = f & \text{dans } \Omega \subset \mathbb{R}^2 \\ \dfrac{\partial P}{\partial n} = 0 & \text{sur } \Gamma. \end{cases}$$

Ω est un domaine rectangulaire de frontière Γ. On suppose que les fonctions P et f ont la régularité nécessaire pour donner un sens à toutes les opérations. De plus, f vérifie $\int_\Omega f\,dx = 0$ afin d'assurer l'existence d'une solution. L'unicité est obtenue à une constante près. Ce modèle permet de présenter, sur un modèle simple, la méthode des volumes finis. Par soucis de simplicité, on a retenu une condition de Neumann homogène pour ne pas avoir à traiter les conditions de bord qui alourdissent la présentation.
On va maintenant résoudre ce système avec le schéma VF5. Tout d'abord, on introduit une discrétisation du domaine. Le maillage est celui défini dans le paragraphe précédent. Soit le maillage Ω_h. Soit une maille $M_k \in \Omega_h$. On notera, par la suite, ∂M_k le bord de la maille, δ une arête de M_k et M_{k_δ} la maille contiguë à M_k ayant pour arête commune δ.
L'intégration de l'équation $-\Delta P = f$ sur la maille M_k donne

$$\int_{M_k} -\Delta P dx = \int_{M_k} f\,dx.$$

En utilisant une formule de Green on obtient:

$$\int_{\partial M_k} -\vec{\nabla} P.\vec{n} d\sigma = \int_{M_k} f\,dx,$$

où $\vec{n}$ est la normale unitaire le long de ∂M_k, orientée vers l'extérieur de la maille.
Pour le calcul du flux on adopte la technique des différences finies.
On peut écrire l'intégrale de bord sous la forme:

$$\int_{\partial M_k} -\vec{\nabla} P.\vec{n} d\sigma = \sum_{\delta \in \partial M_k} \int_\delta -\vec{\nabla} P.\vec{n_\delta} d\sigma,$$

avec $\vec{n_\delta}$ la normale unitaire orientée vers l'extérieur du bord δ.
Sachant que P est constante par maille par hypothèse, l'intégrale sur le bord δ s'évalue alors de la façon suivante:

$$\int_\delta -\vec{\nabla} P.\vec{n_\delta} = -\frac{P_{M_{k_\delta}} - P_{M_k}}{d(M_{k_\delta}, M_k)}\, mes\delta, \tag{4.1}$$

où

- $mes\delta$ est la longueur du coté ou l'aire de la face δ,
- $d(M_{k_\delta}, M_k)$ est la distance entre les deux centres des deux mailles contiguës.

Le flux se discrétise de la manière suivante:

$$\int_{\partial M_k} -\vec{\nabla} P.\vec{n} = -\sum_{\delta \in \partial M_k} \frac{P_{M_{k_\delta}} - P_{M_k}}{d(M_{k_\delta}, M_k)} \, mes\delta.$$

Comme on est en dimension deux (2D) et que les mailles de discrétisation sont des rectangles, la configuration de discrétisation autour d'une maille M_1 est la suivante:

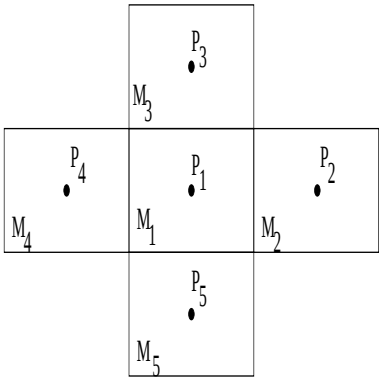


Figure 4.2: configuration du schéma à 5 points

Si on suppose que le pas de discrétisation en x et en y est identique (*ie* $\Delta x = \Delta y$), on obtient que $d(M_{k_\delta}, M_k) = mes\delta = \Delta x$. Le flux discrétisé sur la maille M_1 s'écrit alors:

$$\int_{\partial M_1} -\vec{\nabla} P.\vec{n} = 4P_1 - P_2 - P_3 - P_4 - P_5.$$

On obtient ainsi 5 points de discrétisation.
Cette méthode se généralise sans difficulté au cas de dimension trois (3D). Dans ce cas, le schéma obtenu est un schéma à 7 points (VF7).

4.3 Discrétisation en temps

4.3.1 Calcul de la porosité

Dans ce paragraphe, on présente la méthode numérique de calcul de la porosité, grandeur qui permet de simuler la compaction ou l'érosion du domaine.
On rappelle tout d'abord, l'expression de la porosité (*cf.* 2.2.1 pour la relation exacte):

$$\Phi = \Phi_r + \Phi_a e^{-(\frac{\sigma_e}{\sigma_a})} + \Phi_b e^{-(\frac{\sigma_e}{\sigma_b})},$$

où σ_e représente la contrainte effective dont l'expression est donnée par la formule suivante:

$$\sigma_e = \sigma_T - P,$$

avec σ_T la contrainte totale.
Dans cette formule, on voit apparaître la pression P et la contrainte totale σ_T qui a pour expression:

$$\sigma_T = \int_0^{z_r} \{\rho_w \Phi + \rho_s(1-\Phi)\} g dz, \tag{4.2}$$

où

- z_r hauteur réelle du bassin,
- ρ_w densité de l'eau,
- ρ_s densité de la roche,
- Φ porosité.

Si on suppose que cette contrainte totale est connue, la porosité devient seulement fonction de la pression. C'est l'hypothèse retenue pour la suite.
On commence par calculer une contrainte totale initiale par l'intégrale (4.2). Pour cela, on se donne une porosité Φ de la forme:

$$\Phi = az + b,$$

- z est la hauteur en tout point du bassin,
- a, b des cœfficients donnés.

puis on évalue l'intégrale. Une fois la contrainte totale initiale calculée, on évalue σ_T au cours du temps par la formule suivante:

$$\sigma_T^{n+1} = \sigma_T^n + \Delta\sigma_T,$$

où la variation de la contrainte totale, σ_T,est donnée par:

$$\Delta\sigma_T = \Delta h_s \rho_s^{ref} g + \frac{\Delta h_s \Phi_{ref}}{1 - \Phi_{ref}} \rho_w g,$$

- Φ_{ref} est une porosité de référence qui est en général supérieure à 50%,
- $\Delta h_s = v_s * \Delta t$ est la variation de la matière solide au cours du temps,
- v_s la vitesse de sédimentation,
- ρ_w^{ref} une densité de référence de l'eau,
- ρ_s^{ref} une densité de référence de la roche,
- $g = 9.81 m.s^{-1}$ constante du vecteur accélération de la pesanteur.

Une fois la contrainte totale évaluée, on peut finalement calculer la contrainte effective σ_e en effectuant le calcul suivant:

$$\sigma_e^{k,n+1} = \sigma_T^{n+1} - P^k.$$

où l'indice k peut prendre les valeurs n ou $n+1$ selon la méthode de résolution retenue pour les modèles.

4.3.2 Splitting du terme source

Le système étudié peut être représenté par l'écriture littérale suivante:

$$termes\ de\ transport + termes\ de\ craquage = 0.$$

Ce système a deux types de couplage, un premier couplage entre les termes de transport et de craquage par l'intermédiaire des masses, et un second couplage entre les équations par le biais de la thermodynamique qui est contenue dans le terme de transport.
Avant de passer aux techniques de découplage utilisées, on regarde avec plus d'attention le comportement des phénomènes physiques mis en jeu.
Lors de la formation d'un bassin, le kérogène génère des masses hydrocarbones (craquage primaire). Ces masses vont se répartir entre des phases (module thermodynamique) lors de leur migration (transport) dans ce bassin. Dans le même temps, si ces masses sont instables, elles craquent en d'autres constituants (craquage secondaire). On constate que le craquage primaire est un phénomène un peu isolé par rapport au transport, à la répartition des constituants dans les phases et à la dégradation des composés instables; ces trois derniers étant fortement couplés.
Au vu de ce comportement, une première approche est de commencer par évaluer les constituants générés par craquage primaire et secondaire, puis de transporter les constituants

au travers du bassin. Mathématiquement, cette méthode de découplage porte le nom de splitting sur l'opérateur temps. On obtient alors deux équations à résoudre. La première résout le craquage et s'écrit sous la forme:

$$\frac{\partial m_j}{\partial t} = x_0 \sum_{l=1}^{L} a_{lj} x_l + \sum_{i=1}^{N_{hc}} b_{ij} m_i, \quad j = 1, \ldots, N_{hc},$$

où N_{hc} représente le nombre de constituants hydrocarbures, le constituant eau étant exclu. La seconde équation à résoudre, celle de transport, se formule comme suit:

$$\frac{\partial m_j}{\partial t} - div(\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} C_j^\alpha \rho_\alpha \underline{\underline{K}} \frac{kr_\alpha}{\mu_\alpha} (\vec{\nabla} P - \rho_\alpha \vec{g})) = 0, \quad j = 1, \ldots, N.$$

avec

- N le nombre total de constituants (constituant eau inclus),
- n_α le nombre total de phases (phase eau incluse).

Le principe de ce splitting en temps est de calculer une première valeur de la quantité cherchée par la première équation, puis de "corriger" cette première approximation par la seconde équation.
Dans le paragraphe suivant, on présente la technique générale, appliquée à tous les modèles, de discrétisation des équations de transport (équations qui correspondent aux équations de conservation de la masse de chaque constituant et aux équations de conservation du volume poreux).

4.3.3 Schéma retenu pour le calcul des écoulements

Description de la technique IMPES

Dans ce paragraphe, on décrit le schéma IMPES (**IM**plicit **P**ressure **E**xplicit **S**aturations) dans le cas simple d'un écoulement diphasique afin de bien mettre en valeur la méthode qui sera appliquée sur nos modèles. La méthode de discrétisation IMPES n'est pas la seule possible. Des méthodes totalement implicites sont envisageables mais sont très coûteuses en temps de calcul et difficiles à mettre en œuvre du fait de l'utilisation d'équations non linéaires. Les méthodes de Newton sont alors utilisées pour les résoudre. Notre objectif étant d'éviter de telles méthodes implicites, on s'est basé sur une approche de type IMPES que l'on va maintenant décrire.
Le modèle qui va servir de support pour décrire la méthode est un cas diphasique (eau-huile par exemple), immiscible, incompressible, un seul constituant par phase dont les inconnues sont la pression P et les saturations des phases eau et huile respectivement S_w et S_o, dans un milieu homogène (on peut ainsi normaliser la porosité). Le système d'équations est le suivant:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S_w}{\partial t} - div\left(\underline{\underline{K}}\dfrac{kr_w}{\mu_w}(\vec{\nabla}P - \vec{g})\right) = 0, \\ \dfrac{\partial S_o}{\partial t} - div\left(\underline{\underline{K}}\dfrac{kr_o}{\mu_w}(\vec{\nabla}P - \vec{g})\right) = 0, \\ S_w + S_o = 1. \end{cases} \tag{4.3}$$

On introduit une notation couramment utilisée dans le milieu pétrolier que l'on appelle transmissivité ou transmissibilité qui s'exprime sous la forme générale de la manière suivante:

$$T_j^\alpha = C_j^\alpha \frac{kr_\alpha}{\mu_\alpha}\rho_\alpha \ j = 1, \ldots, N \ \alpha = 1, \ldots, n_\alpha.$$

Dans notre exemple, du fait de la non miscibilité et de l'incompressibilité des phases et de la présence d'un seul constituant par phase on obtient:

$$T_w^w = \frac{kr_w}{\mu_w} \quad ; \quad T_o^o = \frac{kr_o}{\mu_o}.$$

Le système (4.3) devient alors:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S_w}{\partial t} - div\left(\underline{\underline{K}}T_w^w(\vec{\nabla}P - \vec{g})\right) = 0, \\ \dfrac{\partial S_o}{\partial t} - div\left(\underline{\underline{K}}T_o^o(\vec{\nabla}P - \vec{g})\right) = 0, \\ S_w + S_o = 1. \end{cases} \tag{4.4}$$

Pour résoudre ce système, on prend la pression de façon implicite pour des raisons de stabilité numérique (*cf.* Lemmonier [41] par exemple). Les saturations et les flux (transmissibilité et perméabilité absolue) sont pris de façon explicite, d'où le nom de la méthode IMPES. Le système discrétisé est le suivant:

$$\Delta S_w = \Delta t * div\left(\underline{\underline{K}}^n(T_w^w)^n(\vec{\nabla}P^{n+1} - \vec{g})\right), \tag{4.5a}$$

$$\Delta S_o = \Delta t * div\left(\underline{\underline{K}}^n(T_o^o)^n(\vec{\nabla}P^{n+1} - \vec{g})\right), \tag{4.5b}$$

$$\Delta S_w + \Delta S_o = 0. \tag{4.5c}$$

pour lequel la notation $(T_\alpha^\alpha)^n$ signifie $(T_\alpha^\alpha)^n = \dfrac{kr_\alpha^n}{\mu_\alpha^n} \quad \alpha = o, w$
et la notation $\Delta X = X^{n+1} - X^n$.

En reportant les équations (4.5a) et (4.5b) dans (4.5c), on obtient une équation dépendante de la seule inconnue de pression P. Cette équation est appelée *équation en pression* et s'exprime de la manière suivante:

$$\Delta t * div \left(\underline{\underline{K}}^n \{(T_w^w)^n + (T_o^o)^n\} (\vec{\nabla} P^{n+1} - \vec{g}) \right) = 0. \tag{4.6}$$

Une fois la pression P calculée à partir de l'équation (4.6), on calcule facilement les nouvelles saturations à partir des équations (4.5a) et (4.5b).

Remarque 10. *Pour évaluer les nouvelles saturations de phase, on peut remplacer l'équation* (4.5a) *ou* (4.5b) *par l'équation* (4.5c).

Méthode générale du schéma IMPES appliquée à notre cas

Le système que l'on a résoudre est fortement couplé en masse, pression et saturation. Comme on veut un schéma peu coûteux en temps de calcul, on s'est donc orienté vers un schéma de type IMPES. On a pris la pression en implicite pour des raisons de stabilité numérique comme signalé précédemment, tandis que les saturations, les masses et les flux sont pris en explicite. Ces approximations numériques en temps permettent également de découpler les grandeurs thermodynamiques du transport à savoir fractions massiques, viscosités et densités de chaque phase. Toutefois, ces approximations supposent qu'il n'y ait pas une trop grande variation des flux entre deux pas de temps. On voit, par cette hypothèse, l'introduction d'une contrainte de type *C.F.L.* sur le pas de temps. On espère que celle-ci ne sera pas trop pénalisante.

4.3.4 Découplage Thermodynamique-Transport

Les fractions massiques, les densités et les viscosités de phases sont des grandeurs thermodynamiques dépendantes de la pression, de la température, des masses et des cœfficients de répartition. Ces grandeurs ont, en général, des expressions analytiques. La difficulté dans ces expressions consiste en l'évaluation des cœfficients de répartition qui sont usuellement donnés par un module thermodynamique. Un nombre important d'appel à ce module thermodynamique peut s'avérer coûteux en temps de calcul. Dans le paragraphe précédent, la méthode IMPES a permis de découpler ces grandeurs thermodynamiques du transport. Dans le cas d'une trop forte contrainte liée à l'explicitation des flux, on pourrait envisager de les impliciter. Dans ces conditions, les fractions massiques, les densités et les viscosités seraient prises en implicite et une méthode de Newton serait utilisée afin de résoudre ce système non linéaire. Toutefois, et cette approche est importante à souligner, on garderait les cœfficients de répartition en explicite afin d'éviter de trop nombreux appels au module thermodynamique pendant les itérations de Newton.
En résumé, dans le concept énoncé sous le terme thermodynamique, on distingue deux "thermodynamiques" qui seront traitées de façon différente par la suite. La "première

thermodynamique" possède une expression analytique des paramètres, comme pour les densités, viscosités et les fractions massiques, la "seconde thermodynamique" ne possède pas d'expression analytique comme pour les cœfficients de répartition. Le premier type de thermodynamique peut être implicité ou explicité, le second type de thermodynamique sera gardé explicite quelque soit le schéma en temps retenu pour les autres grandeurs thermodynamiques.

4.3.5 Résumé de la discrétisation en temps

Les différentes étapes de résolution que l'on a retenues pour la discrétisation temporelle de nos modèles se synthétisent par le schéma suivant:

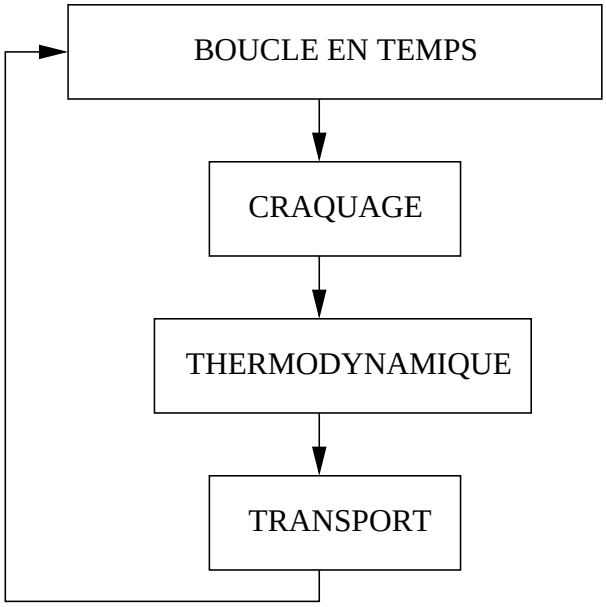


Figure 4.3: étape de résolution d'un pas de temps

L'étape de craquage qui apparaît dans le schéma fait référence au splitting du terme source. L'étape de thermodynamique est le calcul des cœfficients de répartition que l'on a décidé de traiter de façon explicite. Cependant, comme on utilise un schéma IMPES, on a vu que les grandeurs thermodynamiques intervenant dans les flux étaient prises de façon explicite. On calculera donc, lors de cette étape, ces grandeurs thermodynamiques. Enfin, l'étape de transport est la résolution des équations de conservation de la masse de chaque constituant et des équations de conservation du volume poreux. De façon plus précise, la méthode de discrétisation temporelle étant un schéma IMPES, cette étape de transport est constituée de la résolution de l'équation en pression dans un premier temps, puis de l'évaluation des masses et enfin du calcul des saturations.

Chapitre 5

Comparaison des trois modèles d'écoulement

5.1 Introduction

Dans ce chapitre, on présente la discrétisation en temps et en espace de chacun des modèles ainsi que les résultats numériques associés. On ne présente que les simulations finales de validation des modèles ainsi que leurs limites ou inconvénients. Les schémas et le code ont été écrits dans le cas multiphasique et multiconstituant à l'exception du module thermodynamique qui est spécifique à chaque cas. A cette occasion, le code a été développé de façon modulaire (afin de pouvoir adapter ou modifier des objets sans réécrire l'ensemble du code) en langage orienté objet C++ sous la plate forme de développement Diffpack. Les étapes de validation du code, pour chacun des modèles, ont été les suivantes:

- Simulations en monophasique eau avec une densité constante afin de valider la bonne prise en compte du phénomène de compaction.
- Simulations en monophasique eau avec une densité compressible (une plage de valeur a été simulée afin de commencer à observer le comportement du modèle dans un cas simple) qui valident la prise en compte de certains paramètres thermodynamiques (densités, viscosités).
- Simulations en diphasique incompressible et immiscible afin de compléter la validation de la prise en compte des perméabilités relatives.
- Simulations en diphasique compressible et immiscible afin de tester la robustesse du code indépendamment des paramètres thermodynamiques (fractions massiques et cœfficients de répartition).
- Simulations en triphasique incompressible/compressible et miscibilité entre la phase huile et la phase gaz afin de valider et d'analyser le comportement des approximations faites sur les cœfficients thermodynamiques.

Les résultats numériques présentés sont tirés du dernier cas de validation. On décrit ci-dessous les conditions de simulation qui resteront identiques pour toutes les simulations effectuées dans ce chapitre.

Les conditions de simulation

On simule des écoulements triphasiques (eau, huile, gaz) dans un bassin carré de dimensions $[0, 5000] \times [0, -5000]$. Le domaine possède trois couches géologiques distinctes, deux couches d'argile imperméables séparées par une couche de sable perméable qui sert de drain. L'argile du toit du bassin est très imperméable ce qui permet d'éviter une migration trop rapide des hydrocarbures vers le toit. Cette argile sert de couverture, élément essentiel pour le piégeage des hydrocarbures. Le drain sert donc de roche magasin. La génération des hydrocarbures s'effectue dans un coin au fond du bassin. La vitesse de sédimentation est une fonction affine en espace et en temps. Enfin, on simule la migration de trois constituants, le constituant eau et deux constituants hydrocarbures (un léger et un lourd). Les deux constituants hydrocarbures se répartissent au sein des deux phases hydrocarbures: l'une liquide, appelée huile, et l'autre vapeur, appelée gaz. Cette répartition se fait grâce à un module thermodynamique "Black-oil" qui prend en compte la gestion de deux constituants au sein de deux phases hydrocarbures. La viscosité des constituants ne dépend que de la température qui est constante au cours du temps. Par conséquent, les viscosités des constituants sont également constantes au cours du temps, mais du fait du gradient géothermique, elles évoluent en espace. Les viscosités de phase ne sont pas, quant à elles, constantes au cours du temps puisqu'elles sont calculées comme une moyenne pondérée par les fractions massiques qui évoluent au cours du temps. Les densités de constituant sont incompressibles ou compressibles selon les cas. Dans le cas où les densités de constituant sont incompressibles (constantes en temps puisqu'elles ne dépendent plus de la pression, mais pas en espace puisqu'elles dépendent de la température), les densités de phase ne sont pas, comme pour les viscosités, constantes au cours du temps ni en espace. En effet, ces dernières dépendent des fractions massiques qui évoluent au cours du temps en fonction de la pression et des masses. Enfin, le temps de simulation est de 20 **M**illions d'**a**nnées (*Ma*).

Remarque 11. *Les résultats numériques que l'on présente ne tiennent pas compte du craquage secondaire puisque son influence n'est pas déterminante sur le pas de temps.*

5.2 Le modèle en Masses-Saturations

5.2.1 Discrétisation du modèle

On présente tout d'abord le système discrétisé en temps et en espace à résoudre. Afin de faciliter la lecture et la compréhension de l'exposé, on distingue le cas de la phase eau qui n'est miscible avec aucune autre phase hydrocarbure et le cas des phases hydrocarbures. On considère une maille V de discrétisation. On note V_δ une maille voisine ayant comme côté commun δ. Afin de ne pas aloudir les notations, les quantités dépendantes de la maille V ne portent pas l'indice de cette maille. Le système s'écrit de la façon suivante:

$$m_j^{n+\frac{1}{2}} = m_j^n + \Delta t\, x_0 \sum_{l=1}^{L} a_{lj}^{n+\frac{1}{2}} x_l^{n+\frac{1}{2}} + \Delta t \sum_{i=1}^{N_{hc}} b_{ij}^{n+\frac{1}{2}} m_i^{n+\frac{1}{2}} \quad j = 1, \ldots, N_{hc}, \tag{5.1a}$$

$$\Phi^{n+1}\rho_w^n S_w^{n+1} = \Phi^n \rho_w^{n-1} S_w^n + \frac{\Delta t}{mesV} \sum_{\delta \in \partial V} mes\delta K_\delta^n \Big\{ (T_w^w)_{\delta,amt}^n \frac{P_{V_\delta}^{n+1} - P^{n+1} - (\rho_w)_\delta^n g(z_{V_\delta} - z)}{d(V, V_\delta)} \Big\}, \tag{5.1b}$$

$$\begin{aligned} m_j^{n+1} =& m_j^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{mesV} \sum_{\delta \in \partial V} mes\delta K_\delta^n \\ & \Big\{ \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} (T_j^\alpha)_{\delta,amt}^{n,n+\frac{1}{2}} \frac{P_{V_\delta}^{n+1} - P^{n+1} - (\rho_\alpha)_\delta^{n+\frac{1}{2}} g(z_{V_\delta} - z)}{d(V, V_\delta)} \Big\} \quad j = 1, \ldots, N_{hc}, \end{aligned} \tag{5.1c}$$

$$\sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \Phi^{n+1} S_\alpha^{n+1} = \Phi^{n+1}, \tag{5.1d}$$

$$\Phi^{n+1} S_\alpha^{n+1} = (\frac{1}{\rho_\alpha})^{n+\frac{1}{2}} \sum_{j=1}^{N_{hc}} (\beta_j^\alpha)^{n+\frac{1}{2}} m_j^{n+1}, \quad \alpha = 1, \ldots, Nc_p, \tag{5.1e}$$

avec les notations suivantes:

- N_{hc} nombre de constituants hydrocarbures,
- Nc_p nombre de phases hydrocarbures,
- n_α nombre total de phases,
- ∂V nombre de faces (ou arêtes) de la maille de discrétisation V,
- T_j^α la transmissivité du constituant j dans la phase α.

La discrétisation des termes de transmissivité est la suivante:

$$(T_w^w)^n = \frac{kr_w^n}{\mu_w^n}\rho_w^n \quad ; \quad (T_j^\alpha)^{n,n+\frac{1}{2}} = (C_j^\alpha)^{n+\frac{1}{2}} \frac{kr_\alpha^n}{\mu_\alpha^{n+\frac{1}{2}}}\rho_\alpha^{n+\frac{1}{2}} \quad j = 1, \ldots, N_{hc} \; \alpha = 1, \ldots, Nc_p.$$

Lors de la discrétisation, on a introduit le décentrage amont pour le calcul du terme sur les bords. Ce décentrage permet de prendre en compte les ondes de choc qui apparaissent avec les équations hyperboliques sur les masses et saturations. Il se calcule, à chaque interface de la maille V, de la manière suivante:

$$(T_j^\alpha)_{\delta,amt} = \begin{cases} (T_j^\alpha)_V & \text{si } \vec{U}_\alpha.\vec{n} < 0, \\ (T_j^\alpha)_{V_\delta} & \text{sinon.} \end{cases}$$

On a vu au chapitre précédent que pour la méthode IMPES, on écrivait une équation en pression. En reportant les équations (5.1b), (5.1c) et (5.1e) dans l'équation (5.1d), on obtient l'équation en pression recherchée suivante:

$$\begin{aligned} \sum_{\delta \in \partial V} mes\delta K_\delta \Bigg(& \sum_{j=1}^{N_{hc}} \gamma_j^{n+\frac{1}{2}} \{ \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} (T_j^\alpha)_{\delta,amt}^{n+\frac{1}{2}} \frac{P_{V_\delta}^{n+1} - P^{n+1} - (\rho_\alpha)_\delta^{n+\frac{1}{2}} g(z_{V_\delta} - z)}{d(V, V_\delta)} \} \\ & + (\frac{1}{\rho_w})^n (T_w^w)_{\delta,amt}^n \frac{P_{V_\delta}^{n+1} - P^{n+1} - (\rho_w)_\delta^n g(z_{V_\delta} - z)}{d(V, V_\delta)} \Bigg) \\ & + \frac{mesV}{\Delta t} \{ \frac{\rho_w^{n-1}}{\rho_w^n} \Phi^n S_w^n - (\Phi^n + (\frac{\partial \Phi}{\partial P})^n P^n) + \sum_{j=1}^{N_{hc}} \gamma_j^{n+\frac{1}{2}} m_j^{n+\frac{1}{2}} \} \\ & - \frac{mesV}{\Delta t} (\frac{\partial \Phi}{\partial P})^n P^{n+1} = 0, \end{aligned}$$

en posant $\gamma_j^{n+\frac{1}{2}} = \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} (\frac{\beta_j^\alpha}{\rho_\alpha})^{n+\frac{1}{2}}$.

Cette équation est linéaire en la variable P puisque le terme de porosité a été linéarisé.

Remarque 12. *On constatera qu'il y a trois notations d'indice pour la discrétisation en temps. L'indice n représente l'indice de temps du pas de temps précédent, l'indice $n+1$ l'indice de fin de pas de temps et enfin l'indice $n+\frac{1}{2}$ représente l'indice en début de pas de temps. On a introduit la notation $n+\frac{1}{2}$ pour distinguer les quantités qui sont issues du pas de temps précédent de celles qui sont calculées après l'étape de craquage (splitting en temps). Comme on le signalait dans le chapitre précédent, des masses sont calculées en début de pas de temps. Ces masses vont influencer les quantités thermodynamiques. Au lieu de garder ces quantités issues directement du pas de temps précédent (par choix pour les cœfficients de répartition, liées au schéma de discrétisation IMPES pour les autres*

grandeurs thermodynamiques), on a décidé de les impliciter un peu plus en les réactualisant après le splitting. On notera que, dans le cas où le craquage secondaire n'est pas pris en compte, les grandeurs thermodynamiques sont identiques à celle du pas de temps précédent à l'exception des mailles de roche mère, lieu où le craquage primaire agit.

5.2.2 Résultats numériques

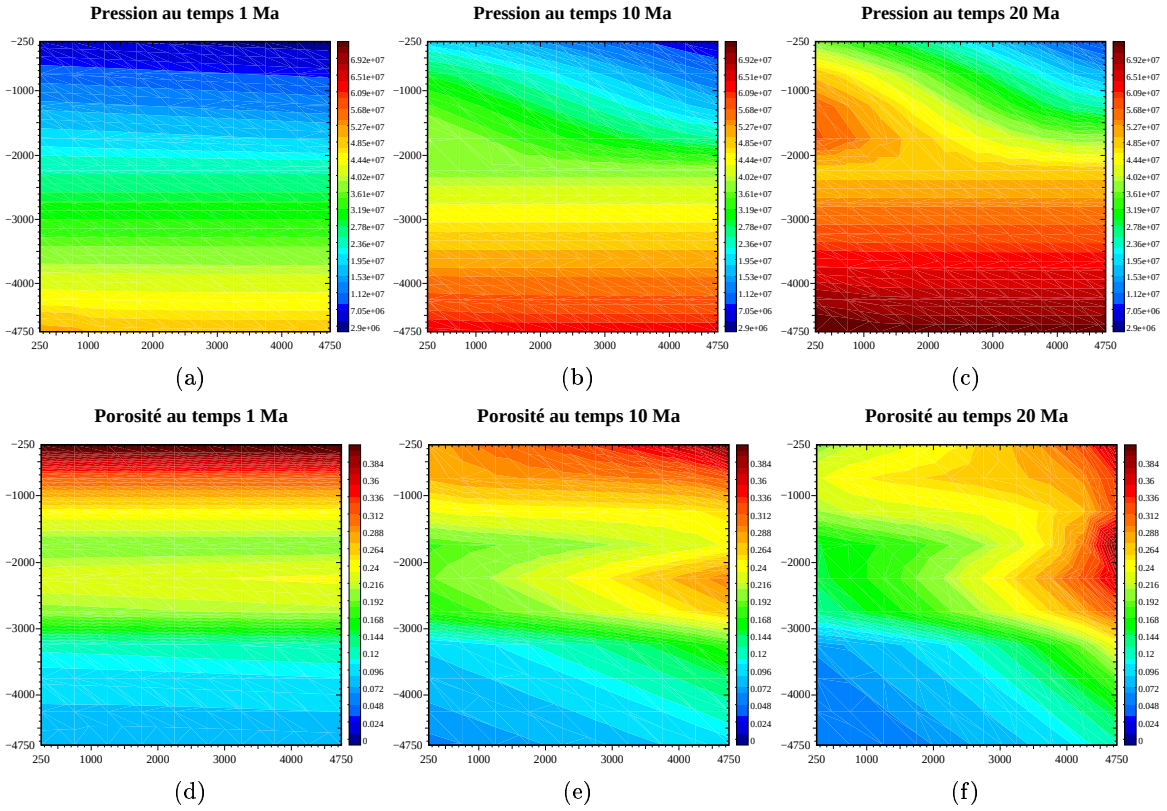


Figure 5.1: Pression et porosité pour un domaine à trois couches dans un cas triphasique incompressible sur un maillage 10×10 pour le modèle en masses-saturations.

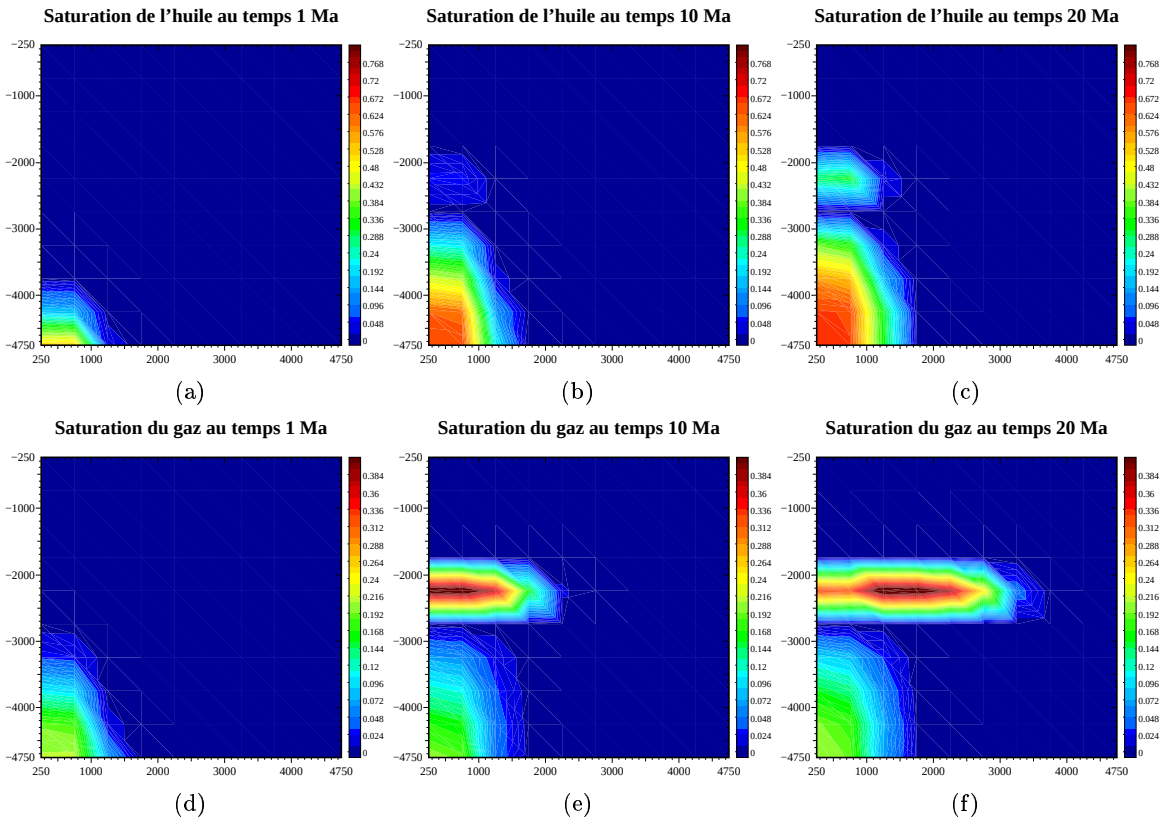


Figure 5.2: Saturations de phases huile et gaz pour un domaine à trois couches dans un cas triphasique incompressible sur un maillage 10×10 pour le modèle en masses-saturations.

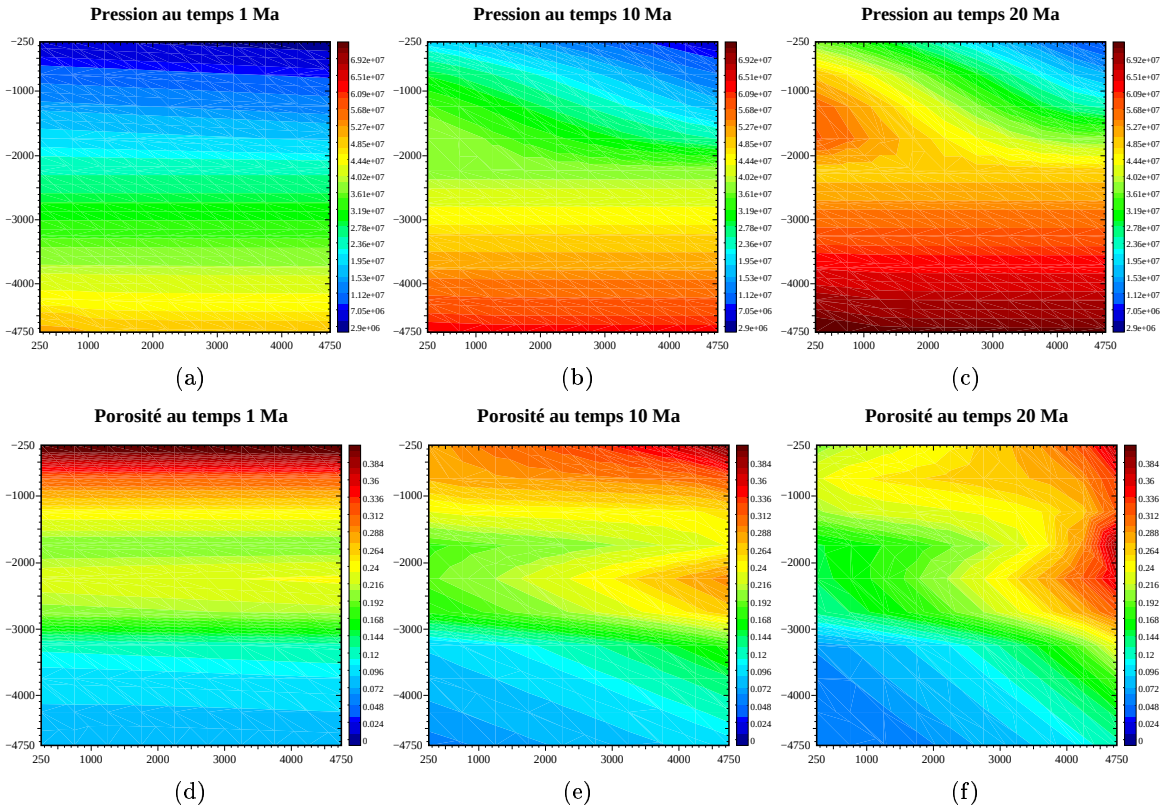


Figure 5.3: Pression et porosité pour un domaine à trois couches dans un cas triphasique compressible sur un maillage 10×10 pour le modèle en masses-saturations.

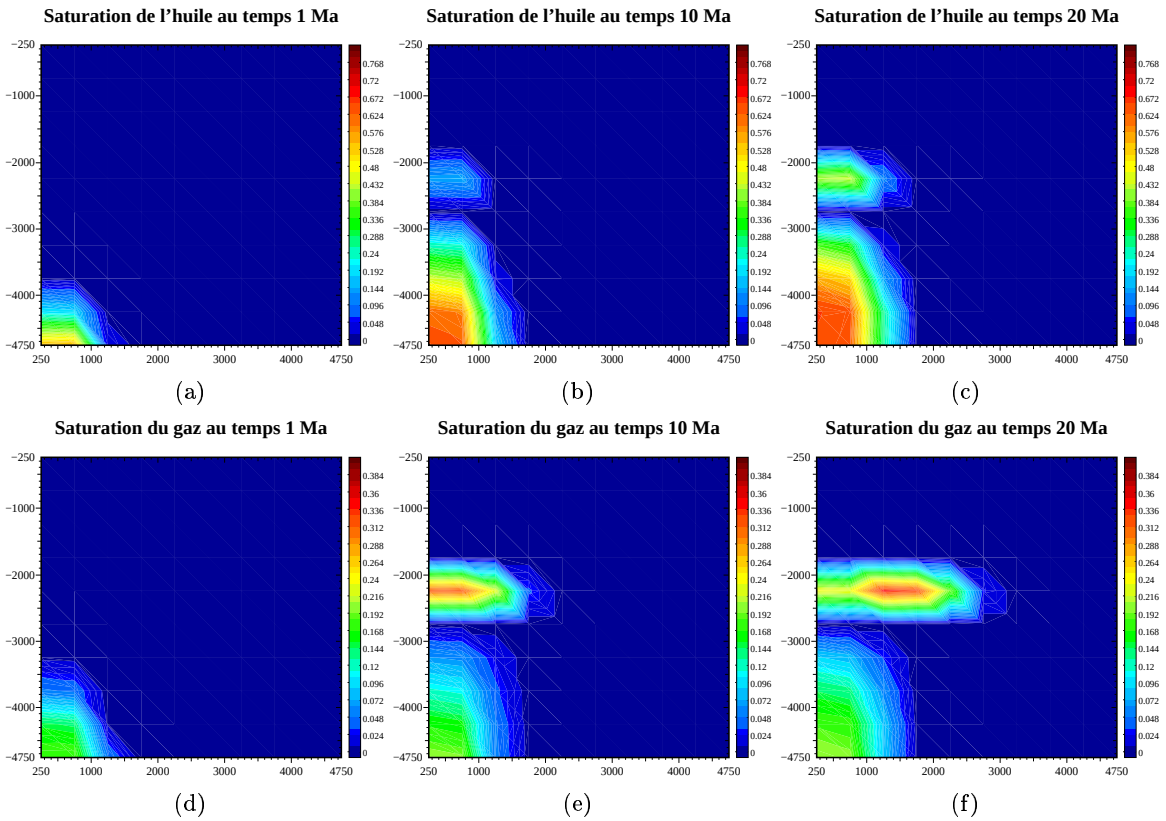


Figure 5.4: Saturations de phases huile et gaz pour un domaine à trois couches dans un cas triphasique compressible sur un maillage 10×10 pour le modèle en masses-saturations.

On présente aux graphiques 5.1 et 5.2 les pressions, porosités et les saturations de la phase huile et de la phase gaz pour le cas où les densités de constituant sont incompressibles. Les graphiques 5.3 et 5.4 présentent les mêmes grandeurs mais dans le cas d'une simulation où les densités de constituant sont compressibles.
On constate, pour les deux simulations, un bon comportement de la migration des fluides puisqu'ils migrent verticalement dans la zone argileuse depuis le fond du bassin vers le drain. Une fois arrivés au niveau du sable, les hydrocarbures s'accumulent et migrent latéralement du fait de la forte anisotropie introduite dans le drain et de la couverture imperméable imposée (argile au dessus du drain). Les pressions étant plus importantes sur le côté gauche du bassin (compaction plus importante à ce niveau) que sur le côté droit, les fluides ont tendance à aller vers les faibles pressions. Les faibles pressions influencent plus l'écoulement dans le cas incompressible que dans le cas compressible puisque l'on peut constater une migration plus rapide vers le toit du bassin dans le cas incompressible. Ceci provient du fait que les densités sont plus importantes dans le cas compressible (ce qui s'explique sachant que plus la pression est forte, plus le fluide est dense) que dans le cas incompressible.

5.2.3 Limites du modèle

Lors des tests de validation du code, un test particulier a permis de mettre en exergue les limites du modèle. En effet, lorsque l'on simule un cas diphasique (eau-huile par exemple), la densité de la phase eau étant constante (ce qui est en général le cas dans la réalité), sans compaction (ce qui signifie que la porosité est constante au cours du temps) et en négligeant la gravité, lors de l'arrêt de la génération des hydrocarbures (le terme source devient nul et seul le phénomène de migration des hydrocarbures dans le bassin intervient), on constate que la pression à l'intérieur du domaine devient constante au pas de temps suivant l'arrêt du craquage (et prend donc la valeur de la pression au toit du bassin), ce qui inhibe immédiatement la migration des hydrocarbures au travers du domaine. Cette limitation provient du terme suivant:

$$\frac{\rho_w^{n-1}}{\rho_w^n}\Phi^n S_w^n - (\Phi^n + (\frac{\partial \Phi}{\partial P})^n P^n) + \sum_{j=1}^{N_{hc}} \gamma_j^{n+\frac{1}{2}} m_j^{n+\frac{1}{2}}. \tag{5.2}$$

En effet, lorsque la porosité est constante le terme $(\frac{\partial \Phi}{\partial P})^n P^n$ disparaît et le fait d'arrêter le craquage implique que $m_j^{n+\frac{1}{2}} = m_j^n$ et donc que $\gamma_j^{n+\frac{1}{2}} = \gamma_j^n$. De plus, puisque la densité de l'eau est constante, on a $\frac{\rho_w^{n-1}}{\rho_w^n}\Phi^n S_w^n = \Phi^n S_w^n$. On obtient alors comme nouvelle expression:

$$\Phi^n S_w^n - \Phi^n + \sum_{j=1}^{N_{hc}} \gamma_j^n m_j^n.$$

Or, d'après l'équation (5.1e) sommée, on a l'égalité $\sum_{j=1}^{N_{hc}} \gamma_j^n m_j^n = \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} \Phi^n S_\alpha^n$. On en déduit la valeur suivante pour l'expression (5.2):

$$\Phi^n S_w^n + \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} \Phi^n S_\alpha^n - \Phi^n = \Phi^n - \Phi^n = 0.$$

Le second membre, dans ce cas est nul. De plus, comme on résout un système linéaire de la forme:

$$A\vec{\nabla} P = 0,$$

il vient que $\vec{\nabla} P = 0$ d'où $P = constante$. Cette constante vaut la valeur de la pression au toit (on rappelle que l'on a imposé sur le toit du bassin une condition de Dirichlet non homogène).
On passe maintenant au modèle en masse de mélange.

5.3 Le modèle en masse de mélange

Comme dans le cas du modèle en masses-saturations, on distingue le cas du constituant eau et celui des constituants hydrocarbures. On n'indique pas l'indice de maille pour les quantités de la maille V de discrétisation et l'on note V_δ une maille voisine. Le système entièrement discrétisé s'écrit alors:

$$m_j^{n+\frac{1}{2}} = m_j^n + \Delta t\, x_0 \sum_{l=1}^{L} a_{lj}^{n+\frac{1}{2}} x_l^{n+\frac{1}{2}} + \Delta t \sum_{i=1}^{N_{hc}} b_{ij}^{n+\frac{1}{2}} m_i^{n+\frac{1}{2}} \quad j = 1, \ldots, N_{hc}, \tag{5.3a}$$

$$m_w^{n+1} = m_w^n + \frac{\Delta t}{mesV} \sum_{\delta \in \partial V} mes\delta K_\delta^n (T_w^w)_{\delta,amt}^n \left(\frac{P_{V_\delta}^{n+1} - P^{n+1}}{d(V, V_\delta)} - g(\rho_w)_\delta^n \frac{z_{V_\delta} - z}{d(V, V_\delta)} \right), \tag{5.3b}$$

$$\begin{aligned} m_j^{n+1} =& m_j^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{mesV} \sum_{\delta \in \partial V} K_\delta^n mes\delta \\ & \left\{ \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} (T_j^\alpha)_{\delta,amt}^{n,n+\frac{1}{2}} \left(\frac{P_{V_\delta}^{n+1} - P^{n+1}}{d(V, V_\delta)} - g(\rho_\alpha)_\delta^{n+\frac{1}{2}} \frac{z_{V_\delta} - z}{d(V, V_\delta)} \right) \right\}, \quad j = 1, ..., N_{hc}, \end{aligned} \tag{5.3c}$$

$$\rho^{n+1} \Phi^{n+1} = \sum_{j=1}^{N} m_j^{n+1}. \tag{5.3d}$$

Comme dans le cas précédent, on cherche à obtenir une équation en pression. Pour cela, on reporte les équations (5.3b) et (5.3c) dans l'équation (5.3d) pour obtenir l'équation désirée suivante:

$$\begin{aligned} & \sum_{\delta \in \partial V} K_\delta^n mes\delta \left\{ \left(\sum_{j=1}^{N_{hc}} \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} (T_j^\alpha)_{\delta,amt}^{n,n+\frac{1}{2}} + (T_w^w)_{\delta,amt}^n \right) \frac{P_{V_\delta}^{n+1} - P^{n+1}}{d(V, V_\delta)} \right\} \\ & - \frac{mesV}{\Delta t} \rho^{n+1} \Phi^{n+1} + \frac{mesV}{\Delta t} \left(\sum_{j=1}^{N_{hc}} m_j^{n+\frac{1}{2}} + m_w^n \right) \\ & + \sum_{\delta \in \partial V} mes\delta\, K_\delta^n\, g\, \frac{z_{V_\delta} - z}{d(V, V_\delta)} \left(\sum_{j=1}^{N_{hc}} \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} (T_j^\alpha)_{\delta,amt}^{n,n+\frac{1}{2}} (\rho_\alpha)_\delta^{n+\frac{1}{2}} + (T_w^w)_{\delta,amt}^n (\rho_w)_\delta^n \right) = 0. \end{aligned}$$

Cette équation en pression est non linéaire par les termes ρ^{n+1}, Φ^{n+1}. Pour la résoudre, on utilise une méthode de Newton.
La discrétisation de la loi de densité de mélange est la suivante:

$$\rho^{n+1} = \sum_{j=w,1}^{n_\alpha} \rho_\alpha^{n+1} S_\alpha^n. \tag{5.4}$$

Le calcul des saturations intervenant dans la formule ci-dessus (et dans les perméabilités relatives) se fait avec la discrétisation temporelle suivante:

$$\begin{cases} S_\alpha^n = \dfrac{1}{\Phi^n \rho_\alpha^{n-\frac{1}{2}}} \displaystyle\sum_{j=1}^{N} (\beta_j^\alpha)^{n-\frac{1}{2}} m_j^n \quad \alpha = 1, \ldots, n_\alpha, \\ S_w^n = 1 - \displaystyle\sum_{j=1}^{N} S_\alpha^n. \end{cases} \tag{5.5}$$

où $n - \frac{1}{2}$ indique que la grandeur thermodynamique est prise au début du pas de temps précédent. On présente, au paragraphe suivant, les résultats numériques.

5.3.1 Résultats numériques

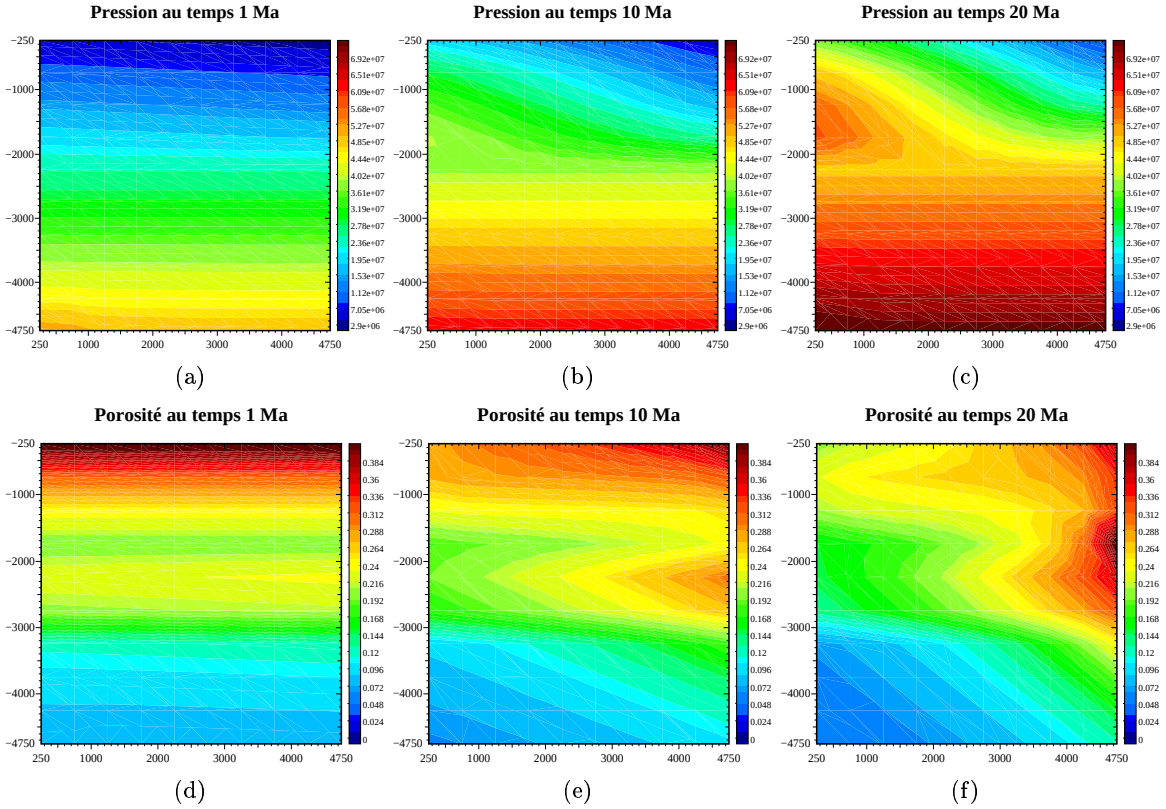


Figure 5.5: Pression et porosité pour un domaine à trois couches dans un cas triphasique incompressible sur un maillage 10×10 pour le modèle en masse de mélange.

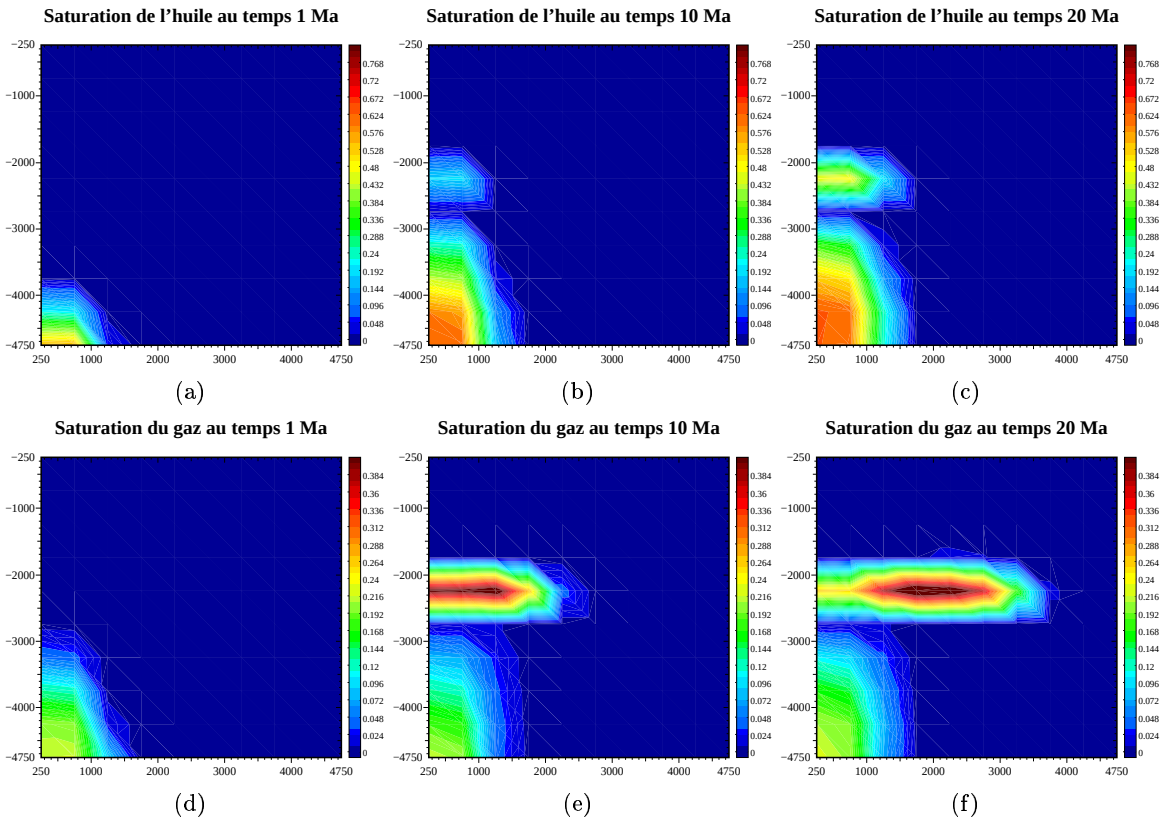


Figure 5.6: Saturations de phases huile et gaz pour un domaine à trois couches dans un cas triphasique incompressible sur un maillage 10×10 pour le modèle en masse de mélange.

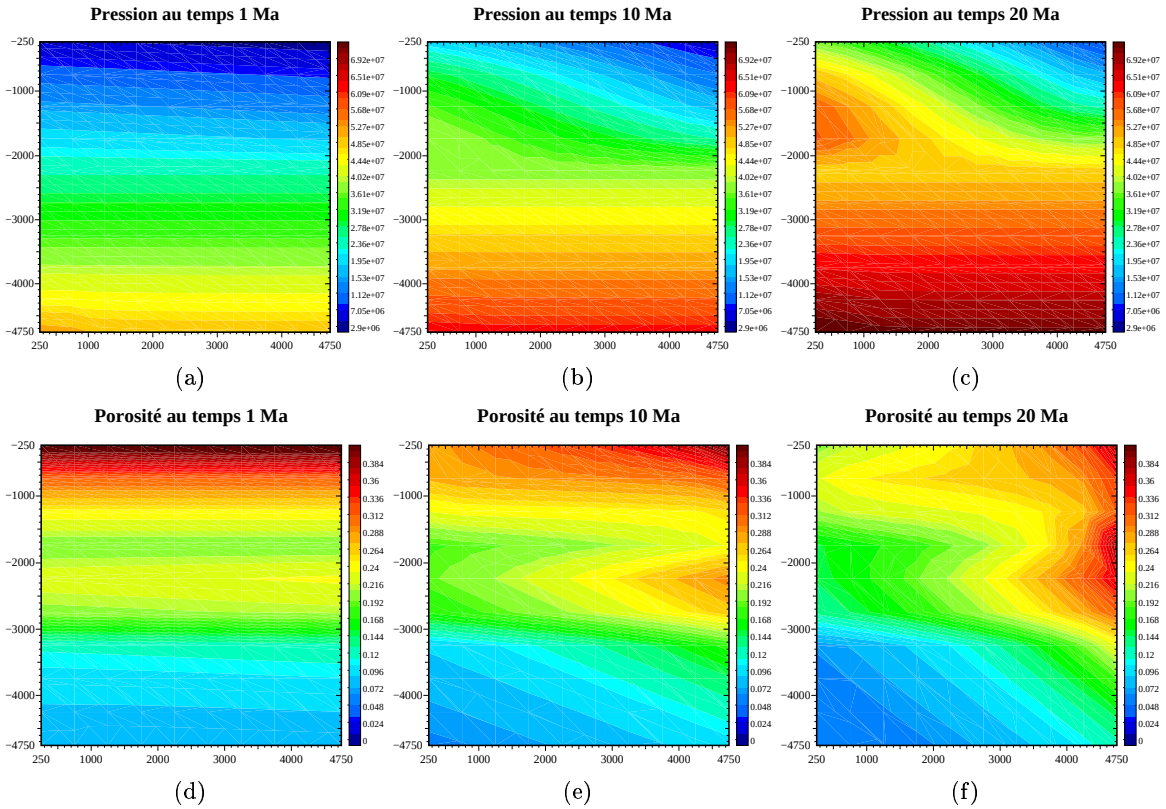


Figure 5.7: Pression et porosité pour un domaine à trois couches dans un cas triphasique compressible sur un maillage 10×10 pour le modèle en masse de mélange.

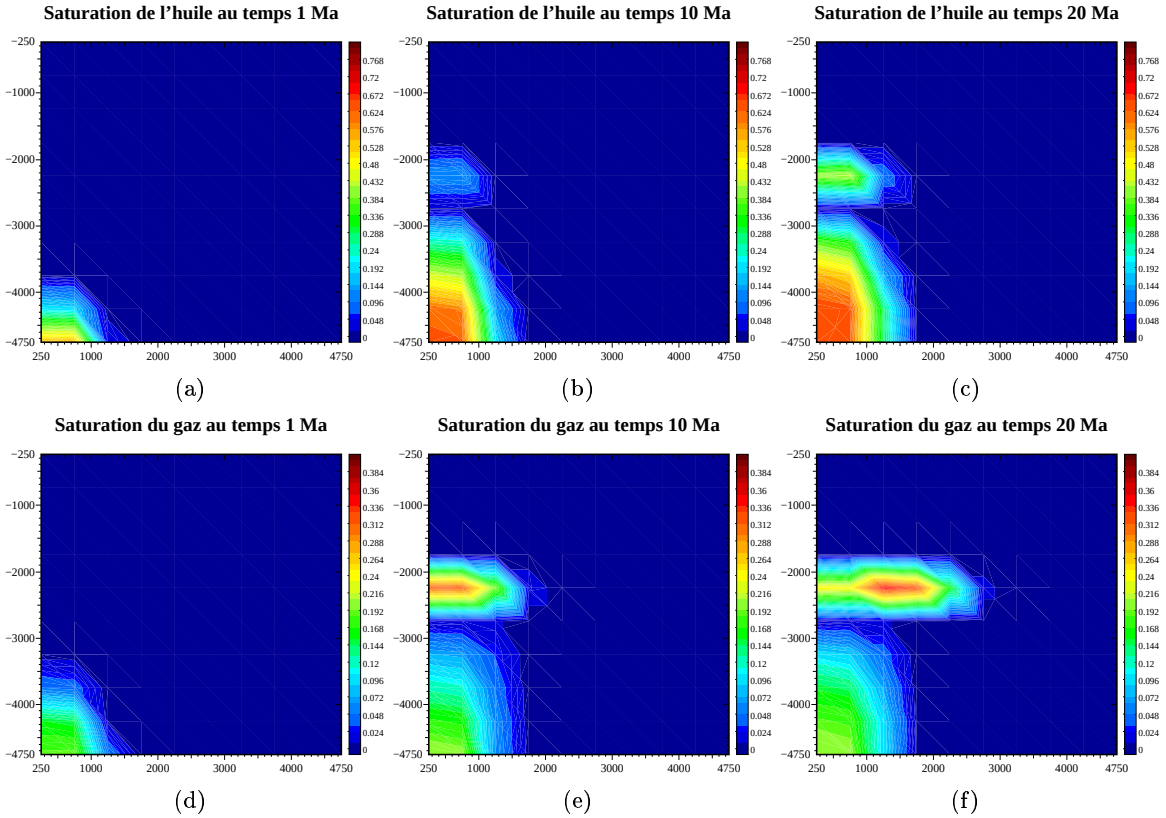


Figure 5.8: Saturations de phases huile et gaz pour un domaine à trois couches dans un cas triphasique compressible sur un maillage 10×10 pour le modèle en masse de mélange.

On présente aux figures 5.5 et 5.6 les pressions, porosités et les saturations des phases huile et gaz dans le cas incompressible et aux figures 5.7 et 5.8 les mêmes grandeurs, mais dans le cas compressible.
On constate une bonne migration des hydrocarbures dans le bassin avec le remplissage plus rapide du drain par la phase gaz que par la phase huile lors des deux cas de simulation. La progression des hydrocarbures est plus marquée dans le cas de la simulation incompressible que dans le cas de la simulation compressible. Ceci provient du fait que les densités, dans le cas compressible, sont plus importantes que dans le cas incompressible. De plus, la simulation se déroule mieux dans le cas compressible que dans le cas incompressible, au sens où le pas de temps est légèrement plus grand. En effet, puisque les densités sont plus importantes dans le cas compressible que dans le cas incompressible, les vitesses de déplacement des phases sont donc plus petites dans le cas compressible que dans le cas incompressible. Les pas de temps peuvent donc être plus grands dans le cas compressible que dans le cas incompressible. Ce résultat est confirmé lorsque l'on prend, dans le cas incompressible, des densités importantes (du même ordre que dans le cas compressible), on obtient également de grands pas de temps.

5.3.2 Limites du modèle

En reprenant la discrétisation de la densité de mélange présentée en (5.4), et en remplaçant les saturations S_α^n par leur valeur donnée par la discrétisation (5.5), on obtient la discrétisation suivante de la densité de mélange:

$$\rho^{n+1} = \sum_{j=w,1}^{N} \sum_{\alpha=w,1}^{n_\alpha} \frac{\rho_\alpha^{n+1} (\beta_j^\alpha)^{n-\frac{1}{2}} m_j^n}{\rho_\alpha^{n-\frac{1}{2}} \Phi^n} \tag{5.6}$$

Une telle discrétisation de la densité de mélange génère des instabilités. En effet, si l'on considère le cas diphasique (une phase hydrocarbure et la phase eau par exemple) incompressible, un seul constituant par phase et le cas thermodynamique immiscible, on montre numériquement que le schéma est instable. C'est le cas lorsque l'on considère une densité de phase (par exemple celle de la phase hydrocarbure) de l'ordre de $200\,kg.m^{-3}$ (la densité de la phase eau vaut, quant à elle, $1000\,kg.m^{-3}$). Cette valeur de densité n'est pas physiquement irréaliste, puisqu'elle modélise un gaz de gisement très volatil.
Au vu de ces résultats, on peut vouloir impliciter les saturations *i.e.* impliciter la densité par $\rho^{n+1} = \sum_{\alpha=w,1}^{n_\alpha} \rho_\alpha^{n+1} S_\alpha^{n+\frac{1}{2}}$, avec pour $S_\alpha^{n+\frac{1}{2}}$ la discrétisation suivante:

$$\begin{cases} S_\alpha^{n+\frac{1}{2}} = \dfrac{1}{\Phi \rho_\alpha^{n+\frac{1}{2}}} \displaystyle\sum_{j=1}^{N} (\beta_j^\alpha)^{n+\frac{1}{2}} m_j^{n+\frac{1}{2}} \quad \alpha = 1, \ldots, n_\alpha, \\ S_w^{n+\frac{1}{2}} = 1 - \displaystyle\sum_{j=1}^{N} S_\alpha^{n+\frac{1}{2}} \end{cases} \tag{5.7}$$

où $\Phi = \Phi(P^n, \sigma_T^{n+1})$, valeur de Φ au début du pas de temps.

La discrétisation des saturations (5.7) est plus implicite que celle présentée en (5.5). En effet, la discrétisation (5.7) s'effectue au début du nouveau pas de temps alors que la discrétisation (5.5) est celle faite en fin de pas de temps avec des quantités (densités et cœfficients de répartition) calculées au début du pas de temps précédent. La discrétisation (5.5) a donc du "retard" pour le calcul des grandeurs. Malgré l'implicitation plus importante des saturations par la formule (5.7) (et donc de la densité ρ), la simulation présentée précédemment échoue également. La seule solution qui reste est d'impliciter totalement les saturations par le schéma suivant:

$$\begin{cases} S_\alpha^{n+1} = \dfrac{1}{\Phi^{n+1}\rho_\alpha^{n+1}} \displaystyle\sum_{j=1}^{N} (\beta_j^\alpha)^{n+1} m_j^{n+1} \quad \alpha = 1, \ldots, n_\alpha, \\ S_w^{n+1} = 1 - \displaystyle\sum_{j=1}^{N} S_\alpha^{n+1} \end{cases}$$

Cette solution n'a pas été envisagée puisque le but est justement d'éviter de tels algorithmes implicites trop coûteux en temps de calcul.

Remarque 13. *Dans ce paragraphe, on montre simplement que la loi retenue pour la densité de mélange n'est pas appropriée puisqu'elle génère des instabilités lorsqu'elle est trop explicitée ou devient trop coûteuse en temps calcul lorsqu'on l'implicite. On n'a pas pu tester le cas de la densité de mélange dans le cas d'un module thermodynamique non analytique, mais il pourrait être intéressant de reprendre l'étude de ce modèle avec cette hypothèse.*

5.4 Le modèle en masses de composés

5.4.1 Discrétisation spatio-temporelle

On présente dans ce paragraphe la discrétisation spatio-temporelle du dernier modèle d'écoulement. Comme pour les précédents modèles, on note par V la maille de discrétisation et par V_δ une maille voisine. Afin de ne pas alourdir les notations, on n'indique pas sur le schéma les indices des quantités qui dépendent de la maille V. Le système entièrement discrétisé s'écrit alors:

$$m_j^{n+\frac{1}{2}} = m_j^n + \Delta t\, x_0 \sum_{l=1}^{L} a_{lj}^{n+\frac{1}{2}} x_l^{n+\frac{1}{2}} + \Delta t \sum_{i=1}^{N_{hc}} b_{ij}^{n+\frac{1}{2}} m_i^{n+\frac{1}{2}} \quad j = 1, \ldots, N_{hc}, \tag{5.8a}$$

$$m_w^{n+1} = m_w^n + \frac{\Delta t}{mesV} \sum_{\delta \in \partial V} K_\delta^n mes\delta (T_w^w)_{\delta,amt}^n \Big(\frac{P_{V_\delta}^{n+1} - P^{n+1}}{d(V, V_\delta)} - g(\rho_w)_\delta^n \frac{z_{V_\delta} - z}{d(V, V_\delta)} \Big), \tag{5.8b}$$

$$\begin{aligned} m_j^{n+1} = m_j^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{mesV} \sum_{\delta \in \partial V} K_\delta^n mes\delta \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} (T_j^\alpha)_{\delta,amt}^{n,n+\frac{1}{2}} \Big(\frac{P_{V_\delta}^{n+1} - P^{n+1}}{d(V, V_\delta} \\ - g(\rho_\alpha)_\delta^{n+\frac{1}{2}} \frac{z_{V_\delta} - z}{d(V, V_\delta)} \Big), \quad j = 1, ..., N_{hc}, \end{aligned} \tag{5.8c}$$

$$\frac{m_w^{n+1}}{\rho_w^{n+1}} + \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} \sum_{j=1}^{N_{hc}} \frac{(\beta_j^\alpha)^{n+\frac{1}{2}}\, m_j^{n+1}}{(\rho_j^\alpha)^{n+1}} = \Phi^{n+1}. \tag{5.8d}$$

L'équation en pression s'obtient en reportant les masses des équations (5.8b) et (5.8c) dans l'équation (5.8d). Elle s'écrit alors de la manière suivante:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{N} \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \frac{(\beta_j^\alpha)^{n+\frac{1}{2}}}{(\rho_j^\alpha)^{n+1}} \Big\{ \frac{mesV}{\Delta t} (m_j)^{n+\frac{1}{2}} + \sum_{\delta \in \partial V} mes\delta\, K_\delta^n \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} (T_j^\alpha)_{\delta,amt}^{n,n+\frac{1}{2}} \Big(\frac{P_{V_\delta}^{n+1} - P^{n+1}}{d(V, V_\delta)} \\ - g(\rho_\alpha)_\delta^{n+\frac{1}{2}} \frac{z_{V_\delta} - z}{d(V, V_\delta)} \Big) \Big\} - \frac{mesV}{\Delta t} \Phi = 0. \end{aligned}$$

en supposant que
$C_w^\alpha = \beta_w^\alpha = 0 \quad \alpha = 1, ..., Nc_p$,
$C_j^w = \beta_j^w = 0 \quad j = 1, ..., N_{hc}$, $(C_w^w)^{n+\frac{1}{2}} = (C_w^w)^n = (\beta_w^w)^{n+\frac{1}{2}} = (\beta_w^w)^n = 1$ et
$(T_w^w)^{n+\frac{1}{2}} = (T_w^w)^n$.

L'équation en pression que l'on vient d'obtenir est non linéaire. Pour la résoudre, comme pour l'équation en pression issue du modèle discret en masse de mélange, on utilise une méthode de Newton.

5.4.2 Résultats numériques

Dans ce paragraphe, on présente des simulations dans le cas de densités compressibles et incompressibles mais pour des lois différentes. En effet, le modèle en masses de composés introduit une densité de constituant par phase alors que dans les modèles précédents, la densité de constituant était indépendante de la phase. On présente donc le cas où la densité $\rho_j^\alpha = \rho_j \quad j = 1, \ldots, N_{hc}$ $\alpha = 1, \ldots, Nc_p$ (cas d'indépendance de la densité de constituant par rapport à la phase, hypothèse identique à celle des modèles simulés précédemment), puis le cas où l'on se donne une loi de densité de constituant par phase *i.e.* $\rho_j^\alpha \neq \rho_j \quad j = 1, \ldots, N_{hc}$ $\alpha = 1, \ldots, Nc_p$. Ces deux cas sont simulés avec, dans un premier temps une loi incompressible, puis dans un deuxième temps avec une loi compressible.

Remarque 14. *Lorsque l'on se place dans le cas* $\rho_j^\alpha = \rho_j \quad j = 1, \ldots, N_{hc}$ $\alpha = 1, \ldots, Nc_p$, *l'équation* (5.8d) *est modifiée et devient:*

$$\frac{m_w^{n+1}}{\rho_w^{n+1}} + \sum_{j=1}^{N_{hc}} \frac{m_j^{n+1}}{\rho_j^{n+1}} = \Phi^{n+1}.$$

puisque, par définition des cœfficients de répartition, on a $\sum_{\alpha=1}^{Nc_p} \beta_j^\alpha = 1$.

cas où $\rho_j^\alpha = \rho_j$

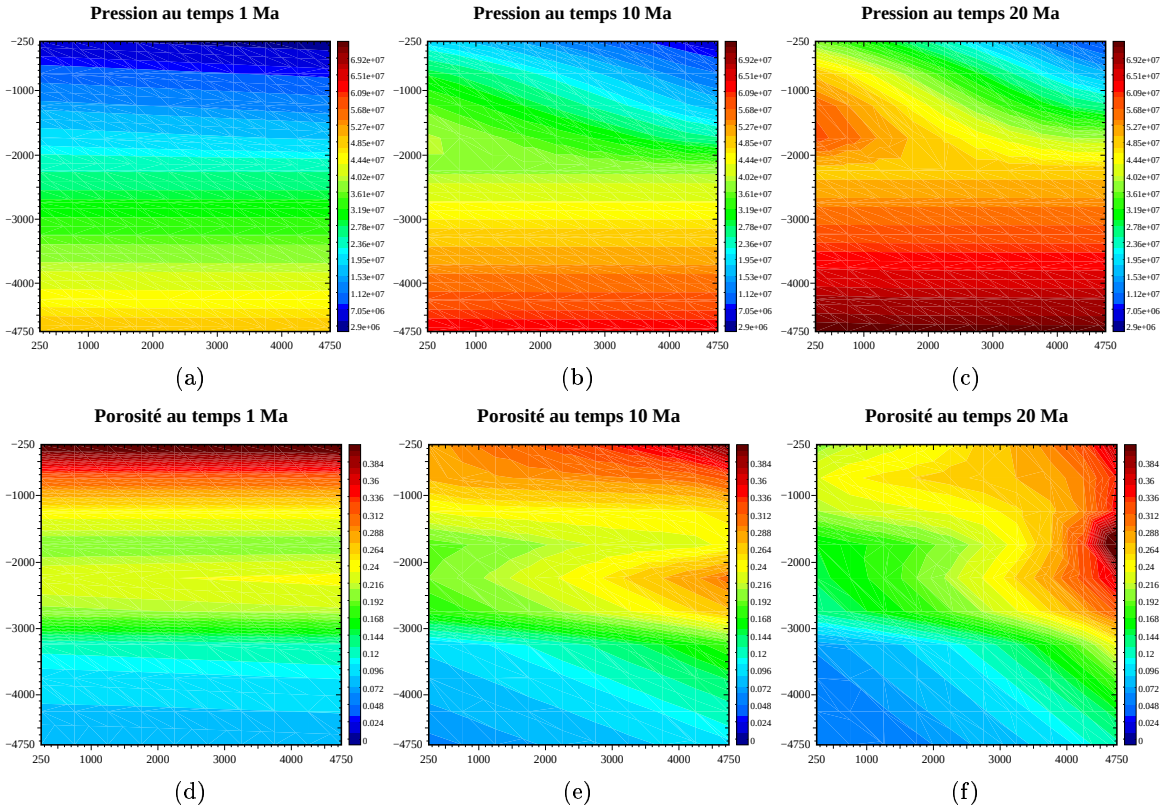


Figure 5.9: Pression et porosité pour un domaine à trois couches dans un cas triphasique incompressible pour les densités $\rho_j^\alpha = \rho_j$ sur un maillage 10×10 pour le modèle en masses de composés.

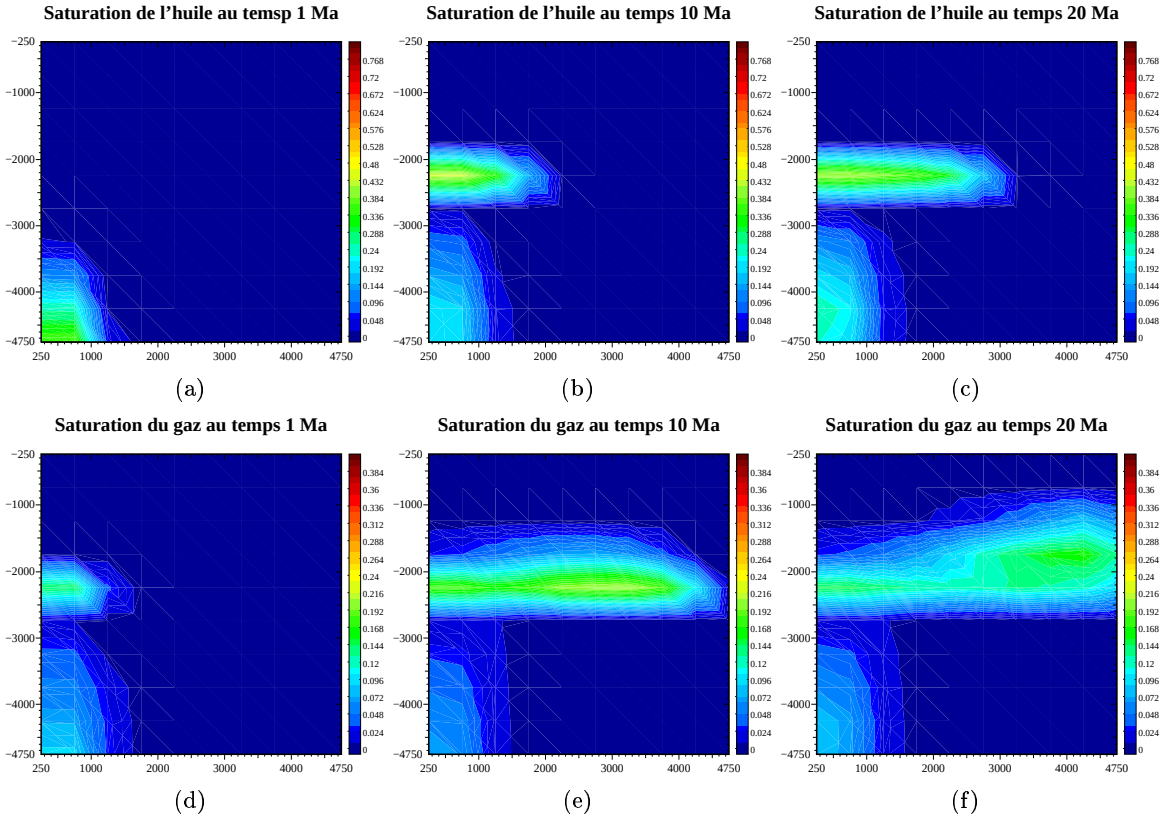


Figure 5.10: Saturations de phases huile et gaz pour un domaine à trois couches dans un cas triphasique incompressible pour les densités $\rho_j^\alpha = \rho_j$ sur un maillage 10×10 pour le modèle en masses de composés.

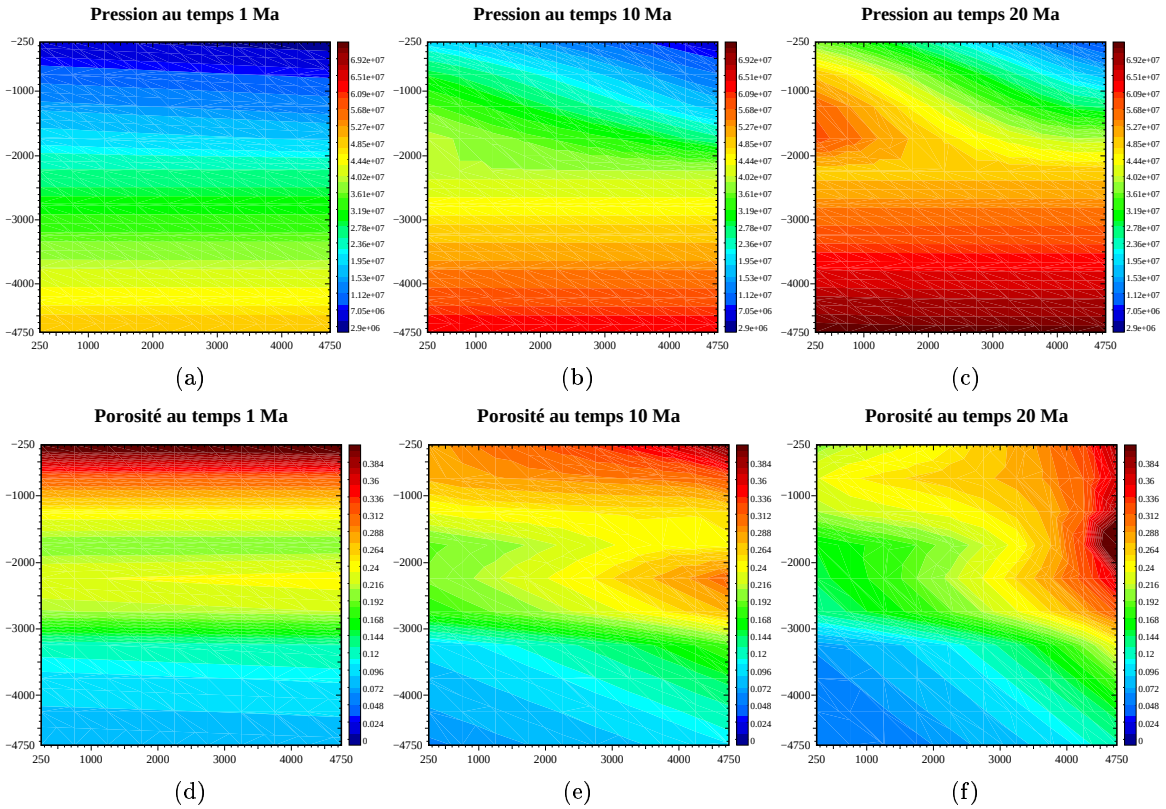


Figure 5.11: Pression et porosité pour un domaine à trois couches dans un cas triphasique compressible pour les densités $\rho_j^\alpha = \rho_j$ sur un maillage 10×10 pour le modèle en masses de composés.

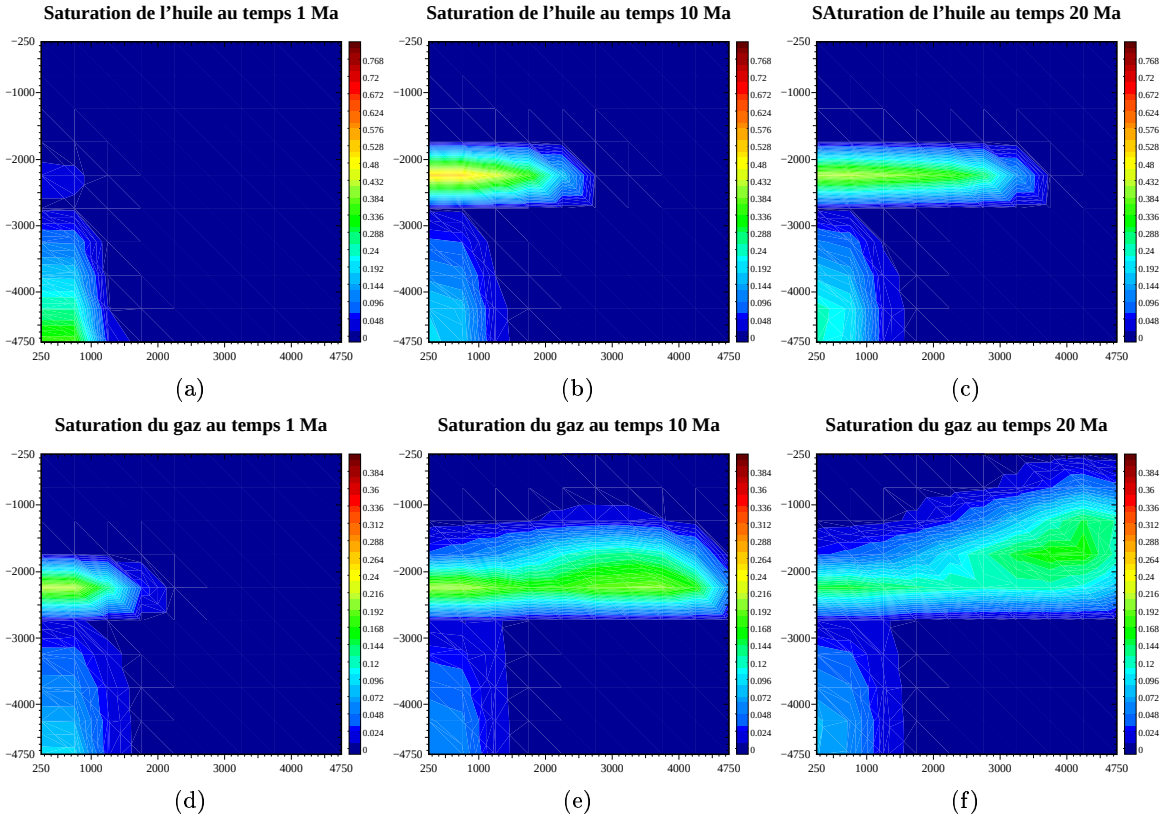


Figure 5.12: Saturations de phases huile et gaz pour un domaine à trois couches dans un cas triphasique compressible pour les densités $\rho_j^\alpha = \rho_j$ sur un maillage 10×10 pour le modèle en masses de composés.

On présente aux figures 5.9 et 5.10 les pressions, porosités et saturations de la phase huile et de la phase gaz dans le cas incompressible, puis aux figures 5.11 et 5.12 les mêmes grandeurs mais pour le cas compressible. On constate, comme dans les simulations précédentes, le bon comportement du simulateur puisque l'on a une migration verticale du fond du bassin jusqu'au drain liée à la forte différence de pression, puis une migration latérale du fait de la couverture très imperméable au dessus du drain, de la forte anisotropie et de la grande porosité présentes dans le drain. Enfin, on constate le remplissage du drain avec une plus grande accumulation sur le côté droit du bassin et une légère migration vers le toit commence à apparaître. On simule donc, par cette accumulation au bord du bassin, le phénomène de piégeage dans la roche magasin.

cas où $\rho_j^\alpha \neq \rho_j$

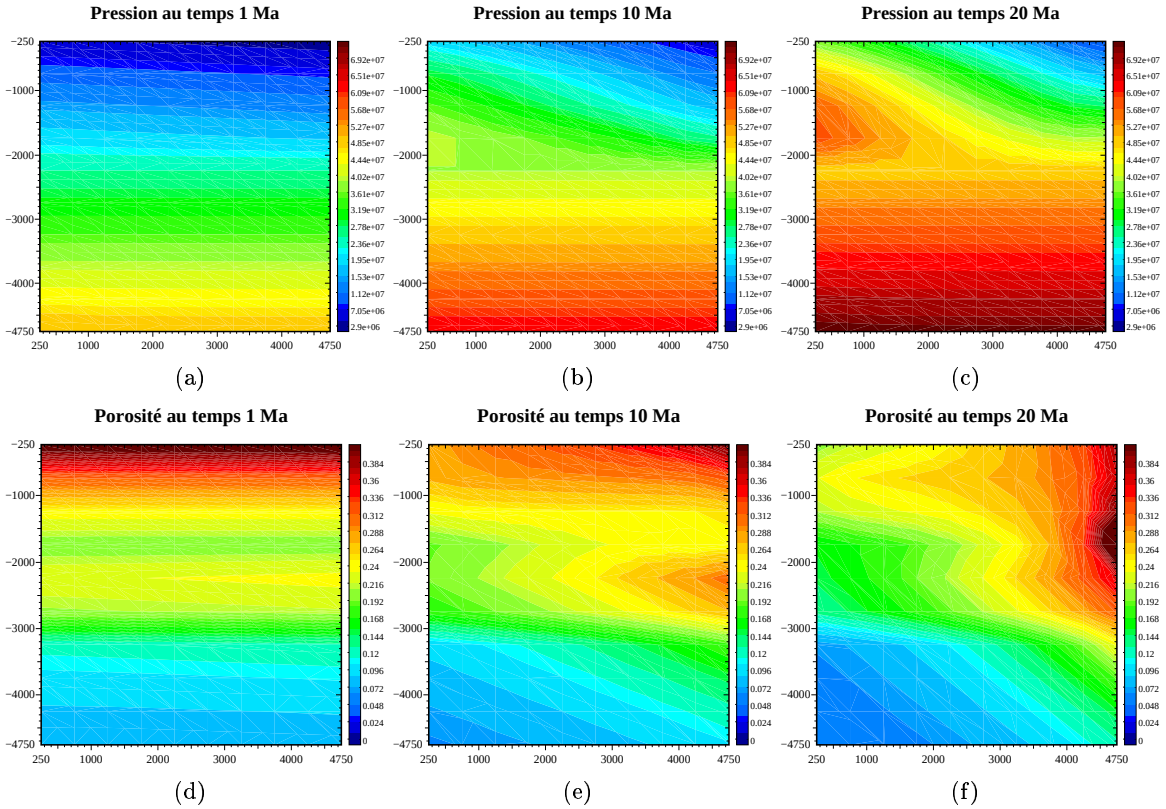


Figure 5.13: Pression et porosité pour un domaine à trois couches dans un cas triphasique incompressible pour les densités $\rho_j^\alpha \neq \rho_j$ sur un maillage 10×10 pour le modèle en masses de composés.

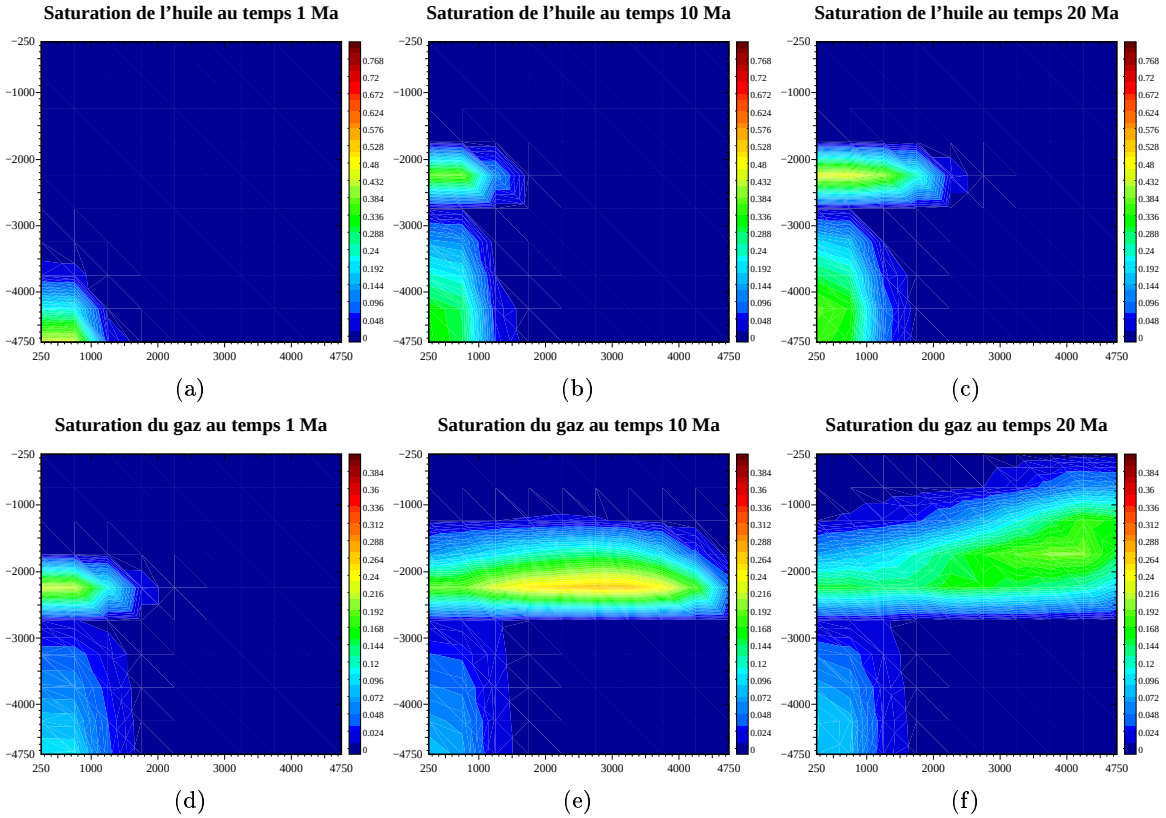


Figure 5.14: Saturations de phases huile et gaz pour un domaine à trois couches dans un cas triphasique incompressible pour les densités $\rho_j^\alpha \neq \rho_j$ sur un maillage 10×10 pour le modèle en masses de composés.

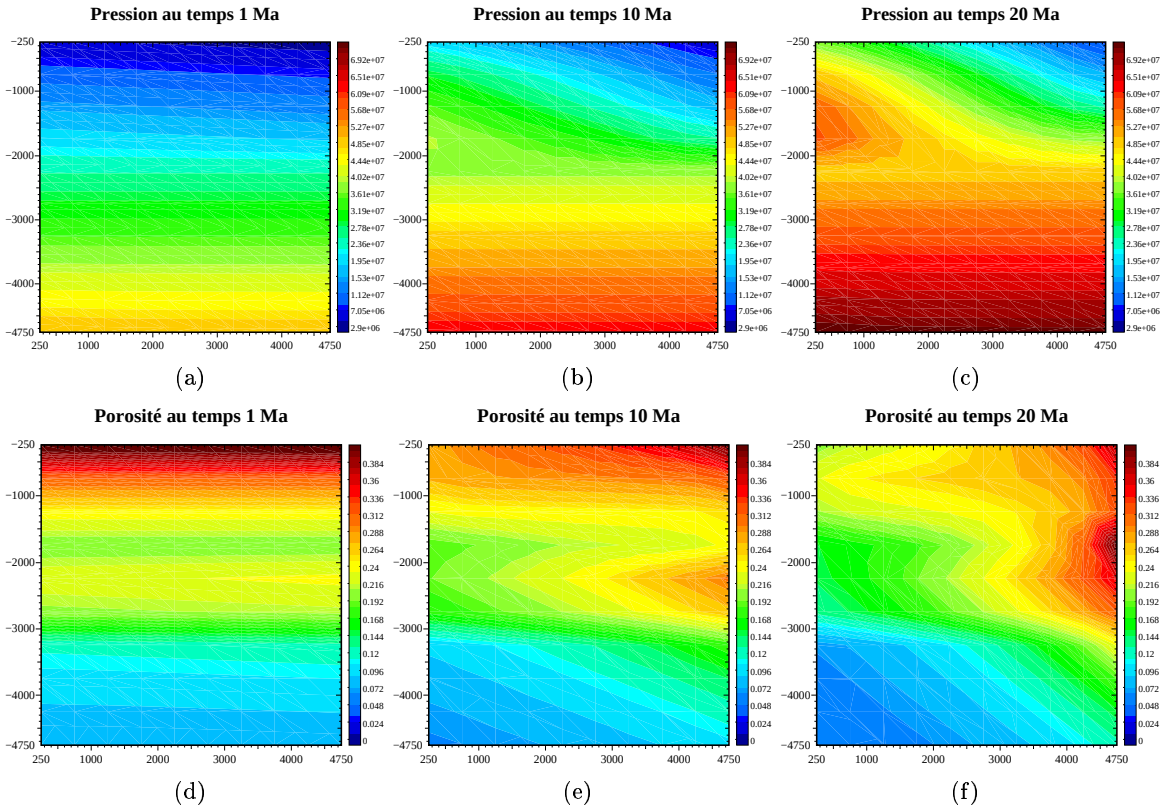


Figure 5.15: Pression et porosité pour un domaine à trois couches dans un cas triphasique compressible pour les densités $\rho_j^\alpha \neq \rho_j$ sur un maillage 10×10 pour le modèle en masses de composés.

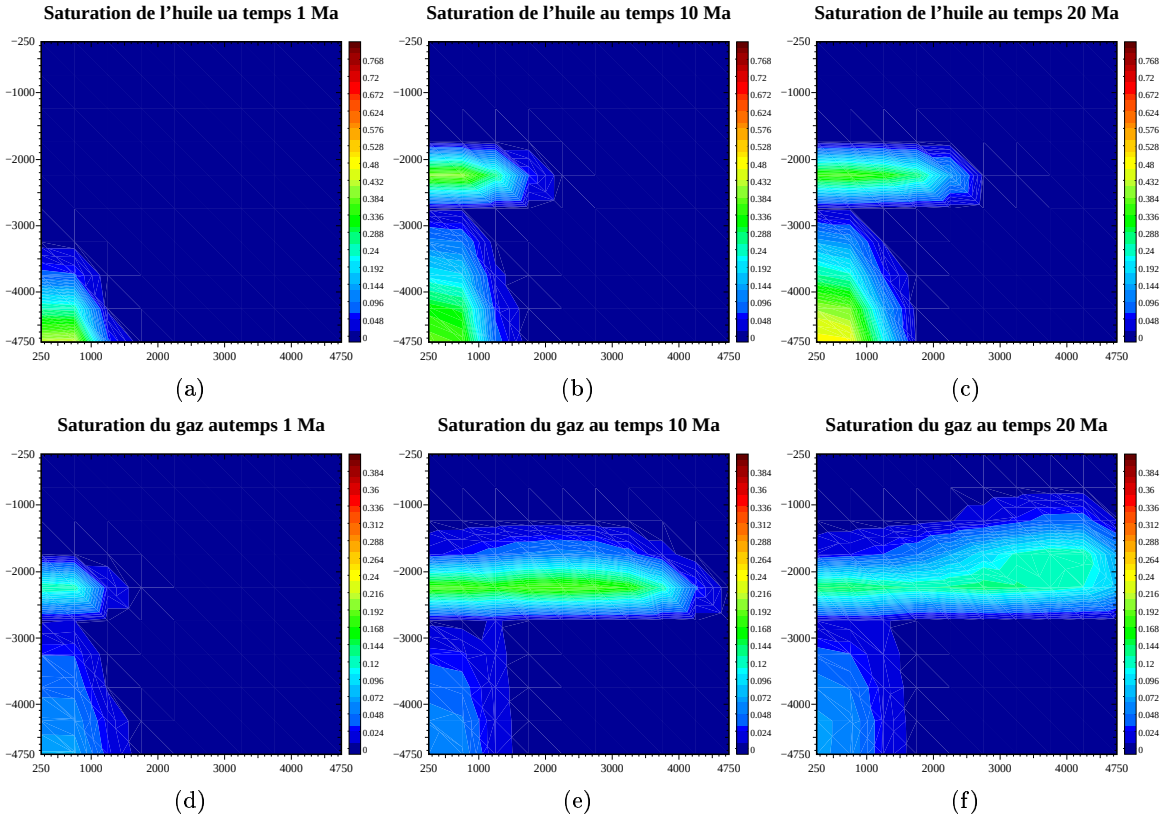


Figure 5.16: Saturations de phases huile et gaz pour un domaine à trois couches dans un cas triphasique compressible pour les densités $\rho_j^\alpha \neq \rho_j$ sur un maillage 10×10 pour le modèle en masse de mélange.

On présente aux figures 5.13 et 5.14 les pressions, porosités et saturations de la phase huile et de la phase gaz dans le cas incompressible, puis aux figures 5.15 et 5.16 les mêmes grandeurs mais pour le cas compressible. On peut constater qu'il n'y a pas une grande différence entre les résultats obtenus avec le cas où $\rho_j^\alpha = \rho_j$ et le cas présenté ici. En revanche, du point de vu du temps de simulation, le cas $\rho_j^\alpha \neq \rho_j$ est plus "difficile" à simuler puisque le pas de temps est légèrement plus petit (on a pris, pour le premier cas un pas de temps de 0.004 Ma alors qu'il a fallu un pas de temps de 0.002 Ma pour le second cas) ce qui signifie que la condition de *C.F.L.* est plus importante. Cette disparité entre les deux modèles tient au fait que l'on ne simule pas exactement les mêmes conditions physiques : du fait de retenir des densités de constituant différentes par phase, celles-ci sont plus petites dans le cas où $\rho_j^\alpha \neq \rho_j$ que dans l'autre cas (on peut réussir à simuler des cas équivalents avec une densité $\rho_j^\alpha = \rho_j$ en prenant une grande disparité entre la densité du constituant lourd et la densité du constituant léger). Toutefois, le cas de la densité de constituant dépendante de la phase dans laquelle il se trouve est plus caractéristique d'un phénomène physique. En effet, on peut prendre l'exemple de la densité de l'eau liquide et de la densité du glaçon ou de la vapeur d'eau. La densité de l'eau est plus grande que la densité du glaçon ou que celle de la vapeur d'eau. La densité du constituant eau est différente selon la phase dans laquelle il se trouve et la densité physique pour simuler ce cas est bien celui de $\rho_j^\alpha \neq \rho_j$.

5.4.3 Limites du modèle

Pour connaître le comportement du modèle et afin de pouvoir le comparer aux deux autres, on a repris les cas limites des deux modèles précédents. On constate que lorsque l'on se place dans le cas limite du modèle en masses-saturations à savoir un écoulement diphasique eau-huile avec une densité d'eau incompressible, sans compaction, sans gravité et après arrêt du craquage, il y a une migration très lente des hydrocarbures avec une diminution progressive de la pression dans le bassin. On peut donc, avec ce dernier modèle, simuler la migration des fluides seulement induite par la différence de pression. De plus, on a simulé des densités de constituant inférieures à 200 (on est descendu jusqu'à des densités de fluides de 50 avec des viscosités de 10^{-6} mais avec une restriction importante du pas de temps: de l'ordre de 10^{-5} Ma *i.e.* des pas de temps de 10 ans) contrairement au modèle en masse de mélange.
Nous n'avons pas réussi, avec les paramètres retenus (et notamment avec le module thermodynamique "Black-oil"), à trouver les limites du modèle en masses de composés. Toutefois, il faut signaler que des cas comme précédemment cités, ne sont pas très acceptables dans des simulations plus complexes (des contraintes supplémentaires liées à l'évolution du bassin viennent se greffer sur le pas de temps déjà très petit).

5.5 Conclusion

Au travers de ce chapitre, on a présenté la discrétisation des divers modèles proposés. On a mis en avant, grâce à la simulation numérique, les limites de chacun des modèles. Il apparaît que le modèle en masses de composés est le plus satisfaisant puisqu'il permet de simuler des cas extrêmes de densité et de viscosité ainsi que la migration des hydrocarbures seulement induite par la différence de pression. De plus, ce dernier modèle, comme on l'a déjà signalé, comporte un nombre d'inconnues plus resteint. Pour ces raisons, le modèle en masses de composés a retenu notre attention pour la suite de l'étude.
Dans le chapitre suivant, on se propose de regarder une approche de découplage des grandeurs thermodynamiques (notamment le cas des cœfficients de répartition $(\beta_j^\alpha)_{j=1,\ldots,N\ \alpha=1,\ldots,n_\alpha}$).

Chapitre 6

Une approche de découplage

6.1 Motivation et principe

Dans ce chapitre, on va développer le commentaire effectué au paragraphe 4.3.4.

Si l'on désire conserver l'équilibre thermodynamique du système en masses de composés, il est nécessaire de résoudre les équations du système en prenant toutes les quantités de façon implicite. Comme le système est non linéaire, on utilise pour cela une méthode de Newton. Une telle méthode nécessite des appels au module thermodynamique pour actualiser les cœfficients de répartition et les fractions massiques au cours de chaque itération. Si ce module thermodynamique est complexe, le temps de calcul devient rédhibitoire. Le but poursuivi est d'éviter l'utilisation de telles méthodes. Pour cela, on décide de prendre de façon explicite les cœfficients de répartition β_j^α quelle que soit la discrétisation temporelle retenue pour les autres grandeurs intervenant dans les équations. Cette approche implique donc que les densités, les masses et la pression ne vérifient pas l'équation de conservation du volume poreux. On a donc une différence entre le volume donné par la porosité du domaine et le volume donné par le calcul des grandeurs thermodynamiques. On essaye de corriger cette "erreur" d'approximation en introduisant une équation supplémentaire que l'on appelle "thermodynamique à masses et volume constants". Cette équation calcule de nouveaux cœfficients de répartition (ainsi que tous les paramètres qui en dépendent), et une nouvelle pression à partir des masses et de la porosité issues de la résolution des équations de transport.

Dans les paragraphes suivants, on va détailler l'équation de thermodynamique à masses et volume constants. On se limitera pour la suite de l'exposé à deux phases hydrocarbures, une phase huile, notée o et une phase gaz, notée g. Le nombre de constituants hydrocarbures est noté Nh_c. Cette limitation du nombre de phases provient du module thermodynamique mis à notre disposition, à savoir un module thermodynamique "Black-oil". On a toutefois généralisé le nombre de constituants.

6.2 Une première approche de l'équation

6.2.1 Description du modèle à résoudre

Dans ce paragraphe, on complète les équations du modèle en masses de composés par l'équation de thermodynamique à masses et volume constants suivante:

$$\begin{cases} \text{Chercher } P \text{ tel que} \\ \dfrac{\sum_{j=1}^{Nh_c} m_j}{\rho_{HC}(P,(m_j)_{j=1,\dots,Nh_c})} = \Phi(1-S_w). \end{cases} \tag{6.1}$$

où $\rho_{HC}(P,(m_j)_{j=1,\dots,Nh_c})$ est calculée par le module thermodynamique.
Le modèle construit sera dénommé par la suite "modèle tenant compte de la thermodynamique à masses et volume constants".
Comme cette équation ne s'écrit que pour les masses d'hydrocarbures, on pondère la porosité afin que celle-ci ne représente que le volume occupé par ces hydrocarbures.
A la convergence de cette équation, on obtiendra une nouvelle pression, les nouveaux cœfficients de répartition β_j^α, les nouvelles fractions massiques C_j^α, les densités et les viscosités de chaque phase. On pourra alors commencer le nouveau pas de temps avec ces nouvelles quantités.
Les étapes de résolution du modèle tenant compte de la thermodynamique à masses et volume constants sont les suivantes:

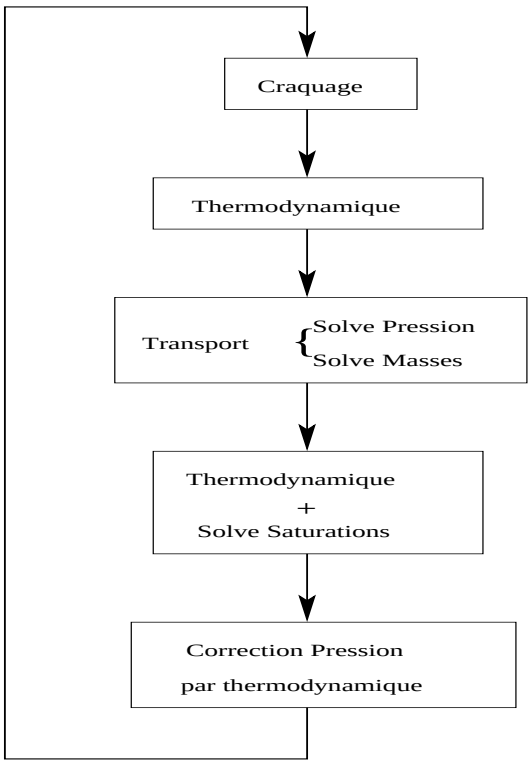


Figure 6.1: Résolution d'un pas de temps du "modèle tenant compte de la thermodynamique à masses et volume constants".

6.2.2 Commentaires et remarques sur le nouveau schéma

On commence par rappeler l'équation de conservation du volume poreux qui intervient dans le modèle en masses de composés. Cette équation, adaptée à deux phases hydrocarbures, se formule de la manière suivante:

$$\frac{m_w}{\rho_w} + \sum_{\alpha=o,g} \sum_{j=1}^{Nh_c} \frac{\beta_j^\alpha m_j}{\rho_j^\alpha} = \Phi. \tag{6.2}$$

Une première différence entre la figure 4.3 et la figure 6.1 provient de la prise en compte du transport. Dans l'algorithme de résolution du modèle en masses de composés, le transport comprenait les étapes de résolution de la pression, des masses et des saturations. Dans le modèle tenant compte de la thermodynamique à masses et volume constants, ce transport ne prend en compte que les étapes de résolution de la pression et des masses. L'étape de résolution des saturations vient après la mise à jour des cœfficients thermodynamiques. Cette étape est nécessaire avant l'appel au module de thermodynamique à masses et volume constants (résolution de l'équation (6.1)). En effet, si cette étape est omise, le phénomène d'apparition de phase dans une maille n'est pas pris en compte et l'équation thermodynamique à masses et volume constants admet deux solutions non acceptables. On détaille ce processus ci-dessous.
Supposons que l'on ait une maille ne contenant que de l'eau, les cœfficients de répartition sont alors nuls ($\beta_j^\alpha = 0 \quad j = 1, \ldots, Nh_c \ \alpha = o, g$). On résout alors l'équation $\frac{m_w}{\rho_w} = \Phi$ dans cette maille (c'est sur la base de cette équation et des équations de conservation de la masse que l'on obtient une équation en pression). Lorsque l'on résout les équations de conservation de la masse avec cette nouvelle pression, des masses hydrocarbures apparaissent dans cette maille. Sans mettre les cœfficients de répartition à jour, on calcule les nouvelles saturations par les relations suivantes:

$$\begin{cases} S_\alpha = \dfrac{1}{\rho_\alpha \Phi} \displaystyle\sum_{j=1}^{Nh_c} \beta_j^\alpha m_j \quad \alpha = o, g \\ S_w = 1 - S_o - S_g. \end{cases} \tag{6.3}$$

Comme les cœfficients de répartition sont nuls dans cette maille, on en déduit que les saturations des phases hydrocarbures sont nulles, d'où $S_w = 1$.
Lorsque l'on appelle le module thermodynamique à masses et volume constants, on résout l'équation suivante:

$$\frac{\sum_{j=1}^{Nh_c} m_j}{\rho_{HC}(P, (m_j)_{j=1,\ldots,Nh_c})} = 0.$$

Les seules solutions de cette équation sont des masses nulles, ou une densité de mélange

hydrocarbure infinie. Les masses étant non nulles et fixées, seule la densité de mélange hydrocarbure infinie est solution; ce qui n'est pas réaliste!
Au travers de cet exemple, on observe donc la nécessité d'introduire cette mise à jour des cœfficients de répartition afin de prendre en compte les apparitions de phases dans les mailles. On va maintenant analyser cette seconde situation.
Les cœfficients de répartition sont donc non nuls si des phases sont présentes dans la maille et nuls si aucune phase (ni masse) hydrocarbure n'est présente. On se place dans le cas où les deux phases hydrocarbures et la phase eau sont présentes (le cas où seulement une phase hydrocarbure et la phase eau sont présentes se traite de la même façon). En résolvant les équations (6.2) on obtient une pression, des masses et une porosité. On va maintenant évaluer les nouveaux cœfficients de répartition (en calculant une nouvelle pression) à l'aide du module thermodynamique à masses et volume constants. Dans ce module, le volume et les masses sont fixés et issus de la résolution de l'équation (6.2). On va donc résoudre le problème suivant:

$$\begin{cases} \text{Chercher } P \text{ tel que} \\ \dfrac{\sum_{j=1}^{Nh_c} m_j}{\rho_{HC}(P,(m_j)_{j=1,\dots,Nh_c})} = \Phi(1-S_w) \qquad (6.1). \end{cases}$$

En remplaçant $\Phi(1-S_w)$ par sa valeur issue de la résolution de l'équation (6.3) et après mise à jour des cœfficients thermodynamiques, on obtient le problème à résoudre suivant:

$$\begin{cases} \text{Chercher } P \text{ tel que} \\ \dfrac{\sum_{j=1}^{N_c} m_j}{\rho_{HC}(P,(m_j)_{j=1,\dots,Nh_c})} = \displaystyle\sum_{j=1}^{Nh_c} m_j\Big(\frac{\tilde{\beta}_j^o}{\tilde{\rho}_o} + \frac{\tilde{\beta}_j^g}{\tilde{\rho}_g}\Big). \end{cases} \tag{6.4}$$

(le tilde représente les valeurs mises à jour après le calcul de la pression P du transport).
Prenons comme pression initiale la pression P issue de la résolution de l'équation de conservation du volume poreux (6.2).
On sait que la loi pour le calcul de ρ_{HC} est la suivante:

$$\frac{m_T}{\rho_{HC}} = \frac{m_o}{\rho_o} + \frac{m_g}{\rho_g}, \tag{6.5}$$

où $m_T = \displaystyle\sum_{j=1}^{Nh_c} m_j$, m_o et m_g sont les masses des phases huile et gaz respectivement.
De plus, par définition, on a la relation suivante:

$$m_\alpha = \sum_{j=1}^{Nh_c} \beta_j^\alpha m_j \quad \alpha = o, g. \tag{6.6}$$

En reportant cette relation dans la relation (6.5), on obtient alors l'expression suivante pour la densité de mélange:

$$\frac{m_T}{\rho_{HC}} = \sum_{j=1}^{Nh_c} m_j \Big(\frac{\beta_j^o}{\rho_o} + \frac{\beta_j^g}{\rho_g} \Big). \tag{6.7}$$

En reportant cette relation dans (6.4), et en posant, par définition, que $m_T = \sum_{j=1}^{Nh_c} m_j$ on obtient finalement que

$$\sum_{j=1}^{Nh_c} m_j \Big(\frac{\beta_j^o}{\rho_o} + \frac{\beta_j^g}{\rho_g} \Big) = \sum_{j=1}^{Nh_c} m_j \Big(\frac{\tilde{\beta}_j^o}{\tilde{\rho}_o} + \frac{\tilde{\beta}_j^g}{\tilde{\rho}_g} \Big). \tag{6.8}$$

Pour résoudre cette équation, on prend comme condition initiale la pression issue de la résolution de l'équation (6.2), les cœfficients de répartition et les autres grandeurs thermodynamiques mis à jour juste avant l'appel au module de thermodynamique à masses et volume constants. On a donc, de manière évidente, la pression issue du transport qui est la solution du problème (6.4) puisque les grandeurs mises à jour avant l'appel du module de thermodynamique à masses et volume constants dépendent de cette pression.

Remarque 15. *La pression issue de la résolution de l'équation* (6.2) *est donc la solution du problème* (6.4) *quelles que soient les hypothèses retenues sur les* ρ_j^α*, les lois utilisées pour le calcul des densités de* ρ_α *ainsi que la manière de calculer les cœfficients de répartition* β_j^α*.*

En conclusion, le module thermodynamique à masses et volume constants ne converge pas si la thermodynamique n'est pas mise à jour avant le calcul des saturations, et la pression issue de la résolution de l'équation (6.2) est la solution dès que le module thermodynamique est mis à jour avant le calcul des saturations.

Remarque 16. *Le problème de non convergence de Newton dans le module de thermodynamique à masses et volume constants peut intervenir même lorsque la thermodynamique est mise à jour avant le calcul des saturations. En effet, les modules thermodynamiques ne "voient" les masses qu'à partir d'une certaine quantité epsilonesque fixée par l'utilisateur. Lorsque les masses se trouvent en dessous de ce seuil, les cœfficients de répartition restent nuls. Or, le module thermodynamique à masses et volume constants tient compte de ces masses. On se retrouve alors dans le cas du problème précédent de la non prise en compte de l'apparition des phases par la thermodynamique. Il faudra donc veiller à ce que les masses utilisées par ce module thermodynamique à masses et volume constants remplissent les mêmes conditions que les masses du module thermodynamique qui sert à calculer les cœfficients de répartition.*

Remarque 17. *Dans ce paragraphe, on n'évoque pas la méthode utilisée pour la résolution des équations de transport. Dans notre cas, on utilise une méthode IMPES pour les résoudre. Toutefois, les remarques précédentes restent valables, même lorsque l'on implicite le transport mais que l'on garde de façon explicite les cœfficients de répartition. En effet, lorsque l'on implicite les flux dans les équations de transport tout en gardant les cœfficients de répartition explicites, on se retrouve dans le même cas que précédemment à savoir le problème d'apparition de phases. Ces apparitions de phases n'étant pas prises en compte lors des itérations de Newton, on n'est pas assuré de la convergence de celui-ci. Si la convergence de Newton a été obtenue, on appelle le module thermodynamique à masses et volume constants afin de mettre les cœfficients de thermodynamique à l'équilibre, après avoir mis à jour la thermodynamique et calculé les nouvelles saturations.*
Pour être assuré de la convergence des itérations de Newton pour les équations de transport, on peut impliciter les cœfficients de répartition. Ceci n'est pas le but recherché. Une autre solution consisterait de mettre à jour les cœfficients de répartition au cours des itérations de Newton, seulement lorsque l'on a une apparition de phase dans une maille. On garderait alors ces cœfficients de répartition de façon explicite pour le reste des itérations de Newton. On devrait alors améliorer la convergence de la méthode de Newton, sans toutefois impliciter totalement les cœfficients de répartition. Une fois la convergence de la méthode de Newton obtenue, on met à jour les cœfficients de répartition comme cela a été exposé au début de ce paragraphe.

Remarque 18. *Sur la figure 6.1, on peut remarquer que l'on appelle le module thermodynamique juste après le craquage. Le craquage génère des masses qui ne sont pas prises en compte par la thermodynamique lorsque celle-ci est calculée en fin de pas de temps. L'appel du module thermodynamique peut se faire uniquement sur les mailles contenant la roche mère. Pour les autres mailles, calculer la thermodynamique en début ou en fin de pas de temps est indifférent du fait que l'on ne tiend pas compte du craquage secondaire. La seule différence paraît dans le calcul des saturations de phase. Les saturations sont mieux adaptées lorsque la thermodynamique est calculée en fin de pas de temps plutôt qu'en début (ceci provient de l'utilisation du schéma IMPES pour la résolution des équations en transport).*

On passe maintenant aux résultats numériques pour ce modèle de thermodynamique à masses et volume constants.

6.2.3 Résultats numériques

Un premier cas: le cas incompressible

Présentation de la simulation On se place dans le cas d'un écoulement triphasique "Black-oil" avec des densités de constituant incompressibles. Le bassin est un domaine carré constitué de trois couches géologiques, deux couches d'argile et une couche de sable (drain) les séparant. La couche d'argile supérieure est plus imperméable que la couche inférieure. La compaction est simulée par une pression qui évolue au cours du temps et le long du toit du bassin.
Le but de cette simulation est de confirmer les résultats "théoriques" obtenus dans le paragraphe précédent par la simulation numérique. Pour cela, on a effectué deux simulations, l'une comportant le module thermodynamique de correction de la pression et l'autre servant de "solution de référence". Elle permet également de comparer le comportement du modèle sans mise à jour de la thermodynamique avant le calcul des saturations et celui avec mise à jour de la thermodynamique avant le calcul des saturations.

Les résultats numériques

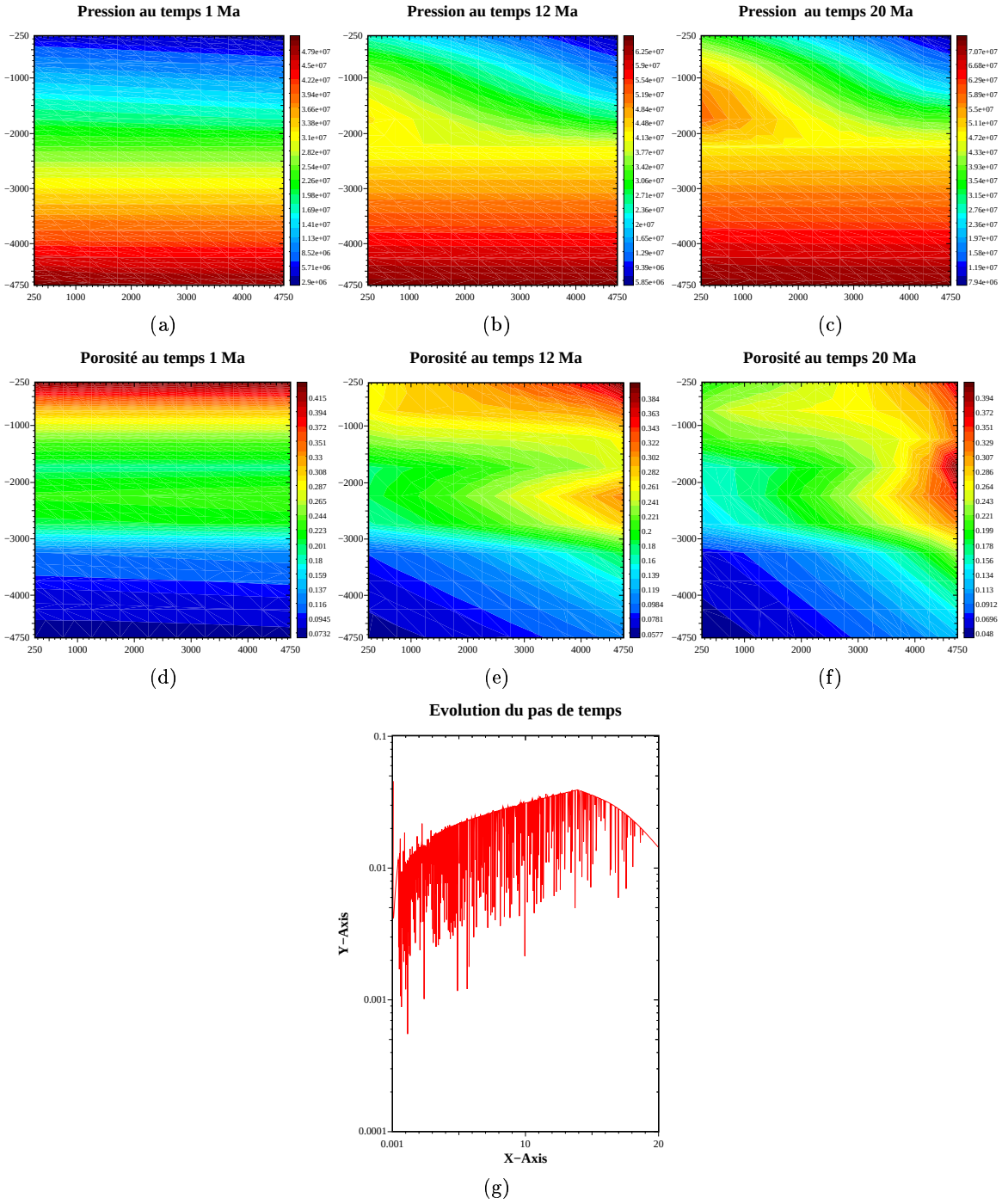


Figure 6.2: Pressions et porosités au temps $1Ma$,$12Ma$ et $20Ma$; évolution du pas de temps dans le cas incompressible du modèle avec le module thermodynamique à masses et volume constants.

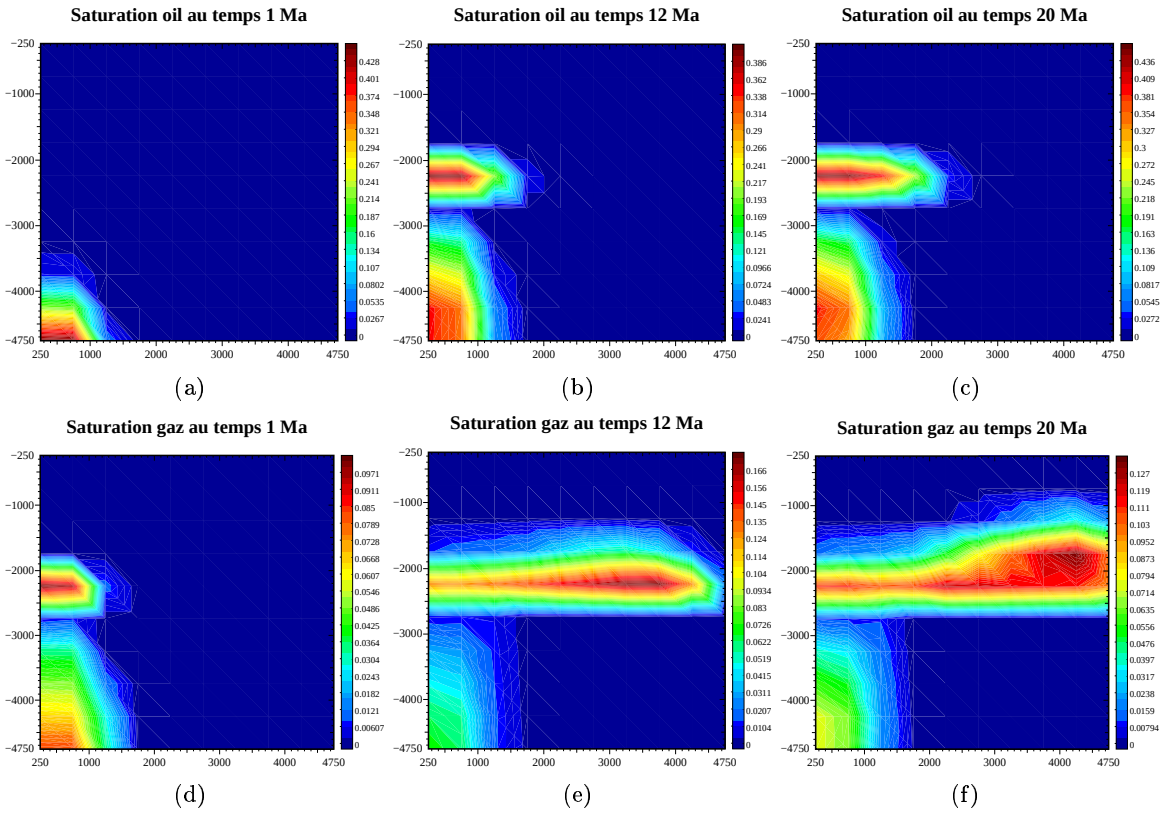


Figure 6.3: Saturations de l'huile et du gaz au temps $1Ma$,$12Ma$ et $20Ma$ dans le cas incompressible du modèle avec le module thermodynamique à masses et volume constants.

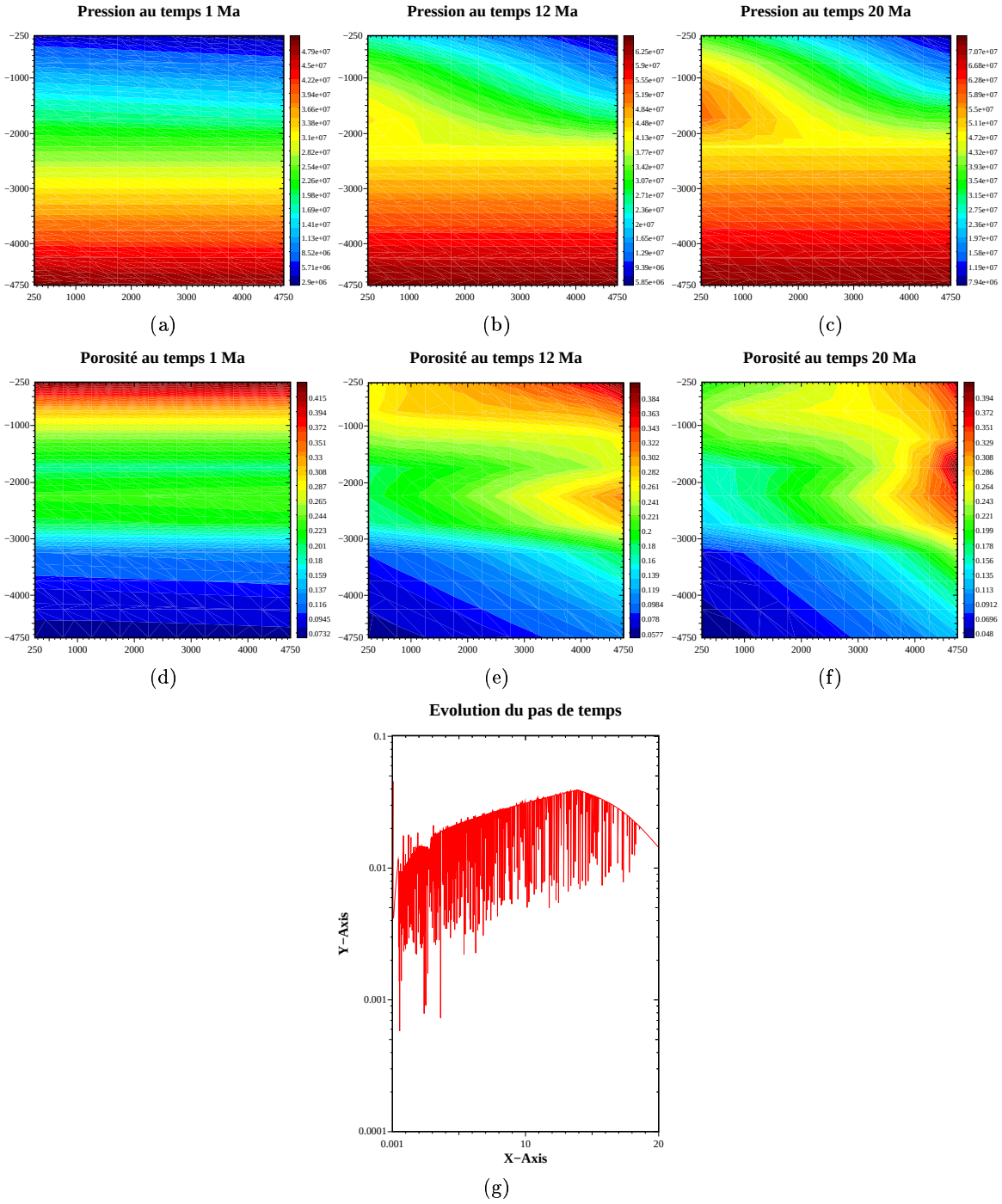


Figure 6.4: Pressions et porosités au temps $1Ma$,$12Ma$ et $20Ma$; évolution du pas de temps dans le cas incompressible du modèle sans le module thermodynamique à masses et volume constants.

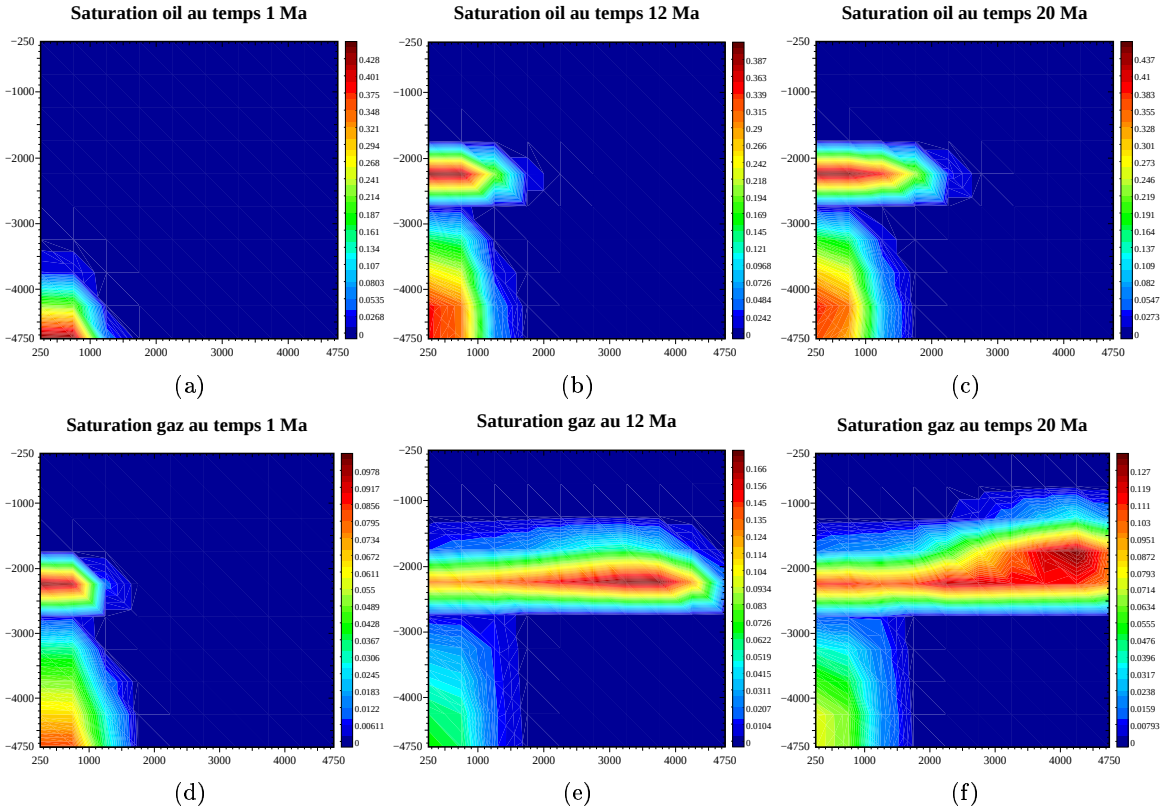


Figure 6.5: Saturations de l'huile et du gaz au temps $1Ma$,$12Ma$ et $20Ma$ dans le cas incompressible du modèle sans le module thermodynamique à masses et volume constants.

Résultats et commentaires Les résultats de la simulation du programme avec le module thermodynamique à masses et volume constants sont présentés aux figures 6.2 et 6.3. Les résultats de la solution de référence sont présentés aux figures 6.4 et 6.5.
Pour le programme simulant le module thermodynamique à masses et volume constants, on a mis à jour les cœfficients thermodynamiques avant le calcul des saturations. Si l'on ne met pas à jour ces cœfficients, on constate que la méthode de Newton programmée dans le module thermodynamique à masses et volume constants ne converge pas et qu'elle génère donc des annulations de pas de temps de façon répétitive. Toutefois, dans cette situation, la simulation parvient à son terme lorsque les critères imposés sur la convergence de Newton ne sont pas trop contraignants et que le pas de temps est suffisamment petit: on a retenu par exemple 10^{-6} comme critère pour la méthode de Newton utilisée dans le module thermodynamique. On a observé que des critères plus petits aboutissaient à un échec de la simulation du fait d'un pas de temps trop petit, de l'ordre de $10^{-13}Ma$. A titre de comparaison, le critère pour la convergence de la méthode de Newton pour l'équation en pression est de 10^{-10}. Le fait de relâcher le critère pour la convergence de la méthode de Newton utilisée pour la résolution de l'équation de thermodynamique à masses et volume constants afin de permettre à la simulation d'atteindre son terme augmente l'erreur commise sur la résolution de l'équation de thermodynamique à masses et volume constants. Dans le cas de mise à jour des cœfficients thermodynamiques avant le calcul des saturations, on constate que le module thermodynamique à masses et volume constants n'effectue aucune itération de Newton lors de la résolution de l'équation thermodynamique à masses et volume constants.
Comme on peut le constater sur les graphiques, aucune différence n'apparaît. Le comportement du pas de temps est quasiment identique, ainsi que le temps de simulation et le nombre d'appels au module de raffinement local du pas de temps. Ceci semble cohérent en vertu des remarques faites dans le paragraphe précédent.
Comme les itérations de Newton ne sont pas effectuées dans le module thermodynamique à masses et volume constants, les valeurs des grandeurs thermodynamiques et de la pression ne sont pas modifiées, on peut donc comparer le modèle de mise à jour de la thermodynamique avant le calcul des saturations et le modèle sans mise à jour. On ne constate aucune différence tant sur l'aspect graphique que sur le gain en nombre d'appels au module de raffinement local du pas de temps.
On a présenté le comportement du modèle tenant compte de la thermodynamique à masses et volume constants dans le cas incompressible. On va maintenant analyser son comportement dans le cas compressible peu et fortement miscible. Ceci est l'objet des deux autres paragraphes.

Un cas compressible peu miscible

Description de la simulation Dans le paragraphe précédent, on a observé le comportement du modèle incluant le module thermodynamique à masses et volume constants dans le cas de densités de constituant constantes. On va maintenant reprendre la simulation dans un cas compressible, mais avec une faible miscibilité du constituant léger dans la phase l'huile. Ceci suppose donc une faible variation des cœfficients de répartition.
La simulation se déroule dans un bassin sédimentaire carré composé de trois couches géologiques, deux couches d'argile séparées par une couche de sable servant de drain. Les argiles ont des perméabilités différentes, l'argile supérieure étant la plus imperméable. Les écoulements sont triphasiques (deux phases hydrocarbures et une phase eau) après génération des constituants dans le fond du bassin.

Résultats numériques

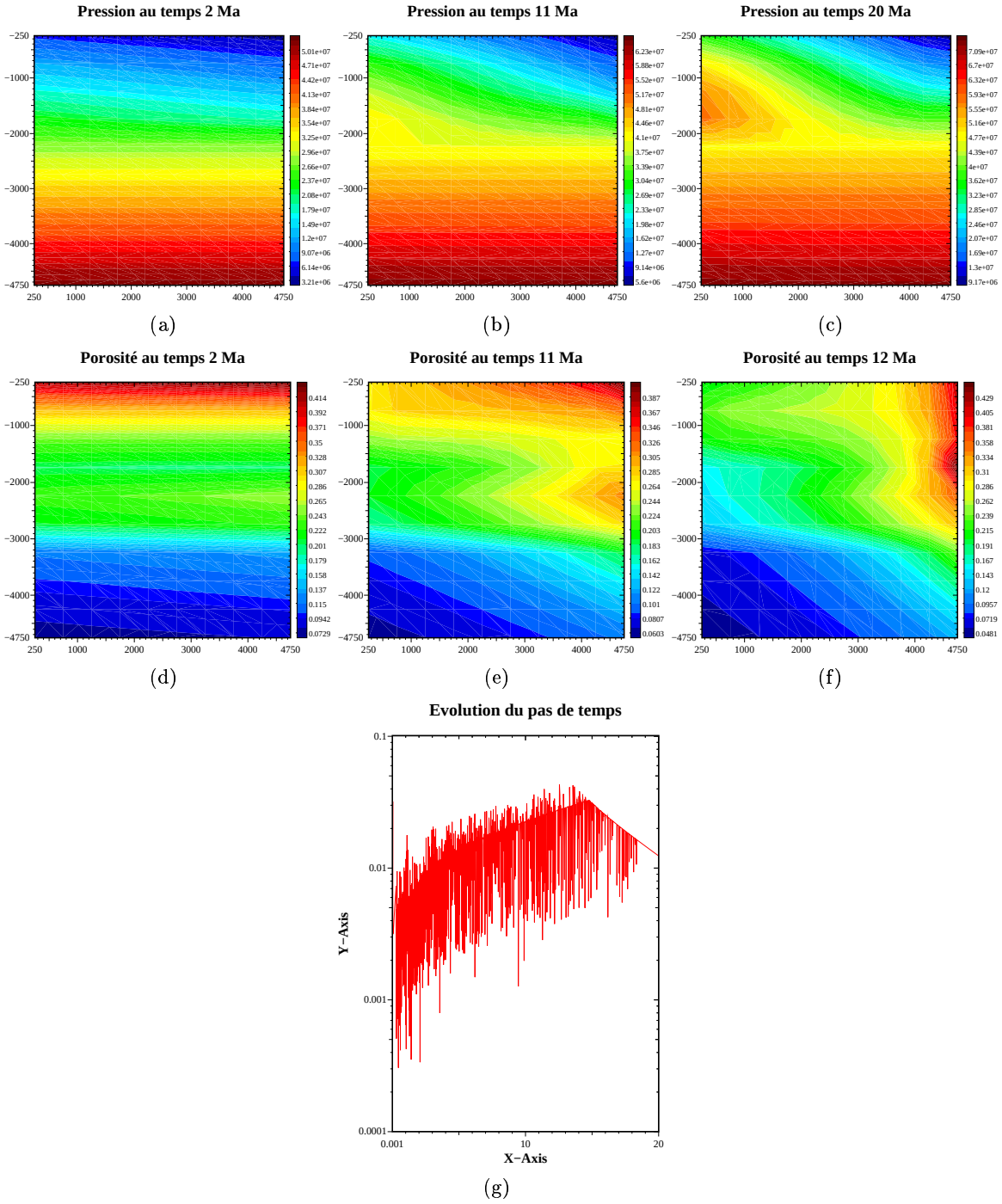


Figure 6.6: Pressions et porosités au temps $2Ma$,$11Ma$ et $20Ma$; évolution du pas de temps dans le cas compressible et peu miscible du modèle avec le module thermodynamique à masses et volume constants.

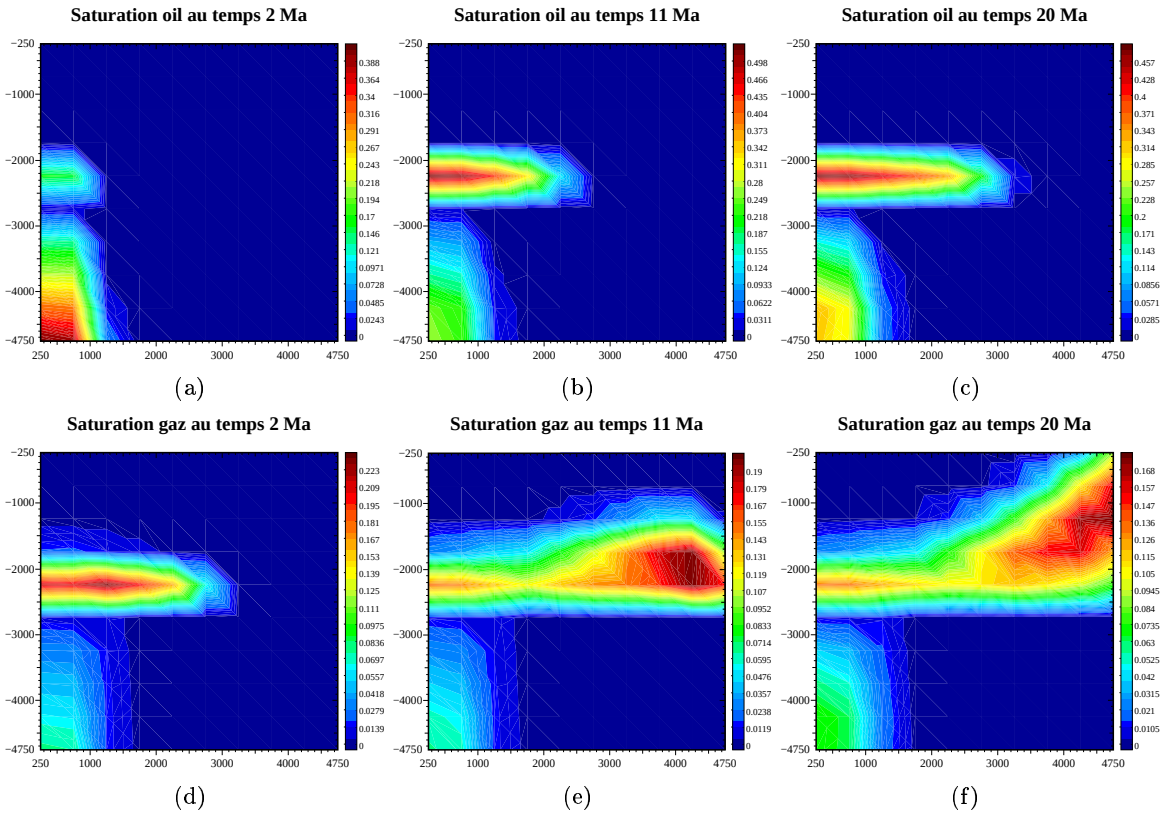


Figure 6.7: Saturations de l'huile et du gaz au temps $2Ma$,$11Ma$ et $20Ma$ dans le cas compressible et peu miscible du modèle avec le module thermodynamique à masses et volume constants.

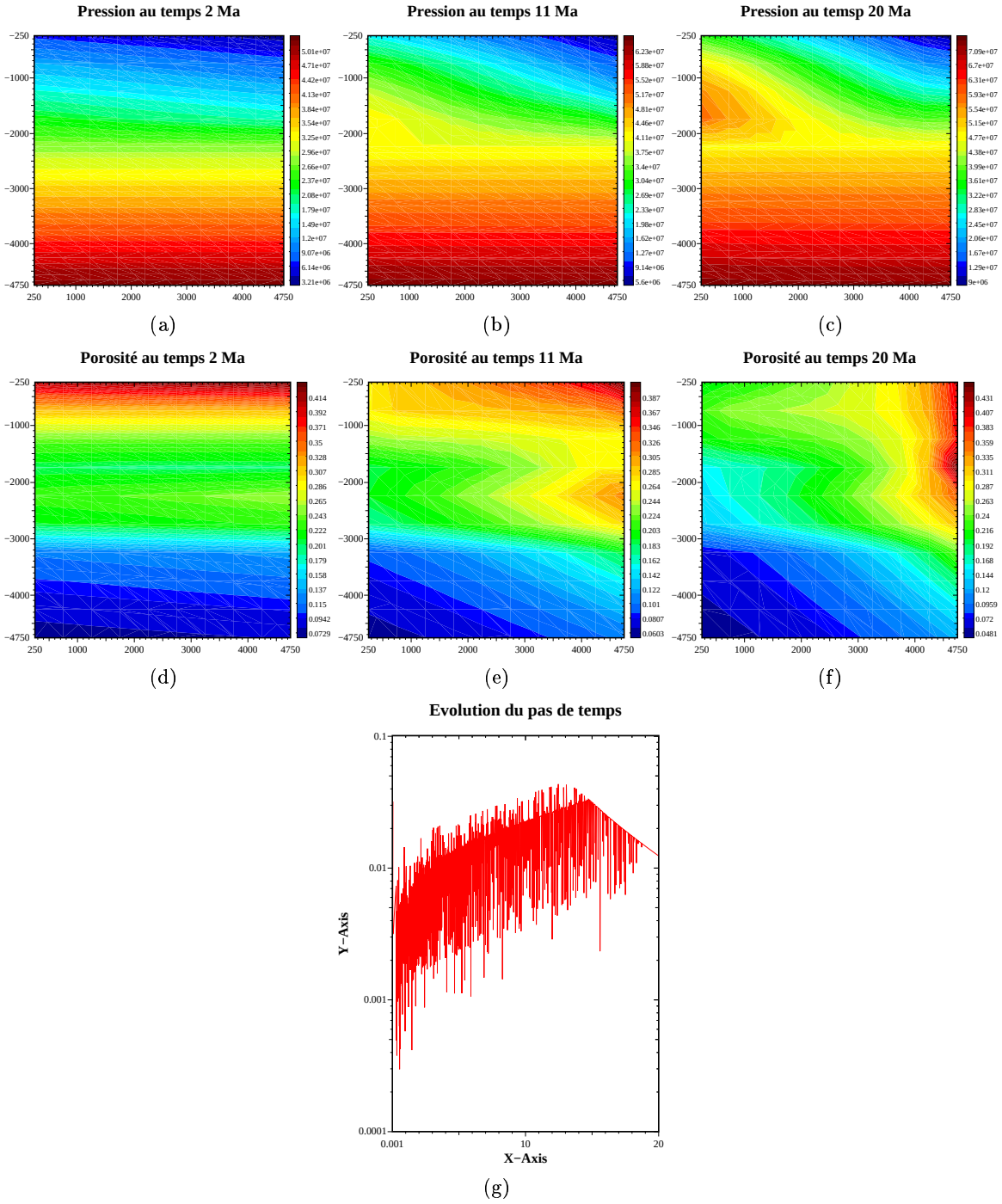


Figure 6.8: Pressions et porosités au temps $2Ma$,$11Ma$ et $20Ma$; évolution du pas de temps dans le cas compressible et peu miscible du modèle sans le module thermodynamique à masses et volume constants.

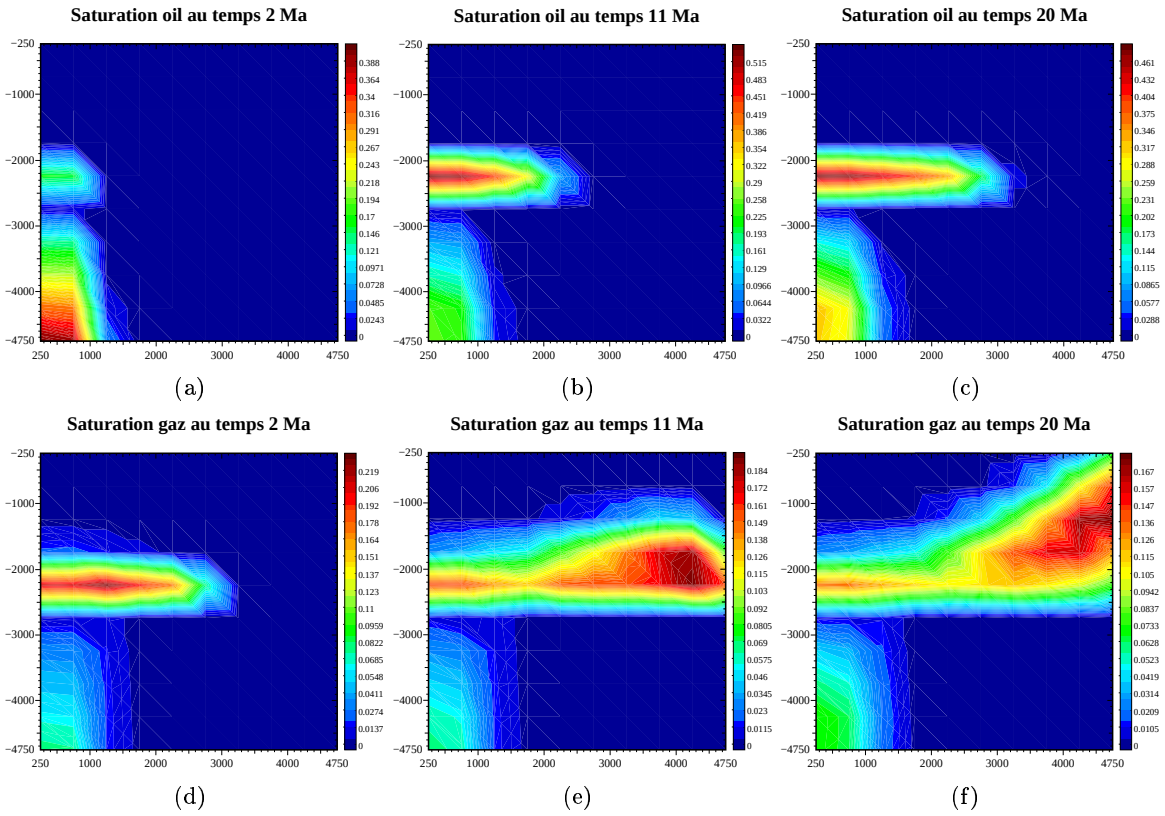


Figure 6.9: Saturations de l'huile et du gaz au temps $2Ma$,$11Ma$ et $20Ma$ dans le cas compressible et peu miscible du modèle sans le module thermodynamique à masses et volume constants.

Résultats et commentaires Les résultats de la simulation contenant le module thermodynamique à masses et volume constants sont présentés sur les figures 6.6 et 6.7. Ceux de la simulation de référence sont présentés sur les graphiques 6.8 et 6.9.
On vérifie de nouveau avec cette simulation les remarques énoncées au début de ce chapitre. Lorsque la mise à jour des cœfficients thermodynamiques n'est pas effectuée avant le calcul des saturations, la méthode de Newton utilisée dans le module thermodynamique à masses et volume constants ne converge pas, et il n'effectue aucune itération de Newton lorsque les cœfficients thermodynamiques sont recalculés avant l'évaluation des saturations.
Enfin, comme le montrent les graphiques, ces deux simulations sont quasiment identiques: l'évolution du pas de temps, le temps de simulation et le nombre d'appels au module de raffinement local du pas de temps sont semblables.
Cette simulation montre également que le comportement entre le modèle avec mise à jour de la thermodynamique avant le calcul des saturations et celui sans mise à jour est identique malgré une physique plus "raide".
Pour terminer ce paragraphe, on présente une dernière simulation dans un cas compressible fortement miscible.

Cas compressible fortement miscible

Dans les deux paragraphes précédents, on a vu que les résultats obtenus au début de ce chapitre étaient vérifiés dans un cas incompressible et dans un cas compressible avec une faible miscibilité du constituant léger dans la phase huile. On se propose, dans ce dernier paragraphe, de simuler un cas incompressible avec une miscibilité importante du constituant léger dans la phase huile et d'analyser les résultats obtenus. Cette forte miscibilité a pour but de faire varier de façon importante les cœfficients de répartition. Comme dans les cas précédents, le bassin est un carré constitué de trois couches géologiques, deux couches d'argile et une couche de sable les séparant. L'argile supérieure est plus imperméable que l'argile du fond du bassin. Les hydrocarbures sont générés par craquage primaire au fond du bassin, les écoulements qui en résultent sont triphasiques (deux phases hydrocarbures et une phase eau).

Résultats numériques

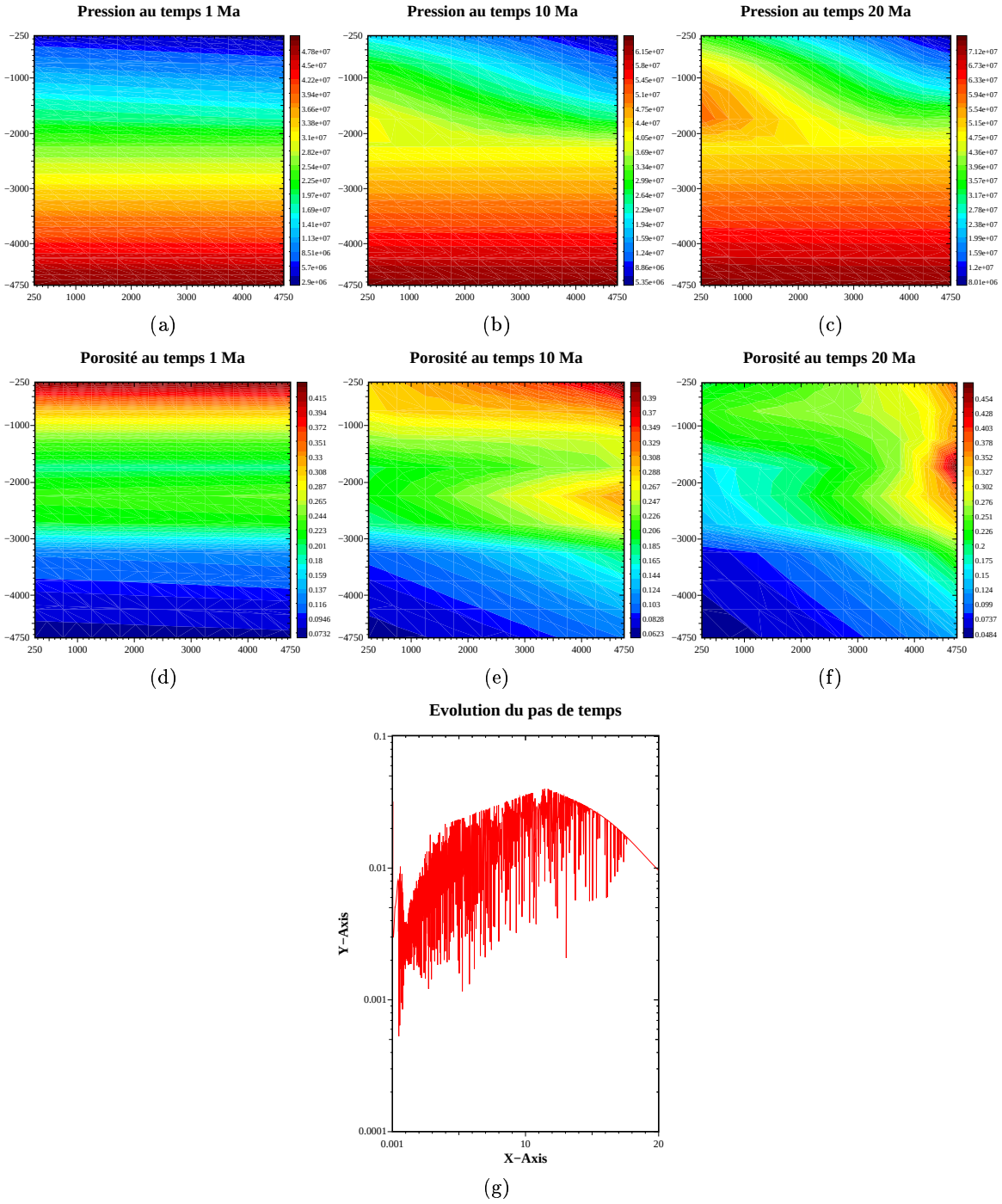


Figure 6.10: Pressions et porosités au temps $1Ma$,$10Ma$ et $20Ma$; évolution du pas de temps dans le cas compressible et fortement miscible du modèle avec le module thermodynamique à masses et volume constants.

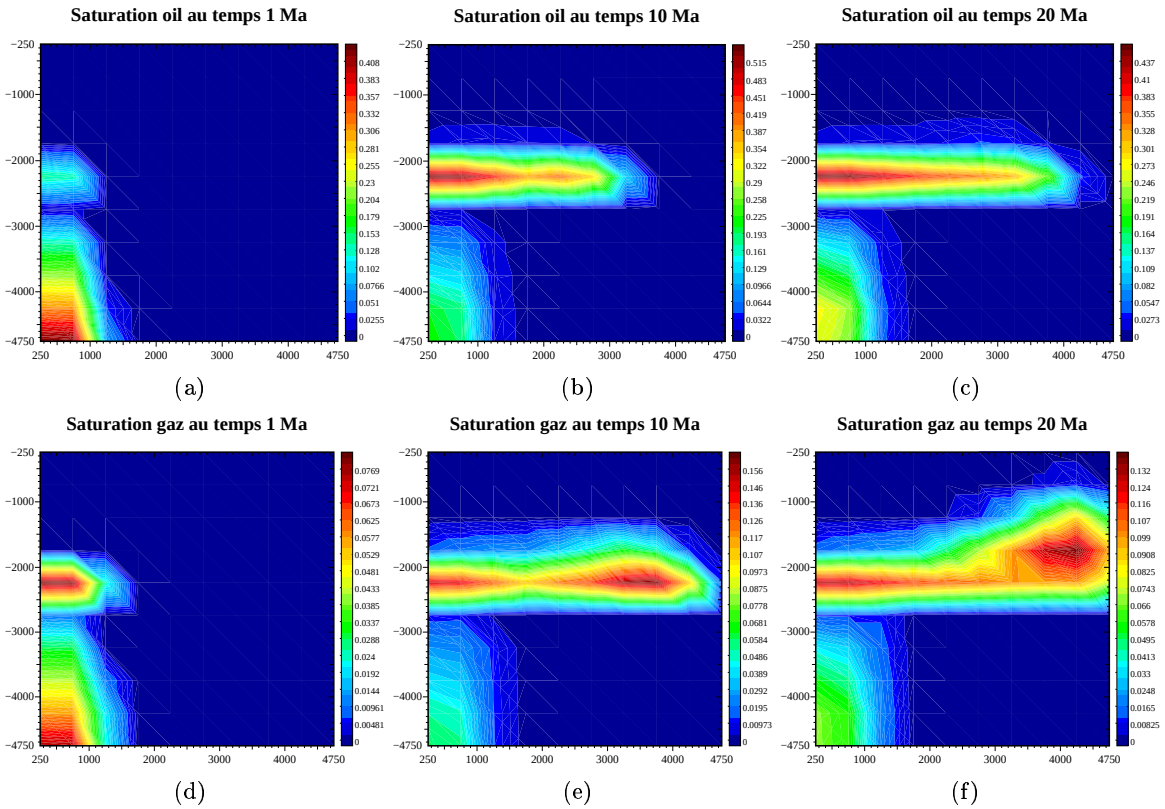


Figure 6.11: Saturations de l'huile et du gaz au temps $1Ma$,$10Ma$ et $20Ma$ dans le cas compressible et fortement miscible du modèle avec le module thermodynamique à masses et volume constants.

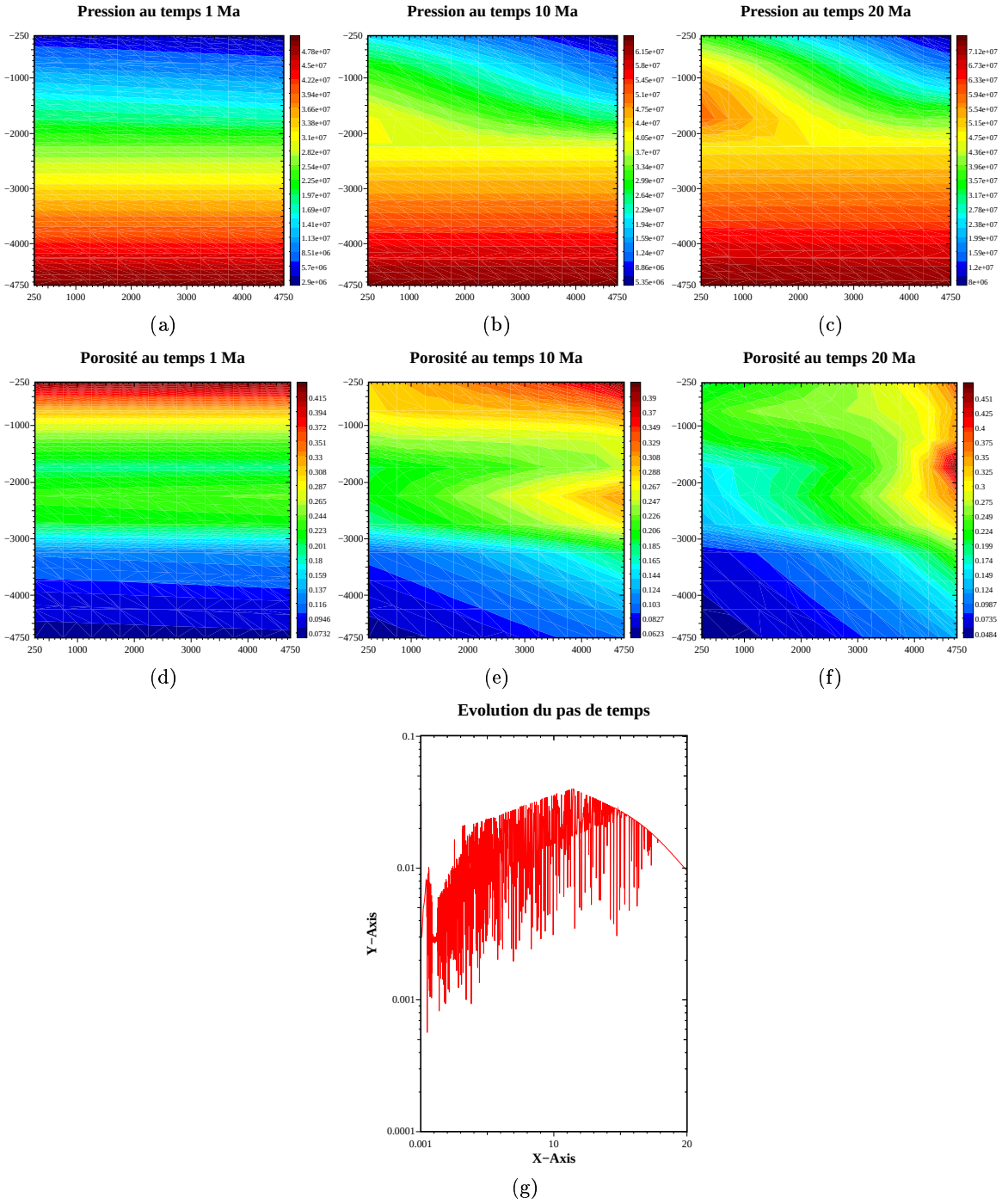


Figure 6.12: Pressions et porosités au temps $1Ma$,$10Ma$ et $20Ma$; évolution du pas de temps dans le cas compressible et fortement miscible du modèle sans le module thermodynamique à masses et volume constants.

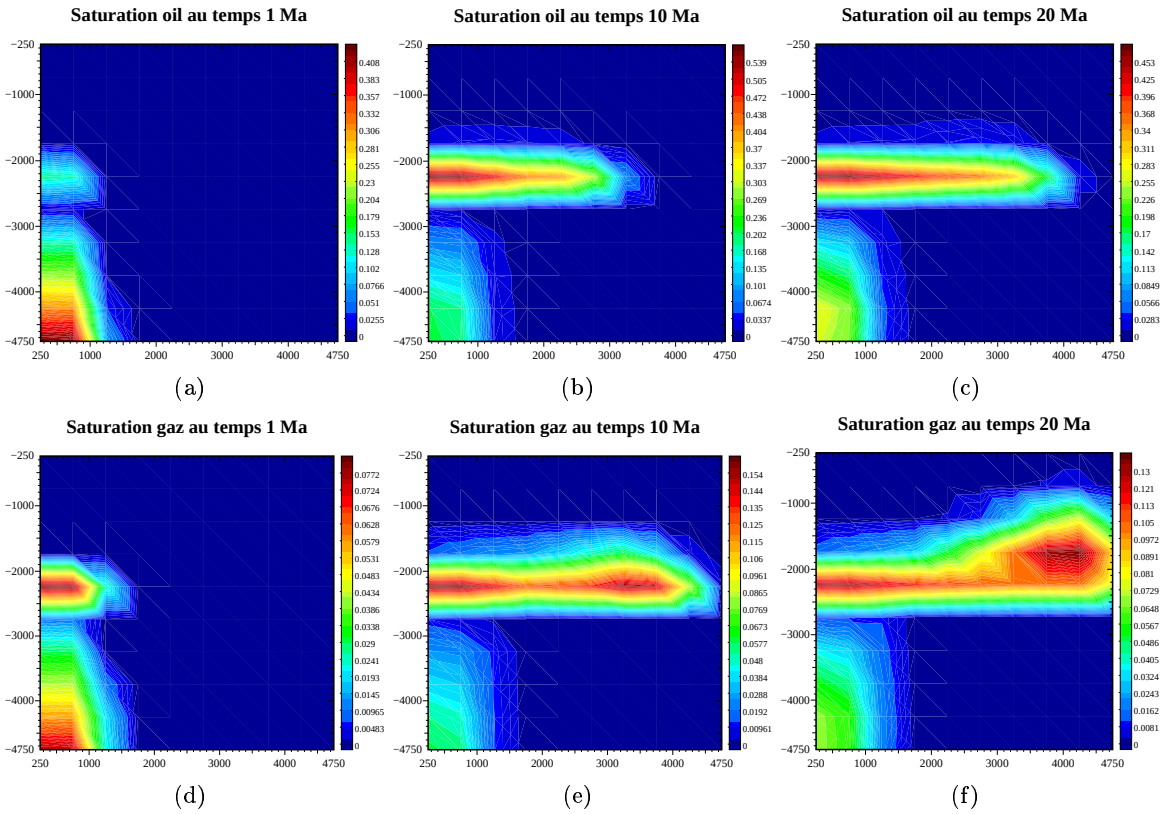


Figure 6.13: Saturations de l'huile et du gaz au temps $1Ma$,$10Ma$ et $20Ma$ dans le cas compressible et fortement miscible du modèle sans le module thermodynamique à masses et volume constants.

Résultats et commentaires Les résultats de cette simulation incluant le module thermodynamique à masses et volume constants sont présentés sur les figures 6.10 et 6.11. Ceux de la simulation ne tenant pas compte de ce module et servant de référence, sont présentés sur les figures 6.12 et 6.13.
Comme dans les cas précédents, lorsque l'on met à jour les cœfficients thermodynamiques avant le calcul des saturations, le module thermodynamique à masses et volume constants converge sans effectuer d'itération de Newton, alors que lorsque les cœfficients thermodynamiques ne sont pas mis à jour avant le calcul des saturations, la méthode de Newton utilisée par le module thermodynamique à masses et volume constants ne converge pas. On confirme donc, par cet exemple, les résultats obtenus au début de ce chapitre.
La comparaison des graphiques entre les deux simulations ne montre quasiment aucune différence. L'évolution du pas de temps est semblable, bien que celui-ci semble un peu plus oscillant dans le cas de la simulation incluant le module thermodynamique à masses et volume constants que lorsqu'il n'y est pas.
Comme dans les deux simulations précédentes, on ne met pas en valeur la performance de la simulation avec mise à jour de la thermodynamique ou sans mise à jour. Un module thermodynamique plus complexe pourrait peut-être les différencier.

6.3 Une seconde approche de l'équation

6.3.1 Nouvelle équation pour le module thermodynamique à masses et volume constants

Dans le paragraphe précédent, on constate les limites du module thermodynamique de correction de la pression dont on rappelle l'écriture ci-dessous:

$$\frac{\sum_{j=1}^{Nh_c} m_j}{\rho_{HC}(P,(m_j)_{j=1,\dots,Nh_c})} = \Phi(1-S_w). \quad (6.1)$$

Cette équation n'admet de solution que si l'on met à jour la thermodynamique avant le calcul des saturations et est vérifiée par la pression issue du transport.
On se propose de modifier le calcul des cœfficients de répartition β_j^α afin de prendre en compte les apparitions de phase pendant le transport et d'éviter l'appel du module thermodynamique avant le calcul des saturations. Une première approche est de considérer que tous les constituants qui apparaissent dans une maille qui ne contenait que de l'eau appartiennent à la phase huile (en d'autres termes, dès qu'une phase hydrocarbure apparaît, c'est une phase huile). On a donc les relations suivantes pour les cœfficients de répartition:

$$\begin{cases} \beta_j^o = 1 & j = 1,\dots,Nh_c \\ \beta_j^g = 0 & j = 1,\dots,Nh_c \end{cases}$$

Ces relations sont valables uniquement dans le cas de mailles monophasiques eau. On résout alors, dans ces mailles monophasiques eau, l'équation de fermeture du transport suivante:

$$\frac{m_w}{\rho_w} + \sum_{j=1}^{Nh_c} \frac{m_j}{\rho_j^o} = \Phi. \quad (6.9)$$

Dans les autres mailles (dans lesquelles au moins une phase hydrocarbure est présente) on résout l'équation suivante:

$$\frac{m_w}{\rho_w} + \sum_{j=1}^{Nh_c} \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} \frac{\beta_j^\alpha m_j}{\rho_j^\alpha} = \Phi. \quad (6.10)$$

Pour ne pas retomber dans le cas précédent de résolution de l'équation (6.1), on doit modifier cette dernière. On résout alors l'équation thermodynamique à masses et volume constants suivante:

$$\begin{cases} \text{Chercher } P \text{ tel que} \\ \dfrac{m_w}{\rho_w} + \dfrac{\sum_{j=1}^{Nh_c} m_j}{\rho_{HC}(P,(m_j)_{j=1,\dots,Nh_c})} = \Phi. \end{cases} \quad (6.11)$$

où Φ et les masses m_j sont données par la résolution des équations de transport.

Réécriture de l'équation (6.11) **après avoir résolu l'équation** (6.9)

On se place dans le cas d'une maille monophasique eau avec une apparition de phase (choisie arbitrairement, ici supposée être de l'huile) au cours du transport. La différence par rapport au cas précédent est que l'on suppose que la densité du constituant dépend de la phase dans laquelle il se trouve. On résout alors l'équation de fermeture suivante:

$$\frac{m_w}{\rho_w} + \sum_{j=1}^{Nh_c} \frac{m_j}{\rho_j^o} = \Phi. \quad (6.9)$$

Cette équation donne un volume poreux, des masses et une pression. Cette pression va être corrigée par la résolution de l'équation (6.11).
En remplaçant Φ de l'équation (6.11) par sa valeur donnée par l'équation (6.9), puis en simplifiant par $\frac{m_w}{\rho_w}$, on trouve la relation à résoudre suivante:

$$\begin{cases} \text{Chercher } P \text{ tel que} \\ \dfrac{\sum_{j=1}^{Nh_c} m_j}{\rho_{HC}(P, (m_j)_{j=1,\dots,Nh_c})} = \displaystyle\sum_{j=1}^{Nh_c} \frac{m_j}{\rho_j^o}. \end{cases} \quad (6.12)$$

On prend alors comme pression initiale la valeur de la pression donnée par l'équation (6.9).
On sait que $\frac{\sum_{j=1}^{Nh_c} m_j}{\rho_{HC}(P, (m_j)_{j=1,\dots,Nh_c})} = \frac{m_o}{\rho_o} + \frac{m_g}{\rho_g}$. Par définition, on a $m_\alpha = \sum_{j=1}^{Nh_c} \beta_j^\alpha m_j$, ce qui finalement donne:

$$\frac{\sum_{j=1}^{Nh_c} m_j}{\rho_{HC}(P, (m_j)_{j=1,\dots,Nh_c})} = \sum_{j=1}^{Nh_c} m_j \left(\frac{\beta_j^o}{\rho_o} + \frac{\beta_j^g}{\rho_g}\right).$$

En reportant cette relation dans la relation (6.12), on obtient la relation thermodynamique à masses et volume constants suivante:

$$\sum_{j=1}^{Nh_c} m_j \left(\frac{\beta_j^o}{\rho_o} + \frac{\beta_j^g}{\rho_g}\right) = \sum_{j=1}^{Nh_c} \frac{m_j}{\rho_j^o}. \quad (6.13)$$

Comme cette équation n'est pas vérifiée directement par la pression issue du problème de transport comme dans le cas du paragraphe précédent, on suppose qu'elle va corriger cette pression et donner de nouveaux cœfficients de répartition. On peut alors se demander si cette équation admet une solution. Dans le cas général, on ne sait pas répondre. En revanche, on va analyser le comportement de l'équation (6.13) dans deux cas particuliers.

6.3.2 Un cas particulier pour la nouvelle équation thermodynamique à masses et volume constants

Cas particulier où $\rho_j^\alpha(P) = \rho_j(P) \quad \alpha = 1, \ldots, Nc_p \quad j = 1, = 1, \ldots, Nh_c$

On se place dans le cas multiphasique et multiconstituant. Les seules hypothèses portent sur les densités des constituants puisque l'on suppose que $\rho_j^\alpha = \rho_j$ (les densités des constituants ne dépendent pas de la phase dans laquelle ils se trouvent) et sur le calcul des densités de phase qui s'effectue comme suit:

$$\rho_\alpha^{-1} = \sum_{j=1}^{N_c} \frac{C_j^\alpha}{\rho_j}.$$

L'hypothèse d'indépendance des densités de constituant par rapport aux phases permet de transformer l'équation de fermeture du transport (6.10). On part de l'équation générale:

$$\frac{m_w}{\rho_w} + \sum_{j=1}^{Nh_c} \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} \frac{m_j^\alpha}{\rho_j^\alpha} = \Phi. \tag{6.14}$$

Or, $m_j^\alpha = \beta_j^\alpha m_j$ et par hypothèse $\rho_j^\alpha = \rho_j$, d'où

$$\frac{m_w}{\rho_w} + \sum_{j=1}^{Nh_c} \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} \frac{\beta_j^\alpha m_j}{\rho_j} = \Phi. \tag{6.15}$$

En utilisant le fait que $\sum_{\alpha=1}^{Nc_p} \beta_j^\alpha = 1$, on obtient finalement la relation cherchée suivante:

$$\frac{m_w}{\rho_w} + \sum_{j=1}^{Nh_c} \frac{m_j}{\rho_j} = \Phi. \tag{6.16}$$

Une fois l'équation (6.16) résolue, on corrige la pression avec l'équation thermodynamique (6.11). On choisit la pression issue de la résolution de l'équation (6.16). En partant de la définition de ρ_{HC} suivante:

$$\frac{1}{\rho_{HC}} = \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} \frac{m_\alpha}{m_T \rho_\alpha},$$

où $m_T = \sum_{j=1}^{Nh_c} m_j$, puis en utilisant le fait que $\frac{1}{\rho_\alpha} = \sum_{j=1}^{Nh_c} \frac{C_j^\alpha}{\rho_j}$, on obtient la formule suivante pour la densité de mélange:

$$\frac{1}{\rho_{HC}} = \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} \sum_{j=1}^{Nh_c} \frac{C_j^\alpha m_\alpha}{m_T \rho_j}.$$

Or, comme $\sum_{\alpha=1}^{Nc_p} C_j^\alpha m_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} m_j^\alpha = \sum_{\alpha=1}^{Nc_p} \beta_j^\alpha m_j = m_j$, on obtient finalement:

$$\frac{1}{\rho_{HC}} = \sum_{j=1}^{Nh_c} \frac{m_j}{m_T \rho_j}.$$

En reportant cette relation dans l'équation thermodynamique (6.11), on trouve l'équation suivante à résoudre:

$$\frac{m_w}{\rho_w} + \sum_{j=1}^{Nh_c} \frac{m_j}{m_T \rho_j} \times \sum_{j=1}^{Nh_c} m_j = \Phi, \tag{6.17}$$

i.e.

$$\frac{m_w}{\rho_w} + \sum_{j=1}^{Nh_c} \frac{m_j}{\rho_j} = \Phi. \tag{6.18}$$

Si l'on compare l'équation thermodynamique à masses et volume constants (6.18) et l'équation de fermeture du transport (6.16), on constate qu'elles sont identiques. Ceci montre que l'équation thermodynamique à masses et volume constants est cohérente par rapport au problème, mais pose le problème de la mise à jour des cœfficients de répartition dans ce cas. De plus, le problème d'initialisation (choix arbitraire d'une phase lors de l'apparition de constituants hydrocarbures dans une phase) semble important pour la convergence du module thermodynamique à masses et volume constants puisqu'il impose un pas de temps très restrictif pour la convergence de ce module comme le montreront les essais numériques. Enfin, le fait de ne modifier que la pression dans ce module thermodynamique à masses et volume constants pose la difficulté de la prise en compte des hydrocarbures très faiblement compressibles qui sont simulés, très souvent, par le cas limite des densités constantes. Comme le montreront les essais numériques, le module thermodynamique à masses et volume constants ne converge que si l'on impose des variations de pression très très faibles (on peut se poser alors la question de l'utilité d'effectuer alors une telle étape).

6.3.3 Résultats numériques

Cas des densités compressibles

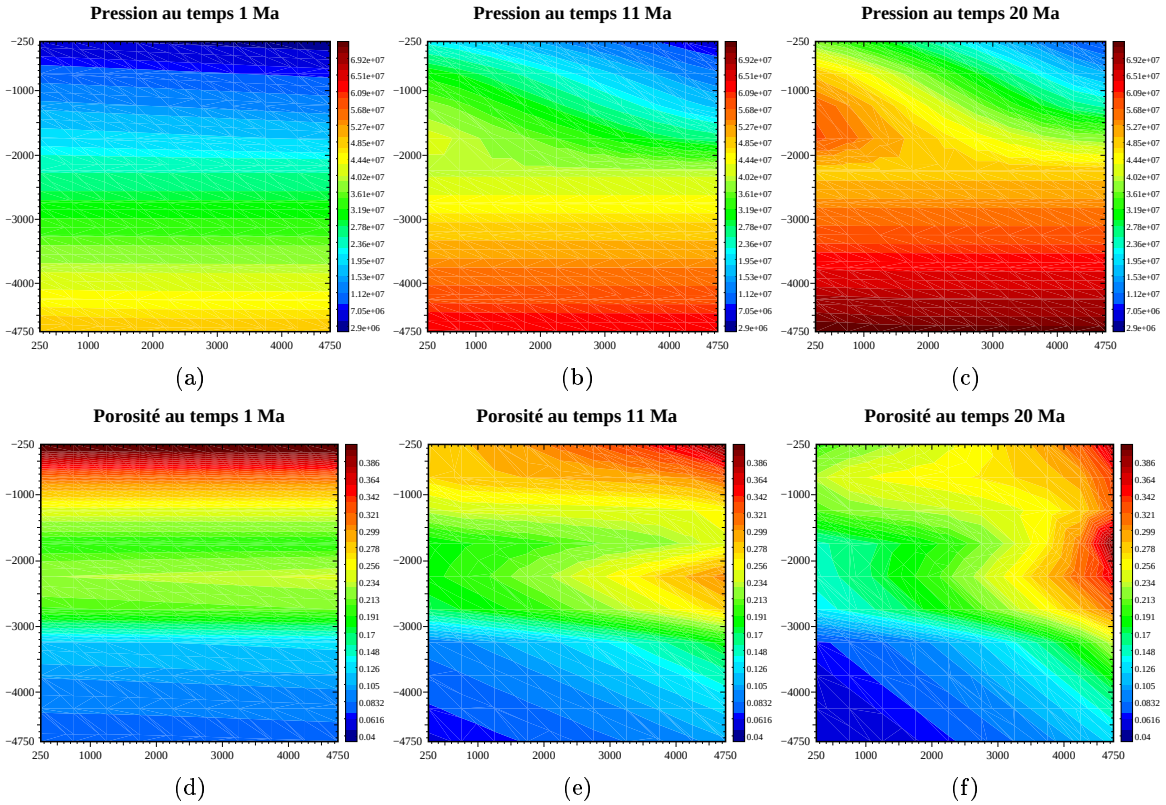
Aspect général de la simulation Dans ce paragraphe, on s'intéresse au cas des densités de constituants compressibles afin d'observer le comportement du modèle avec une thermodynamique à masses et volume constants lorsqu'il est soumis à une physique "difficile". N'étant pas physiquement réaliste, le cas incompressible ne sera pas abordé. Toutefois, ce cas est très difficile à simuler avec le modèle tenant compte de la thermodynamique à masses et volume constants puisqu'il nécessite des pas de temps de l'ordre de $10^{-7}Ma$ (ce qui correspond à des pas de temps de moins d'une année) pour achever la simulation. Il soulève également le problème de la simulation des fluides dont les densités sont très faiblement compressibles (des pas de temps légèrement plus grands sont à prévoir, mais restent toujours de l'ordre de l'année). Ces deux types de simulation n'ont pas été effectués devant l'ampleur du temps de calcul nécessaire.
Le domaine est un carré constitué de deux couches d'argile et d'une couche de sable servant de drain entre ces deux couches. Les hydrocarbures sont générés par craquage au fond du bassin. Les écoulements résultants sont de type "Black-oil".
Le but de cette simulation est d'évaluer le gain apporté par le modèle avec une thermodynamique à masses et volume constants par rapport au modèle qui n'y fait pas appel (modèle en masses de composés utilisé jusque là).

Résultats et conclusions On présente les résultats du modèle prenant en compte l'étape de calcul de l'équation thermodynamique à masses et volume constants après le transport sur les figures 6.14 et 6.15. Comme dans le paragraphe précédent, on compare ces résultats aux résultats du modèle n'incluant pas cette étape et jusqu'ici utilisé. Ces résultats sont présentés sur les figures 6.16 et 6.17.
La première observation se rapporte à l'évolution du pas de temps. En effet, le pas de temps issu du modèle tenant en compte l'étape de calcul de l'équation thermodynamique à masses et volume constants après le transport a dû être fixé à la valeur maximale de $0.002Ma$ afin d'amener la simulation à son terme. On a fait varier cette valeur maximale, et il semble qu'elle doive être comprise entre $0.003Ma$ et $0.004Ma$ pour ce jeu de donné, puisque le run échoue avec la valeur $0.004Ma$. Lorsque l'on relâche trop cette valeur maximale le pas de temps se met à osciller et la méthode de Newton, utilisée pour la résolution de l'équation en pression, ne converge plus, même avec des pas de temps très petits (le pas de temps atteint la valeur minimale fixée à une seconde). Dans le cas de la valeur maximale fixée à $0.002Ma$, on observe quand même des chutes de pas de temps, mais moins importantes que précédemment. La condition de *CFL* est plus contraignante dans ce cas que dans le cas de la simulation du modèle n'effectuant pas l'étape de calcul de l'équation thermodynamique à masses et volume consants, puisque, dans ce modèle, elle semble se situer autour de $0.01Ma$ avec une croissance au cours du temps.
On cherche à mieux comprendre l'importante contrainte sur la condition CFL. On com-

mence par présenter la numérotation des mailles du domaine sur la figure 6.18 afin de mieux localiser les difficultés. La figure 6.19 présente l'évolution de la différence relative entre la pression issue du transport et la pression issue du calcul de l'équation thermodynamique à masses et volume constants. Les figures (6.20(a) jusqu'à (f)) présentent cette même différence mais sur tout le domaine à différents temps. Pour le besoin de cette simulation, la pression issue du calcul de l'équation thermodynamique à masses et volume constants n'influence pas la simulation puiqu'elle est calculée à part. Dans le cas de non-convergence de la pression issue du calcul de l'équation thermodynamique à masses et volume constants , on l'indique par la valeur de -5 dans la différence. Le pas de temps pour cette simulation peut varier jusqu'à un pas de temps maximal de $0.2Ma$. L'observation au vu des figures 6.19 et 6.20(a) jusqu'à (f) se focalise sur la différence de comportement de la pression selon le milieu dans lequel elle se situe. En effet, la différence relative entre la pression issue du transport et la pression issue du calcul de l'équation thermodynamique à masses et volume constants est peu importante dans les mailles argileuses (mailles numérotées de 1 jusqu'à 40) alors qu'elle est importante dans le drain (mailles 41 à 60). On observe deux comportements de la différence relative de pression dans le drain: soit la méthode de Newton permettant de calculer la pression de l'équilibre thermodynamique ne converge pas (fait caractérisé sur les graphiques par la valeur -5), soit l'écart entre la pression issue du transport et celle issue du calcul de l'équation thermodynamique à masses et volume constants est important. En général, la pression issue du calcul de l'équation thermodynamique à masses et volume constants est inférieure dans un rapport de un à trois à celle du transport puisque la différence entre les deux pressions est positive. Lorsque l'on simule le modèle tenant compte du calcul de l'équation thermodynamique à masses et volume constants après le transport, le premier comportement n'est pas très génant: il suffit d'annuler le pas de temps et de recommencer en le divisant par deux autant de fois que nécessaire pour que la simulation "passe". Par contre, le deuxième comportement est plus délicat pour la suite de la simulation. En effet, cette nouvelle pression, issue de l'équation thermodynamique à masses et volume constants, est plus petite que la pression issue du transport. Celle-ci crée des "trous" de pression puisqu' elle est évaluée localement dans chaque maille et n'est modifiée que dans les zones dans lesquelles les hydrocarbures sont présents. On introduit donc ainsi des chocs de pression lors de l'évaluation de la pression globale par le transport. Ceci explique le fait qu'au bout d'un certain temps, la méthode de Newton utilisée pour le calcul de l'équation en pression du transport ne converge plus, même avec des pas de temps très petits (la simulation s'arrête si l'on n'a pas convergé avec des pas de temps de l'ordre de la seconde). Afin de mieux comprendre la cause de la non convergence de la méthode de Newton utilisée dans la résolution de l'équation en pression du transport, on présente sur la figure 6.21 la différence relative entre la pression issue du transport et celle issue du calcul de l'équation thermodynamique à masses et volume constants dans le cas du modèle tenant compte de l'équation thermodynamique à masses et volume constants après le transport. Les simulations présentées sont effectuées avec trois valeurs de variation maximale du pas de temps (*i.e.* le pas de temps ne peut pas dépasser cette valeur). On a retenu des mailles dans la zone de craquage (maille 1),

dans l'argile (maille 31) et dans le drain (maille 41) afin d'observer le comportement de l'évolution de cette différence relative de pression suite aux résultats précédents. On constate que pour que la simulation arrive à son terme (cas de la variation maximale du pas de temps de $0.002Ma$, ce qui implique un pas de temps quasiment constant, *cf.* figure 6.14) il ne faut pas que les variations entre la pression issue du transport et que la pression issue du calcul de l'équation thermodynamique à masses et volume constants soient trop importantes (moins de 0.1% de variation). En effet, au vu des autres simulations, lorsque la variation approche 1 (cas de la figure 6.21(f) *i.e.* une variation de 93%) ou la dépasse (figure 6.21(c)), la méthode de Newton utilisée pour la résolution de l'équation en pression du transport ne converge pas et la simulation échoue, arrêtée car la convergence de la méthode de Newton n'est pas établie avec des pas de temps de l'ordre de la seconde. Cet échec de la simulation avec de grandes variations de la pression entre le transport et l'équation thermodynamique à masses et volume constants peut provenir du caractère elliptique de la pression. Lorsque l'on résout l'équation de thermodynamique à masses et volume constants, cette résolution se fait localement et de façon indépendante des autres mailles. Or la pression ayant un caractère elliptique, toute modification de celle-ci en un point se répercute immédiatement sur le reste du domaine. Cet effet est ignoré lors de la résolution de l'équation thermodynamique à masses et volume constants.
Enfin, lorsque l'on compare les résultats obtenus sur les saturations, on observe une "bulle" de saturation des hydrocarbures (figure 6.15) lors du déplacement du front de saturation avec le modèle prenant en compte le calcul de l'équation thermodynamique à masses et volume constants après le transport alors que les saturations des hydrocarbures sont plus homogènes dans le cas du modèle sans cette étape. On peut alors se demander si les saturations obtenues dans le cas du modèle prenant en compte l'étape de calcul de l'équation thermodynamique à masses et volume constants sont réalistes.

Résultats des simulations



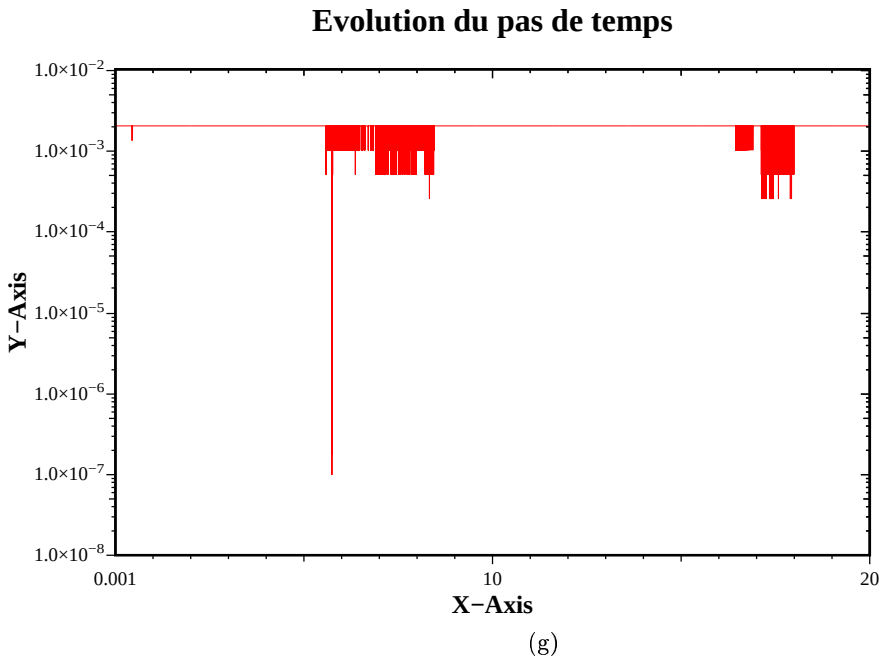


Figure 6.14: Pressions et porosités en différents temps pour le modèle prenant en compte une thermodynamique à masses et volume constants avec évolution du pas de temps. Cas des densités de constituants compressibles et d'une thermodynamique fortement miscible.

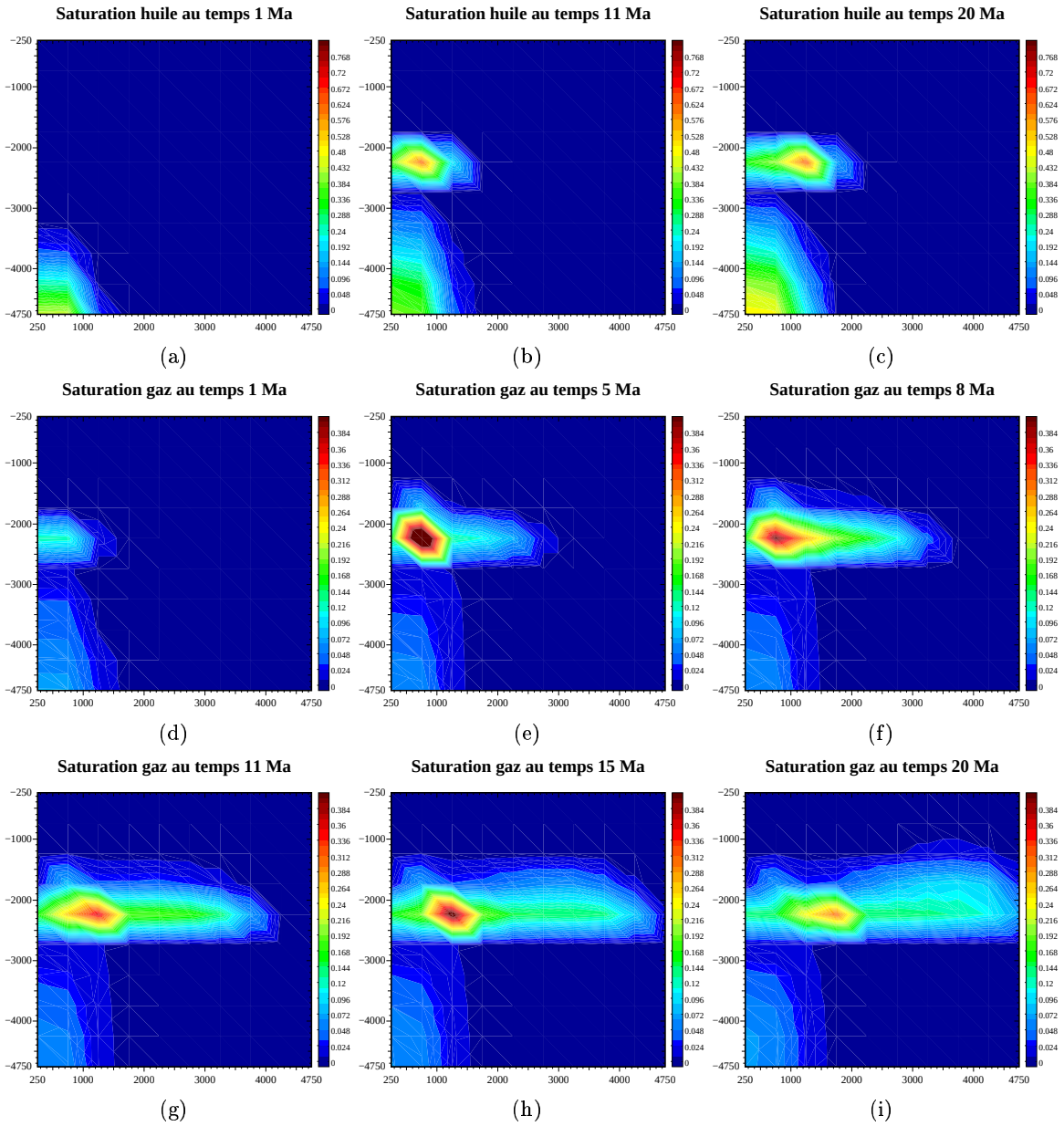
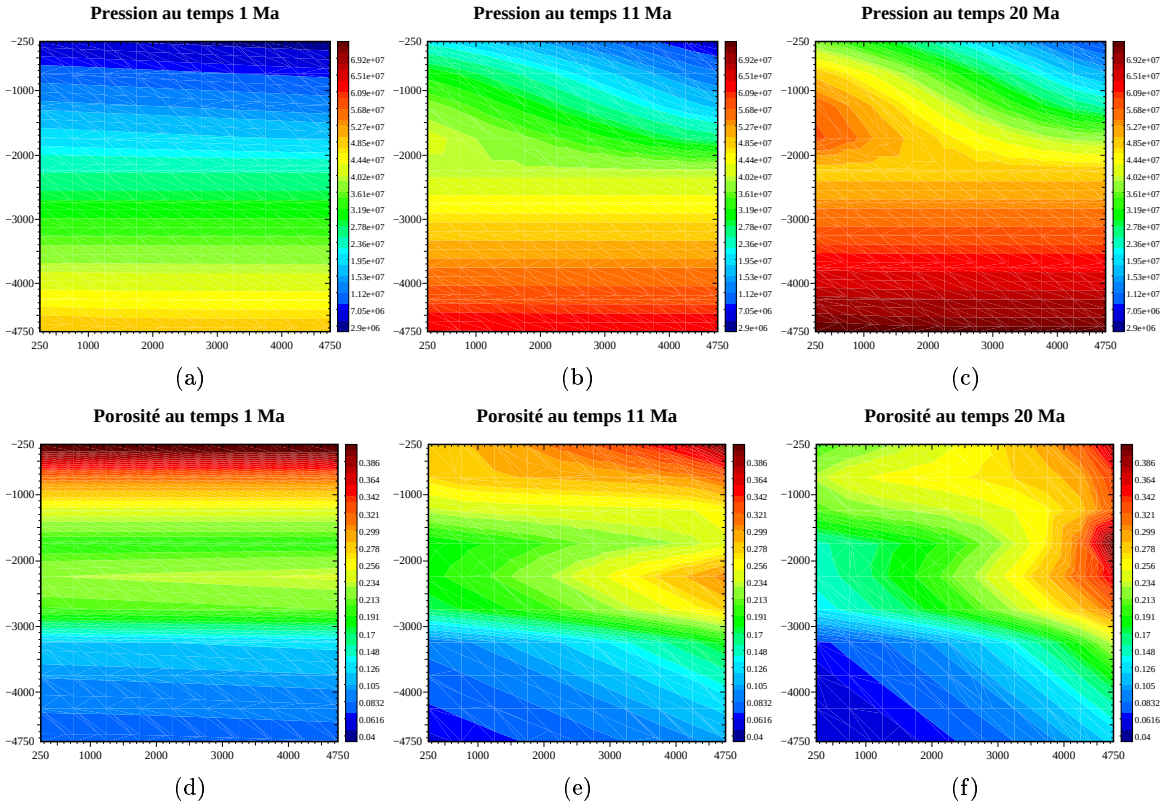


Figure 6.15: Saturations des phases huile et gaz en différents temps pour le modèle prenant en compte une thermodynamique à masses et volume constants. Cas des densités de constituants compressibles et d'une thermodynamique fortement miscible.



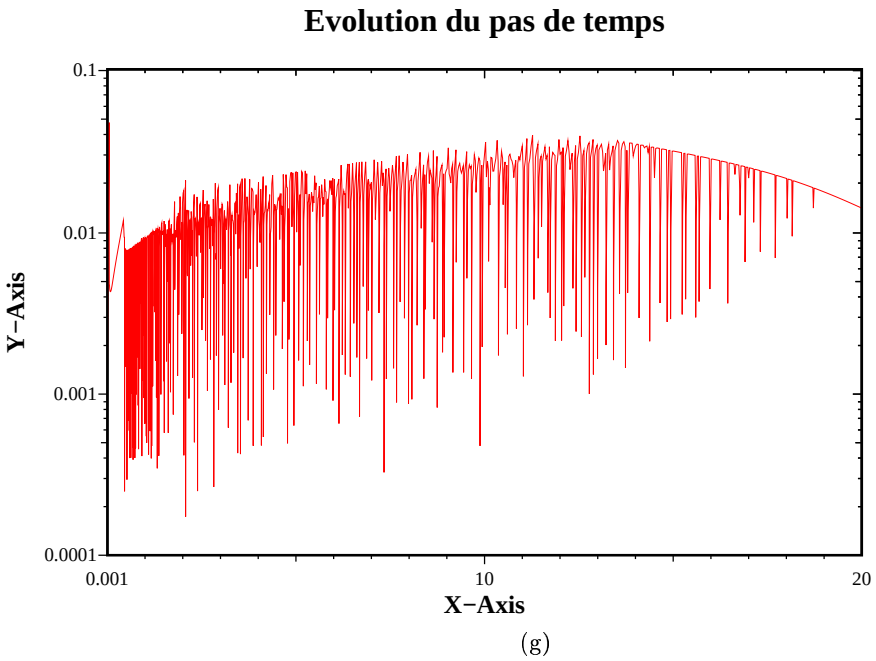


Figure 6.16: Pressions et porosités en différents temps pour le modèle prenant en compte une thermodynamique à masses et pression constantes avec évolution du pas de temps. Cas des densités de constituants compressibles et d'une thermodynamique fortement miscible.

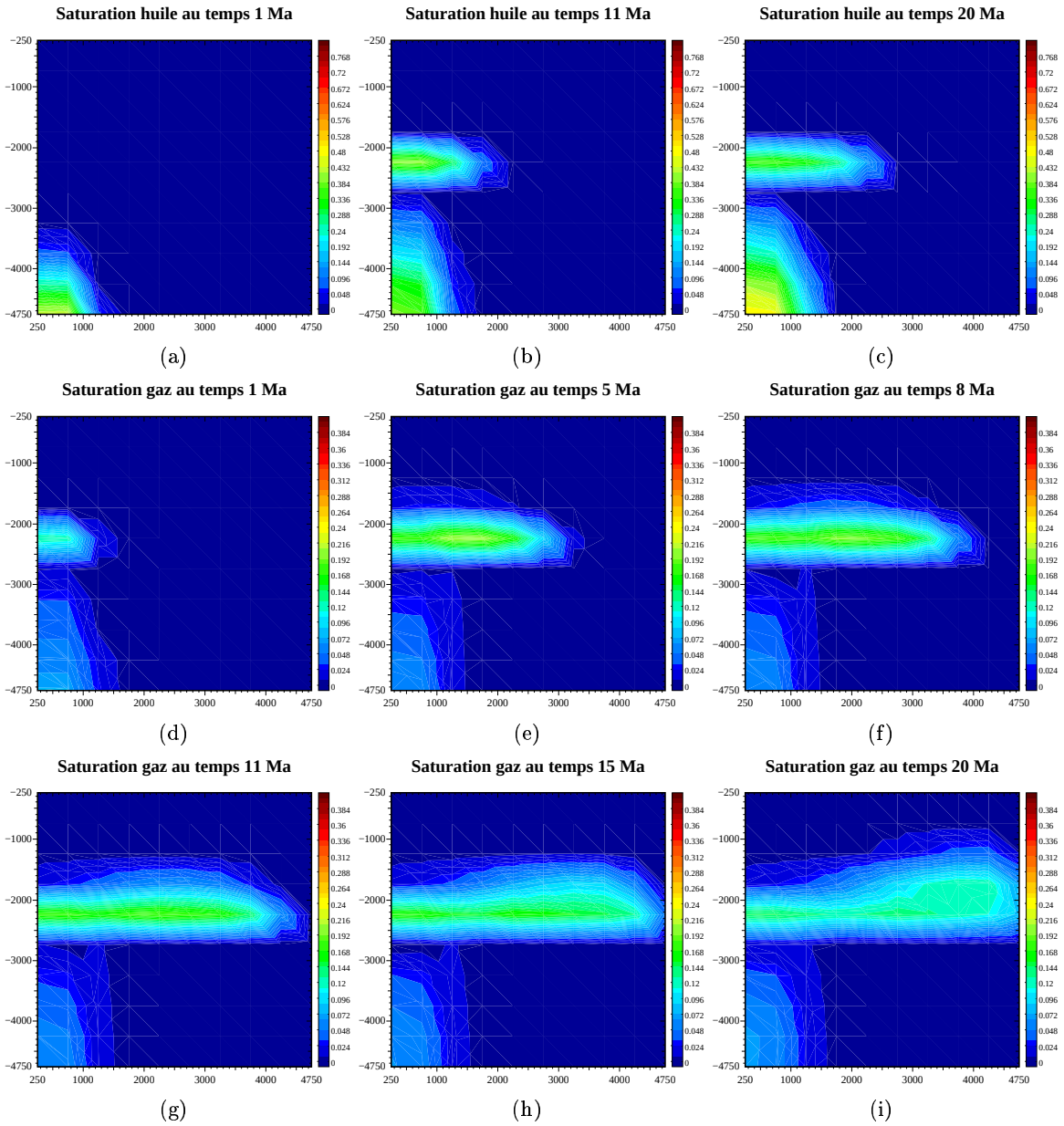


Figure 6.17: Saturations des phases huile et gaz en différents temps pour le modèle prenant en compte une thermodynamique à masses et pression constantes. Cas des densités de constituants compressibles et d'une thermodynamique fortement miscible.

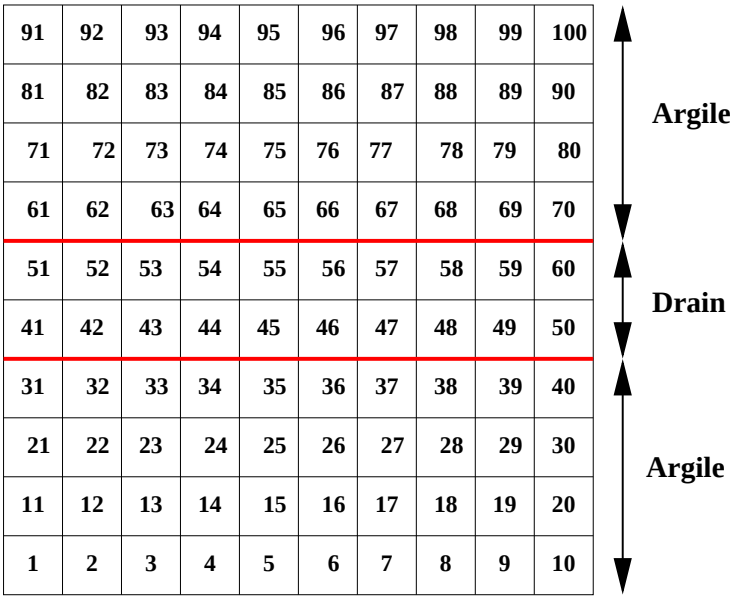
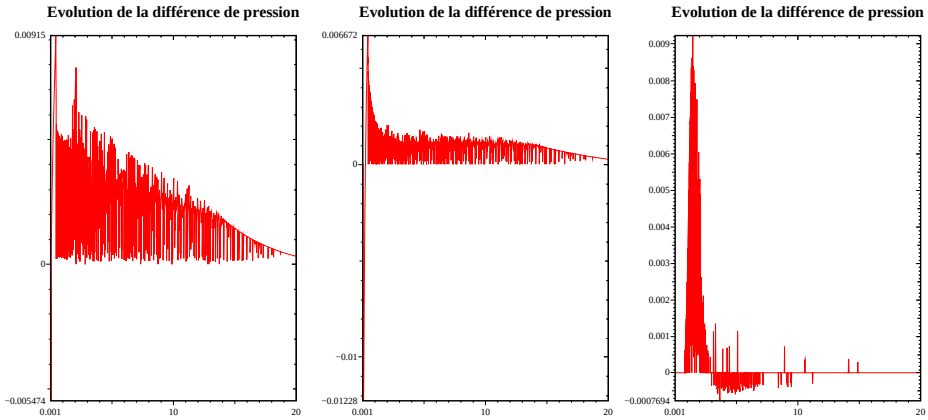


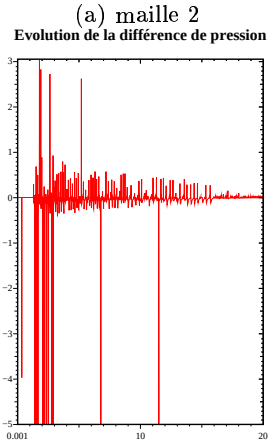
Figure 6.18: numérotation des mailles du domaine.



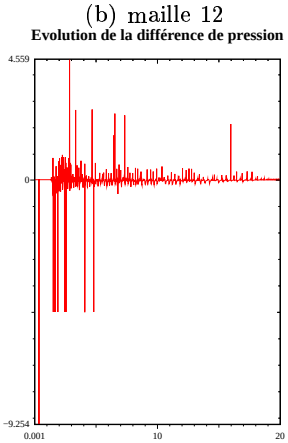
(a) maille 2

(b) maille 12

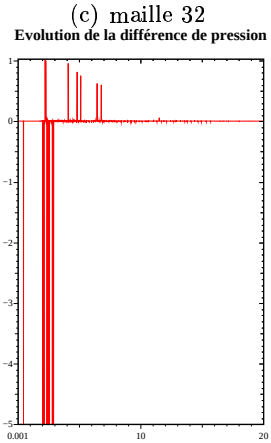
(c) maille 32



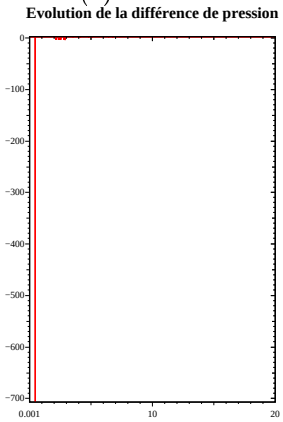
(d) maille 41



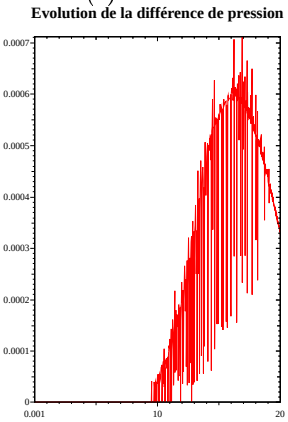
(e) maille 42



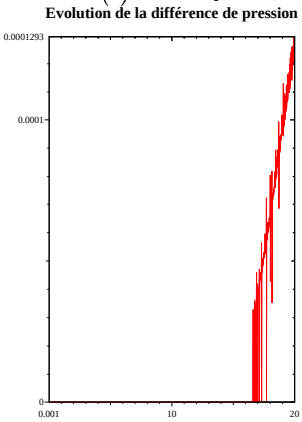
(f) maille 51



(g) maille 52



(h) maille 55



(i) maille 56

Figure 6.19: Evolution de la différence relative entre la pression issue du transport et la pression issue de l'équilibre thermodynamique dans différentes mailles du domaine. La valeur -5 indique que la méthode de Newton de résolution de l'équilibre thermodynamique n'a pas convergé. Simulation sur le modèle ne tenant pas compte du module thermodynamique après le transport.

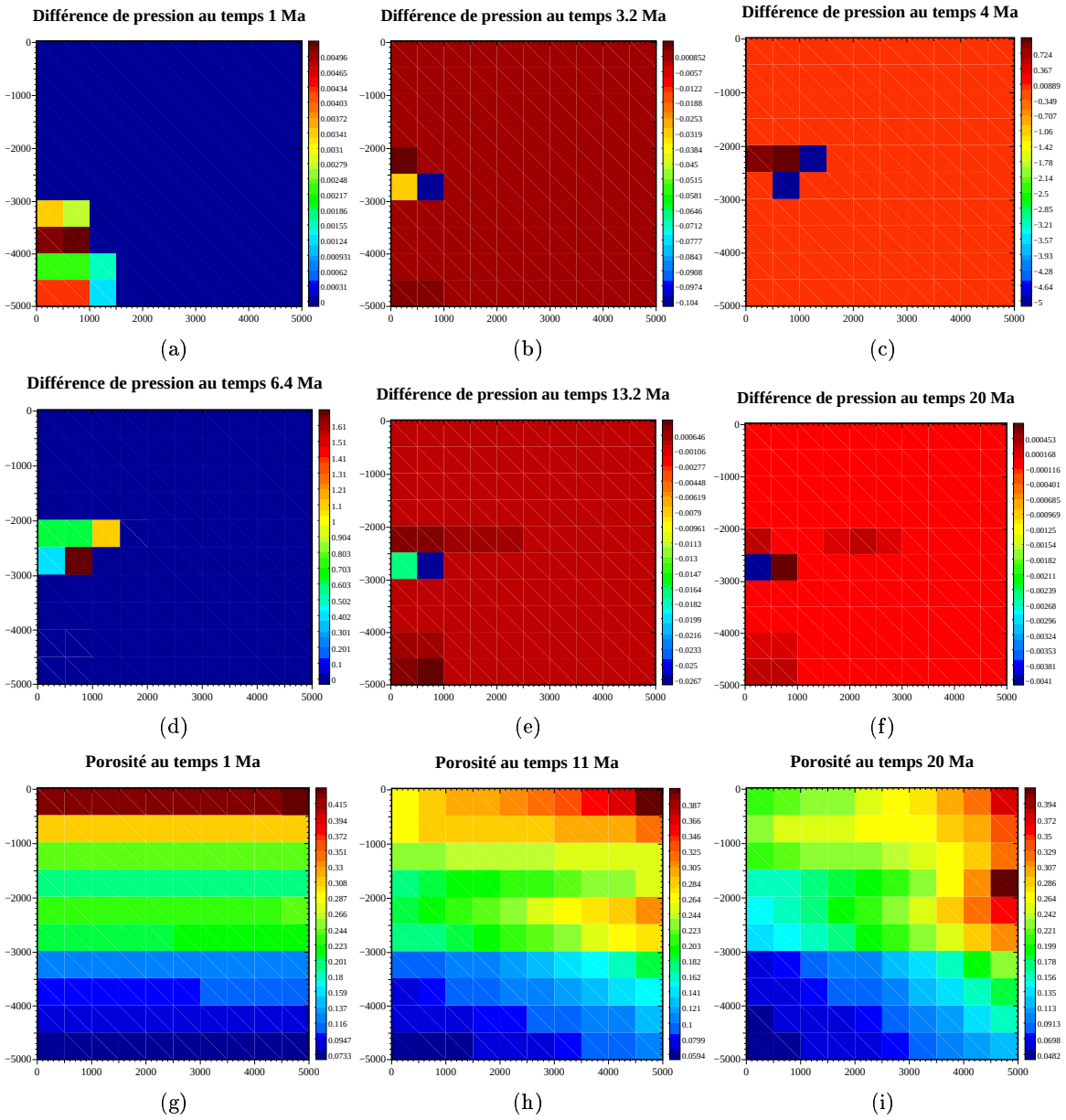
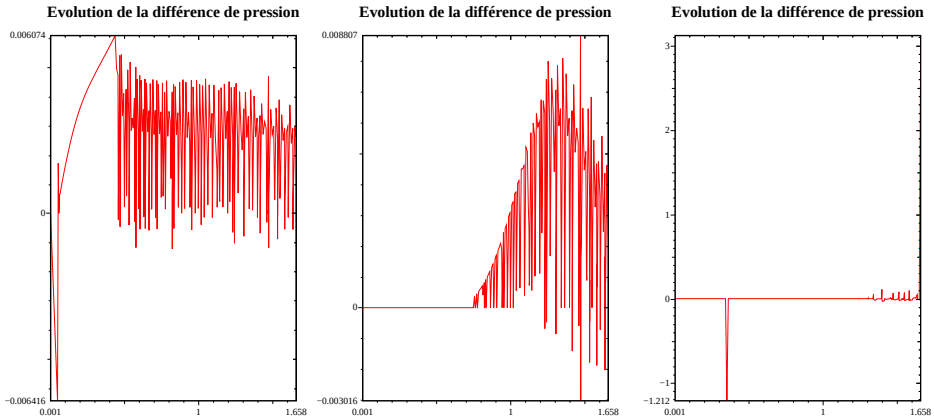
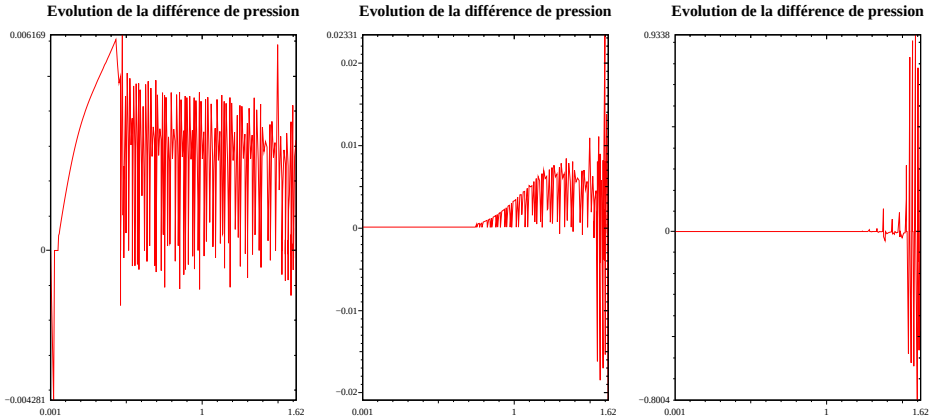


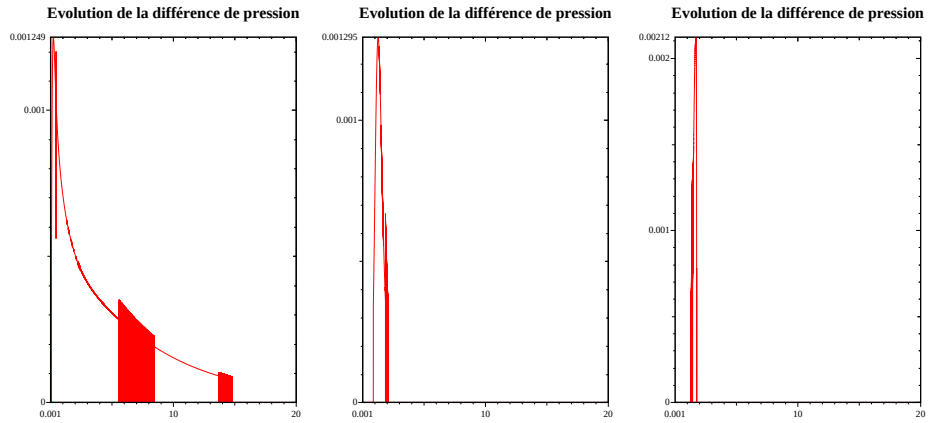
Figure 6.20: Répartition par mailles de la différence relative de pression et de la porosité en différents temps.



(a) Δt maximum 0.2 Ma (b) Δt maximum 0.2 Ma (c) Δt maximum 0.2 Ma



(d) Δt maximum 0.02 Ma (e) Δt maximum 0.02 Ma (f) Δt maximum 0.02 Ma



(g) Δt maximum 0.002 Ma (h) Δt maximum 0.002 Ma (i) Δt maximum 0.002 Ma

Figure 6.21: Evolution de la différence relative entre la pression issue du transport et la pression issue de l'équilibre thermodynamique dans les mailles 1, 31, 41 (dans cet ordre) du domaine. La valeur -5 indique que la méthode de Newton de résolution de l'équilibre thermodynamique n'a pas convergé. Simulation sur le modèle qui tient compte du module thermodynamique après le transport.

Raffinement du maillage et du pas de temps Le but de ces simulations est de comprendre l'apparition des pics de saturation qui apparaissent avec le modèle tenant compte de la thermodynamique à masses et volume constants. Ce modèle pourrait être considéré comme moins diffusif du fait des pics de saturation. Toutefois, il faut remarquer que ces pics apparaissent dans le drain, lieu où, physiquement, le transport est le plus rapide puisque les cœfficients de perméabilité absolue sont les plus élevés. On va démontrer numériquement que ces pics n'ont pas d'existence physique pour la modélisation retenue, mais qu'ils sont générés par des baisses locales de la pression qui constituent des "puits". Ces puits concentrant la matière, le schéma paraît moins diffusif.
On a retenu trois tailles de maillage, 5×5, 7×7 et 10×10, pour les deux modèles, l'un tenant compte et l'autre ne tenant pas compte de la thermodynamique à masses et volume constants. Les résultats présentés respectivement sur les figures 6.22, 6.23 et 6.24 et sur les figures 6.29, 6.30 et 6.31.
On a ensuite repris les mêmes maillages, mais en fixant le pas de temps suffisamment petit pour observer la stabilité des schémas en temps. Les résultats sont présentés sur les figures 6.25, 6.26, 6.27,6.32, 6.33 et 6.34.
On va maintenant détailler les résultats obtenus. On s'attachera tout particulièrement au cas de la saturation de la phase gazeuse car les phénomènes y sont plus marqués que dans le cas de la phase huile.
Lorsque l'on compare les graphiques présentés aux figures 6.22 et 6.29, on observe l'apparition de pics de saturation avec le modèle tenant compte de la thermodynamique au cours du temps. On note que les saturations des deux modèles sont très semblables à la fin du premier million d'années puis divergent par la suite. Ces pics sont localisés dans le drain. Cette localisation est physiquement surprenante puisque, du fait des valeurs élevées des cœfficients de perméabilité absolue et de la porosité, le drain est un endroit où le transport est très rapide. Au vu de ces résultats, le schéma pourrait sembler moins dissipatif, à moins que la modification locale de la pression ne crée des "puits" où la matière vient s'accumuler. On constate que ce phénomène tend à s'estomper lorsque l'on raffine en espace. En effet, la simulation avec un maillage 20×20, dont les résultats sont présentés à la figure 6.28, montre que les pics de saturation obtenus avec le modèle tenant compte de la thermodynamique ont disparu.
On s'est alors intéressé au raffinement en temps des modèles pour les trois maillages initiaux (le temps de calcul pour un maillage 20×20 est rédhibitoire car il pourrait durer un mois). On constate que pour le modèle qui ne tient pas compte du module thermodynamique à masses et volume constants, les résultats sont identiques pour un maillage donné, alors que pour le modèle tenant compte du module thermodynamique à masses et volume constants, les pics de saturations ont disparu pour chacun des maillages. On notera que les résultats entre les deux modèles diffèrent pour le maillage 10×10, avec des saturations plus importantes pour le modèle tenant compte de l'équation de thermodynamique à masses et volume constants que pour le modèle sans ce module thermodynamique. On peut alors se demander si le modèle tenant compte de l'équation thermodynamique à masses et volume constants est stable en temps: le pas de temps utilisé pour la simulation

sur le maillage 10×10 est de $10^{-5}Ma$, alors que le pas de temps utilisé pour obtenir les graphiques 6.22 est de $0.001Ma$. Le fait de raffiner en temps pour le modèle tenant compte de l'équation thermodynamique à masses et volume constants implique une diminution de l'écart entre la pression issue du transport et celle issue de l'équation thermodynamique à masses et volume constants. Ces simulations confirment à nouveau l'hypothèse que les pics de saturation sont générés par une baisse locale de la pression liée au comportement local du module thermodynamique et non par une modélisation physique de ces phénomènes. On a donc, pour le modèle tenant compte du module thermodynamique à masses et volume constants, imposé que la variation entre ces deux grandeurs ne soit pas trop "grande", à savoir une variation relative de 10^{-3} entre les deux pressions. On présente les résultats de la simulation sur la figure 6.35. Cette simulation a été effectuée sur un maillage 10×10. On observe que les saturations sont semblables à celles obtenues avec la simulation du modèle sans le module thermodynamique (*cf.* 6.29): les pics de saturation ont disparu, et la croissance de la valeur des saturations lors du raffinement en temps pour le modèle tenant compte du module thermodynamique s'est atténuée. Cette dernière simulation confirme les résultats et remarques effectuées lors du raffinement en temps et en espace du modèle tenant compte du module thermodynamique à masses et volume constants.

Enfin, on peut énoncer une dernière remarque liée au modèle tenant compte de la thermodynamique à masses et volume constants.

Le temps de calcul requiert plusieurs jours de traitement, alors qu'il se compte en heures, voire en minutes en l'abscence du module thermodynamique. De plus, au vu des résultats liés au raffinement en temps et en espace (convergence du comportement de la solution du modèle tenant compte du module thermodynamique à masses et volume constants vers la solution du modèle n'en tenant pas compte), on peut s'interroger sur la justification des temps de calcul nécessaires à la résolution du modèle tenant compte de l'équation thermodynamique à masses et volume constants.

En conclusion, ces essais numériques montrent que le modèle tenant compte de la thermodynamique à masses et volume constants fait apparaître des pics de saturation de façon artificielle, liés à la détermination locale de la pression par le module thermodynamique. Pour corriger l'approximation en temps effectuée sur les cœfficients de répartition, on se propose d'étudier maintenant une méthode de point fixe.

Résolution des modèles avec une méthode de point fixe On présente les résultats de la simulation du modèle ne tenant pas compte du module thermodynamique à masses et volume constants sur les figures 6.36 et 6.37 et ceux du modèle tenant compte de ce module thermodynamique sur les figures 6.38 et 6.39.

On constate que, graphiquement, les résultats sont semblables. De plus, le comportement des différentes grandeurs physiques obtenues est identique à celui du modèle qui ne tient pas compte du module thermodynamique, résolu sans point fixe. Lorsque l'on compare les densités de la phase gaz entre les deux modèles (figures 6.37 et 6.39), on observe qu'un "trou" s'est formé qui correspond à une maille sans gaz, lors de la simulation du modèle

ne tenant pas compte de la thermodynamique, *a contrario*, aucun "trou" n'est décelable dans les résultats de la simulation tenant compte de ce module. Si l'on se focalise sur la zone dans laquelle se produit ce trou, on constate que c'estla zone de début du drain, zone très pauvre en hydrocarbures. Il est possible que l'état de phase ne soit pas correct, du fait des faibles masses et des fortes pressions. Toutefois, ceci n'influence pas l'écoulement car les quantités concernées sont négligeables (saturations quasi-nulles d'après les graphiques 6.36).
Pour conclure, ces essais numériques, ne permettent pas de statuer sur l'efficacité d'une méthode de point fixe, mais ils confirment le comportement sans pic de saturation et les résultats obtenus antérieurement avec le modèle ne tenant pas compte de l'équation thermodynamique à masses et volume constants. On va donc essayer de mettre en défaut ce modèle en changeant la loi de densité des constituants et les cœfficients de la loi de calcul des fractions massiques. Ces travaux sont présentés dans le dernier paragraphe.

6.3.4 Loi de densité modifiée

Description de la loi et des paramètres de simulation

Dans les paragraphes précédents, la compressibilité des constituants dans chacune des phases évoluait de façon linéaire et infinie en fonction de la pression. On va maintenant limiter cette évolution en tronquant la loi de densité lorsque la pression atteint un certain seuil: passé ce seuil, la densité du constituant devient constante, indépendamment de la phase dans laquelle il se trouve.

Commentaires, remarques et conclusions

On présente les résultats de la simulation du modèle tenant compte du module thermodynamique à masses et volume contants sur les figures 6.40. Les graphiques 6.41 représentent les simulations du modèle ne tenant pas compte du module thermodynamique à masses et volume contants.
Dans un premier temps, il a été nécessaire de lisser la loi de densité telle qu'elle a été exposée au paragraphe précédent, afin de permettre la convergence de la méthode de Newton utilisée pour résoudre l'équation de transport. En effet, lors de la résolution de l'équation en pression, on utilise la dérivée de la loi de densité qui n'est pas continue car on a un saut au niveau de la pression de seuil. Lorsque la pression se rapproche de la pression critique, la méthode de Newton se met à osciller autour de cette pression seuil. Elle ne peut converger du fait du saut de la dérivée, même en diminuant le pas de temps. On a donc interpolé la fonction densité au voisinage du point seuil afin de permettre la convergence de la méthode de Newton en ce point (l'epsilon formant le voisinage est laissé à la discrétion de l'utilisateur, mais il est de l'ordre de 10^{-3} en relatif par rapport aux pressions). Cette difficulté liée au calcul numérique ayant été résolue, les simulations ont été conduites à leur terme.

Lorsque l'on compare les résultats, on observe l'apparition, comme dans les cas précédents, de pics de saturation pour le modèle tenant compte du module thermodynamique à masses et volume constants. Toutefois, on constate que ces pics tendent à disparaître en fin de simulation.

6.4 Conclusion

Lors du premier paragraphe, on a présenté une première expression de l'équation à résoudre. Cette équation est non vérifiée si l'on ne met pas à jour les cœfficients de répartition et est automatiquement vérifiée dès qu'ils sont mis à jour. On a donc modifié cette loi pour contourner le problème. Cette seconde expression est identique à l'équation du volume poreux dans le cas "Black-Oil" que l'on considère. Lors des essais numériques, le modèle tenant compte de la thermodynamique à masses et volume constants fait apparaître des pics de saturation dans le drain qui disparaissent lorsque l'on raffine en temps et en espace, lorsque l'on limite les variations de la pression entre celle issue du transport et celle issue de cette étape de correction et lorsqu'on utilise un point fixe. On en conclut donc que ces pics ne sont pas des phénomènes physiques et sont liés à cette étape de correction. L'idée sous-jacente de cette étape thermodynamique est de "simuler" une étape de point fixe afin d'impliciter un peu plus les cœfficients de thermodynamique à moindre coût sans modifier le volume poreux et les masses. Ce dernier aspect est peut-être une des raisons pour lesquelles cette étape de thermodynamique à masses et volume constants n'est pas aussi performante par rapport à nos attentes. De plus, devant le coût de calcul prohibitif généré par cette méthode, on n'a pas poussé plus loin les investigations et l'on s'est orienté vers une autre voie, celle du pas de temps adaptatif. Ce dernier point fait l'objet du chapitre suivant.

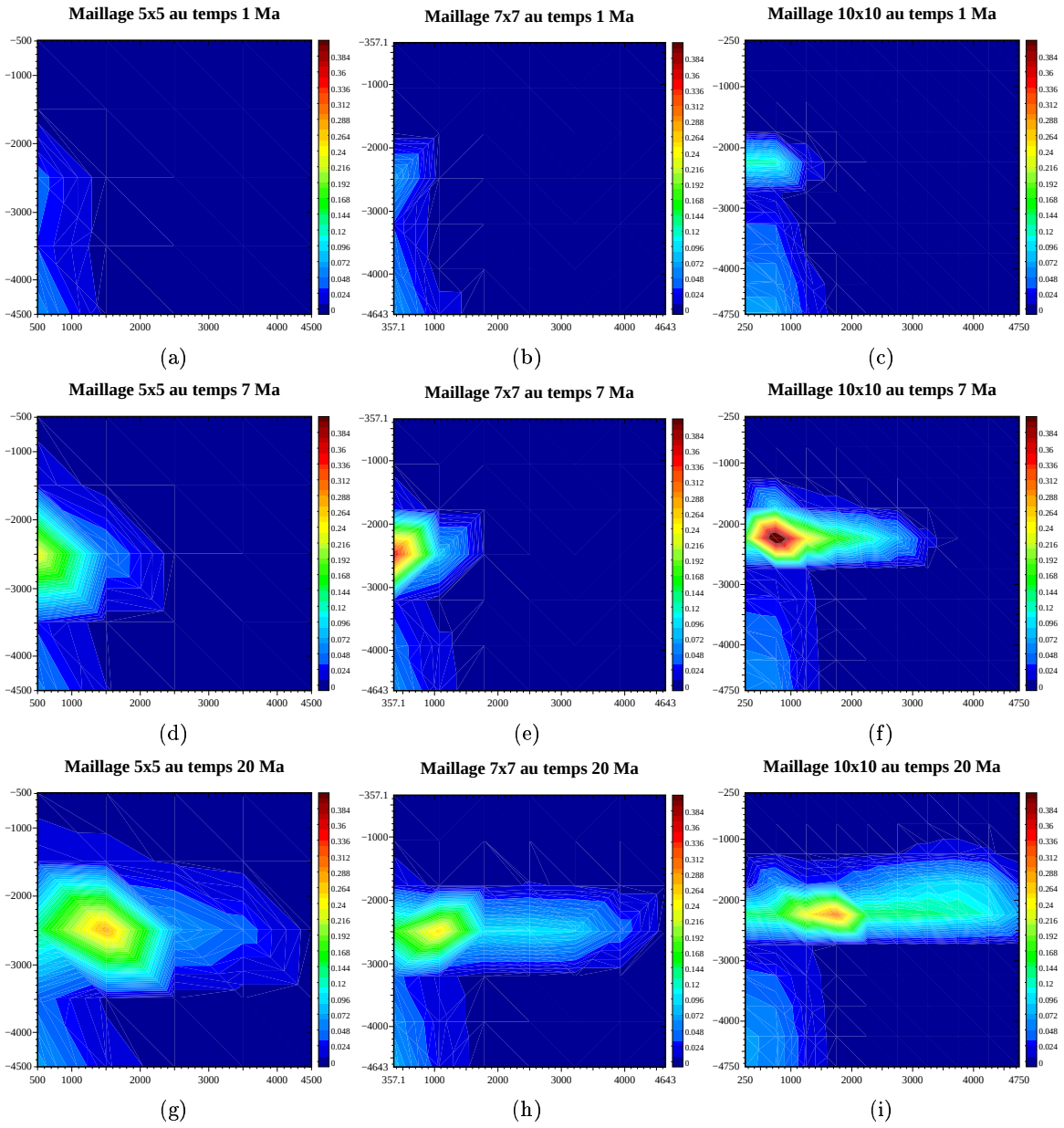


Figure 6.22: Saturations de la phase gaz pour différentes tailles de maillage pour le modèle tenant compte de la thermodynamique après le transport.

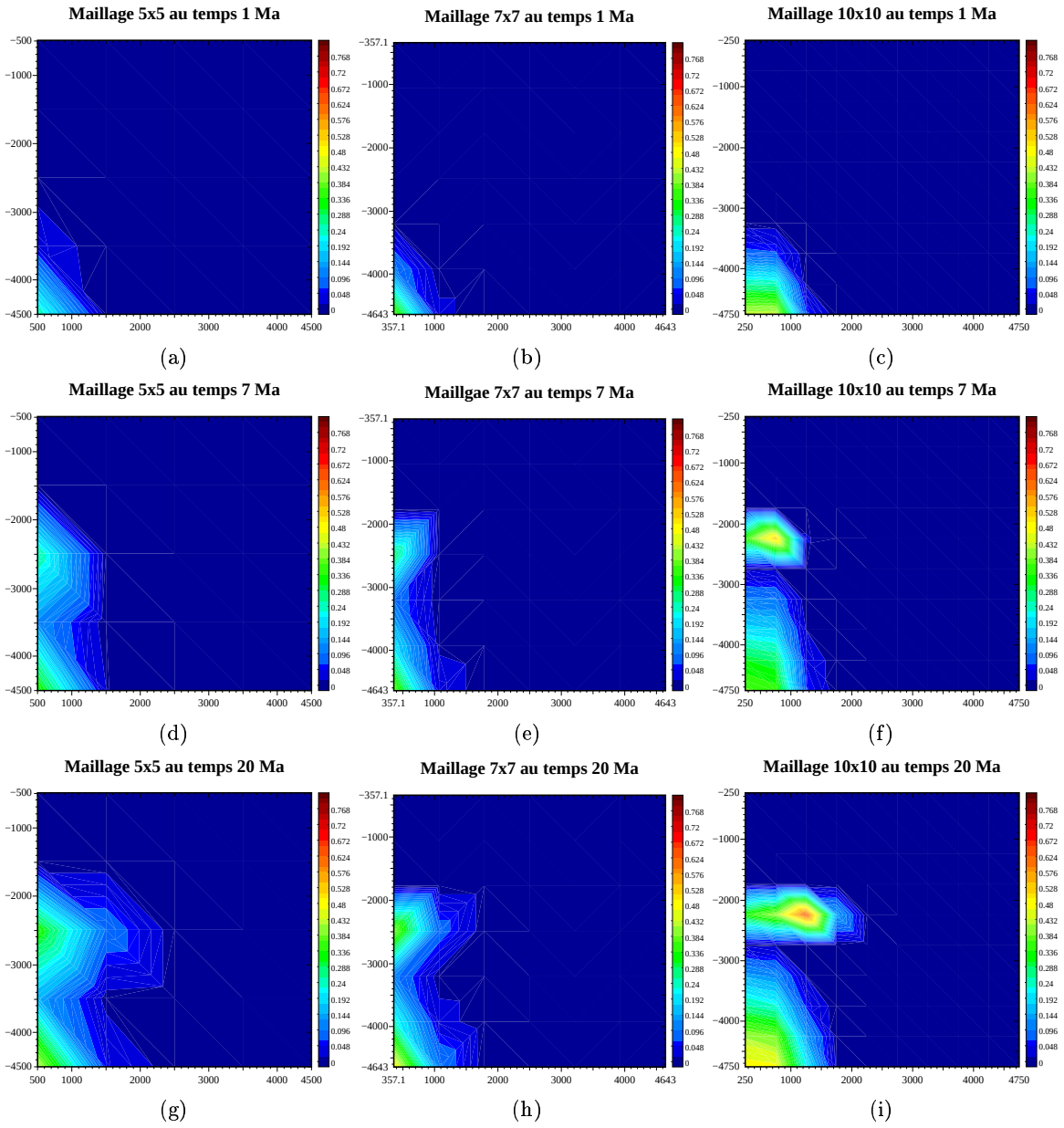


Figure 6.23: Saturations de la phase huile pour différentes tailles de maillage pour le modèle tenant compte de la thermodynamique après le transport.

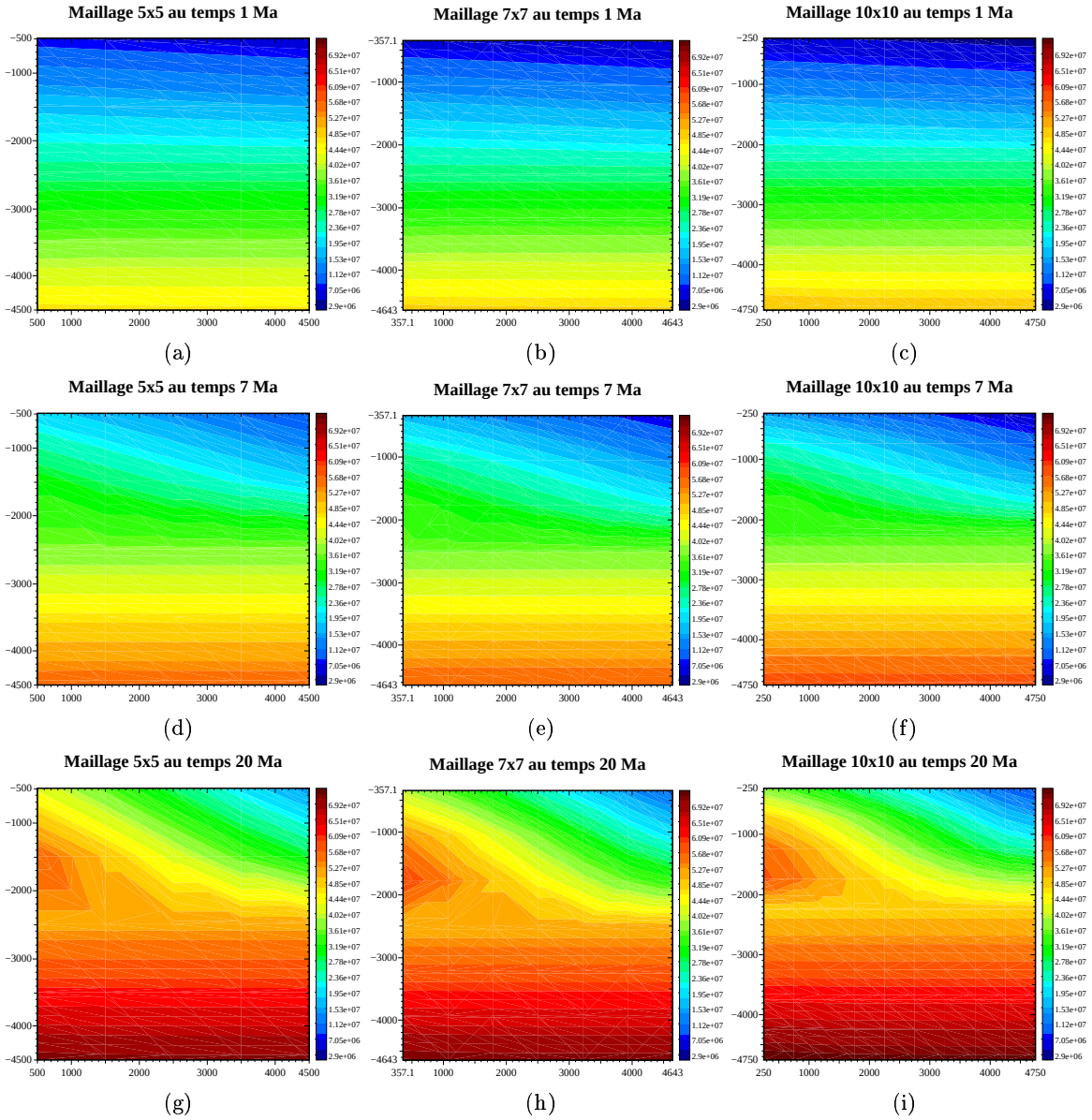


Figure 6.24: Pressions pour différentes tailles de maillage pour le modèle tenant compte de la thermodynamique après le transport.

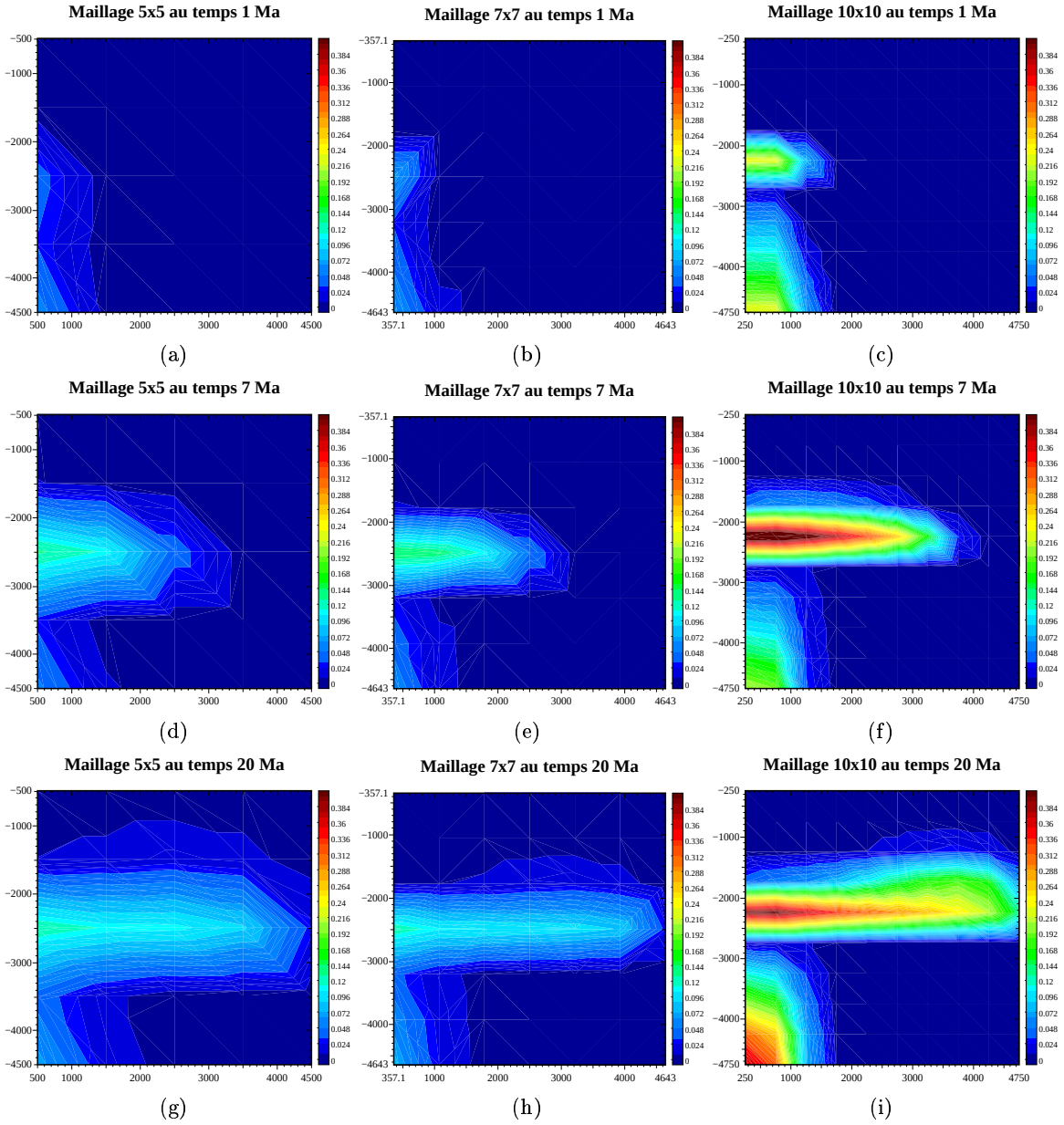


Figure 6.25: Saturations de la phase gaz pour différentes tailles de maillage et un raffinement en temps, pour le modèle tenant compte de la thermodynamique après le transport.

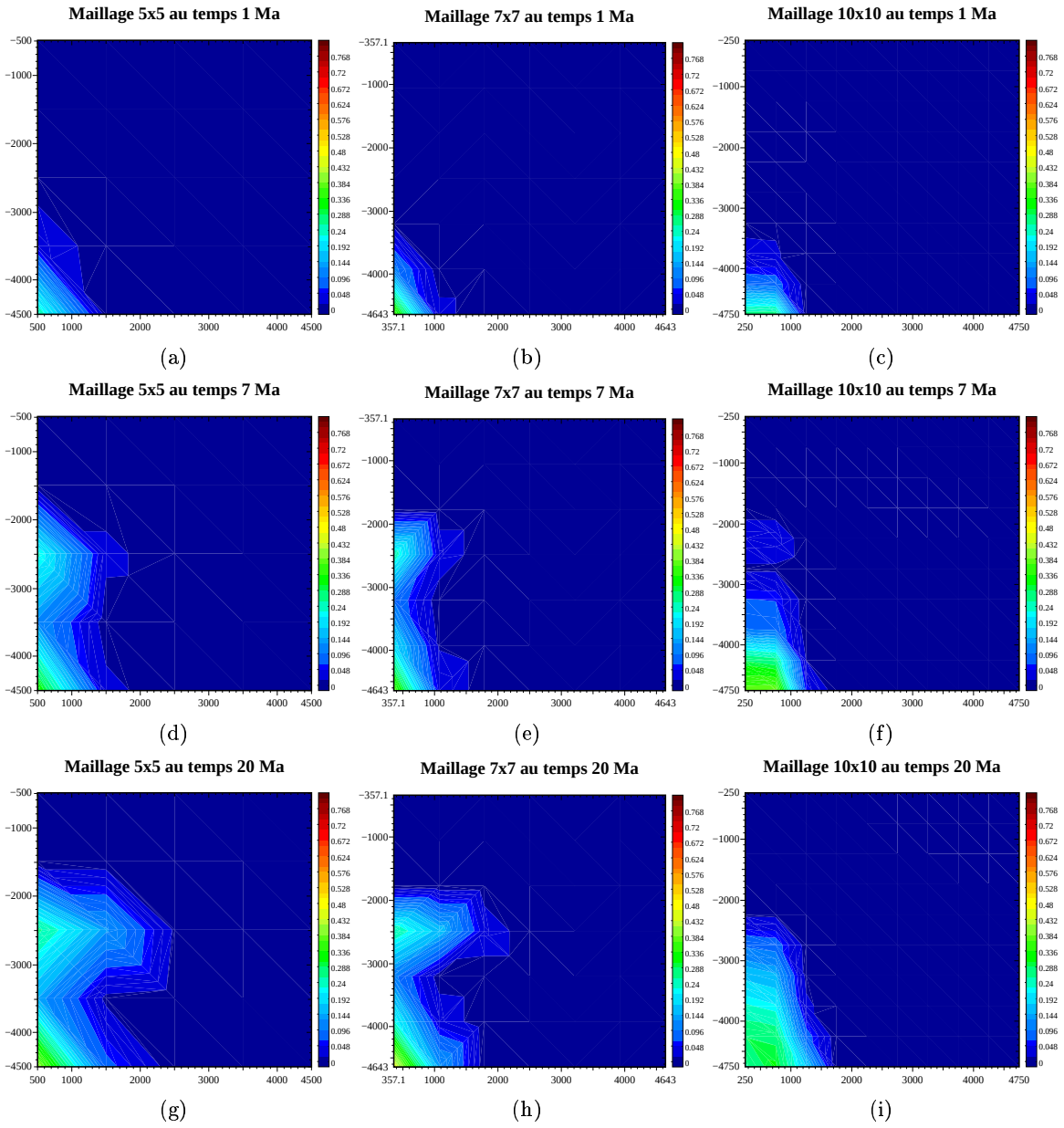


Figure 6.26: Saturations de la phase huile pour différentes tailles de maillage et un raffinement en temps, pour le modèle tenant compte de la thermodynamique après le transport.

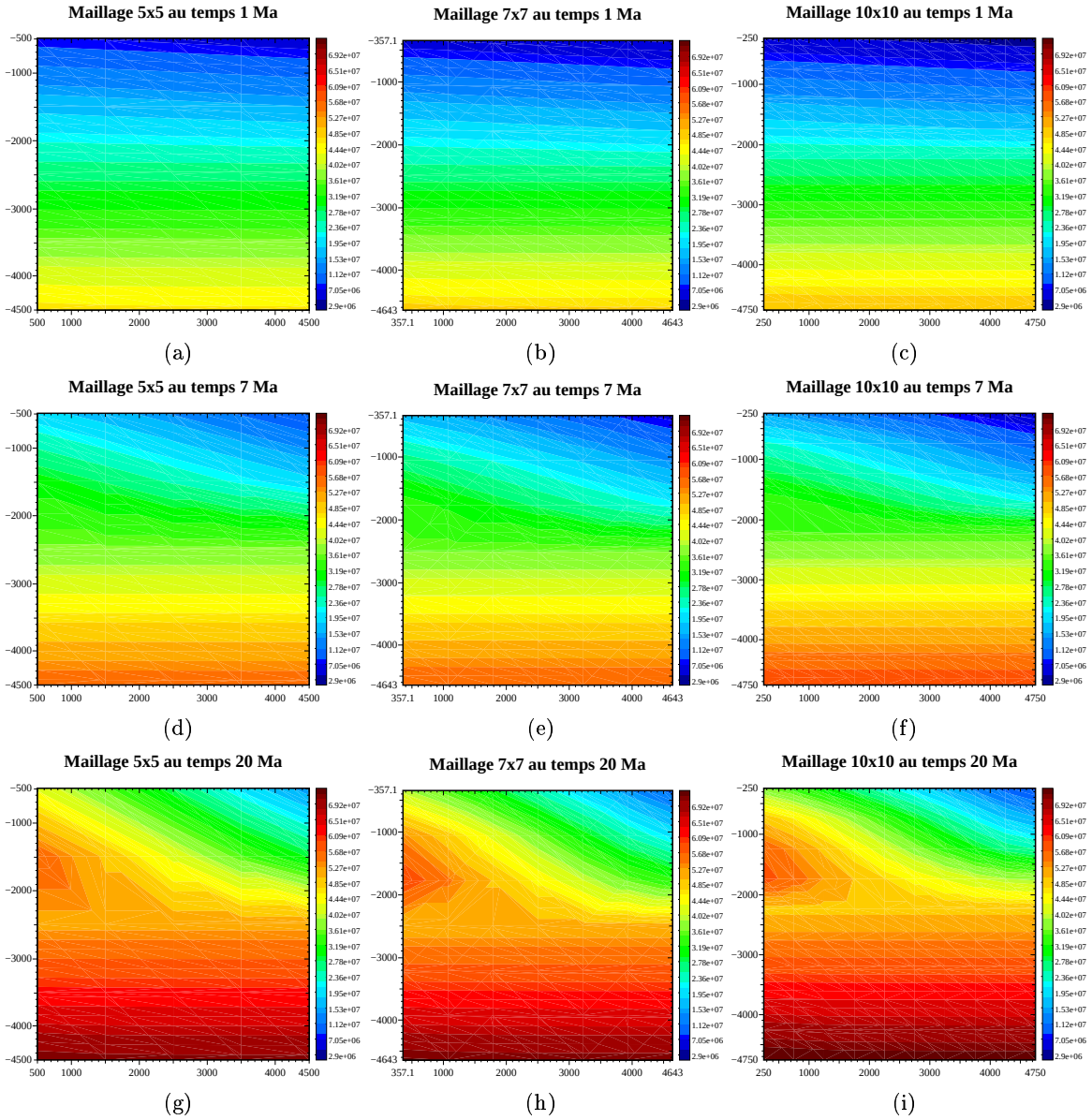


Figure 6.27: Pressions pour différentes tailles de maillage et un raffinement en temps, pour le modèle tenant compte de la thermodynamique après le transport.

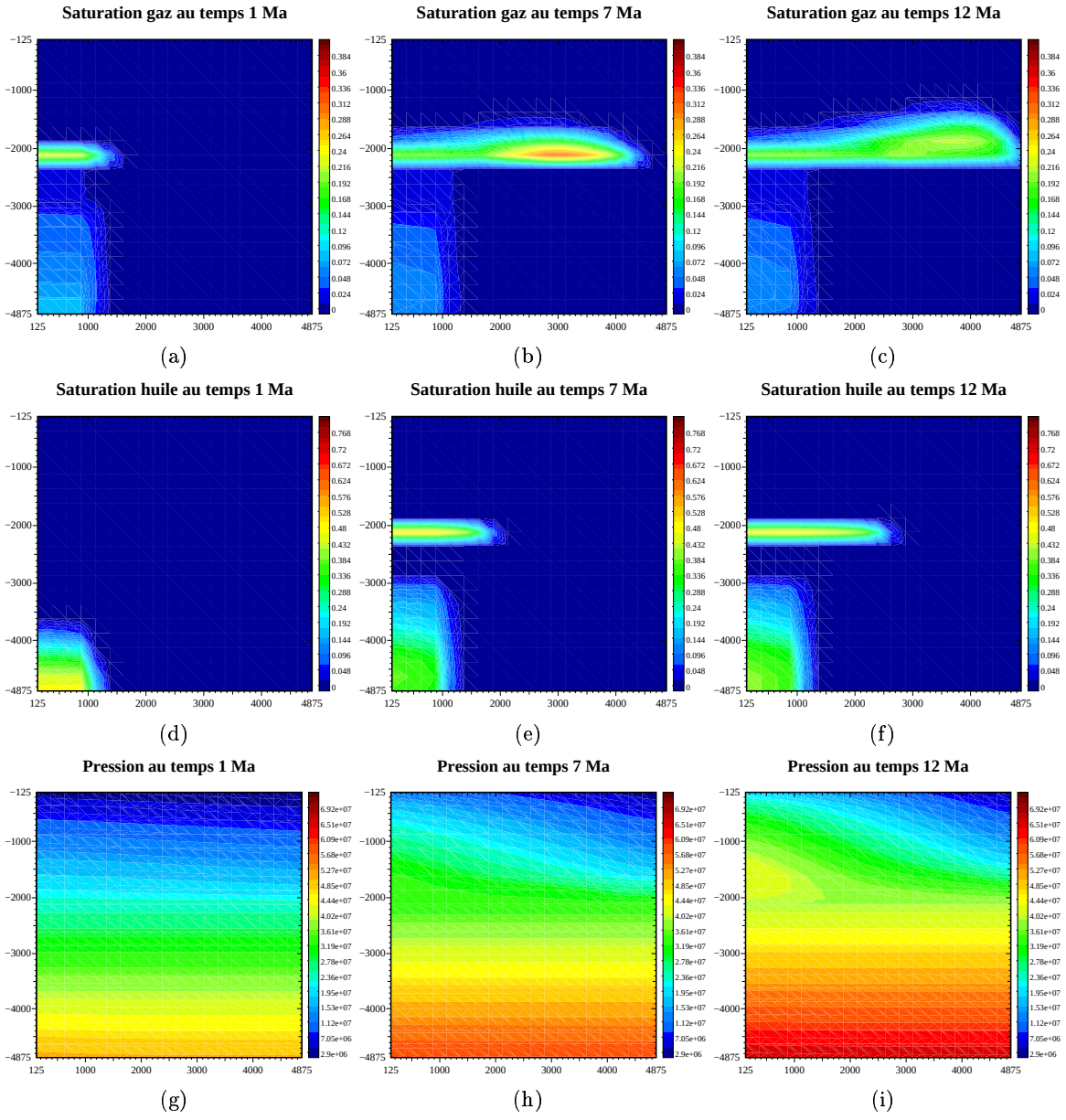


Figure 6.28: Pressions, saturations de la phase huile et gaz sur un maillage 20×20 pour le modèle tenant compte de la thermodynamique à masses et volume constants.

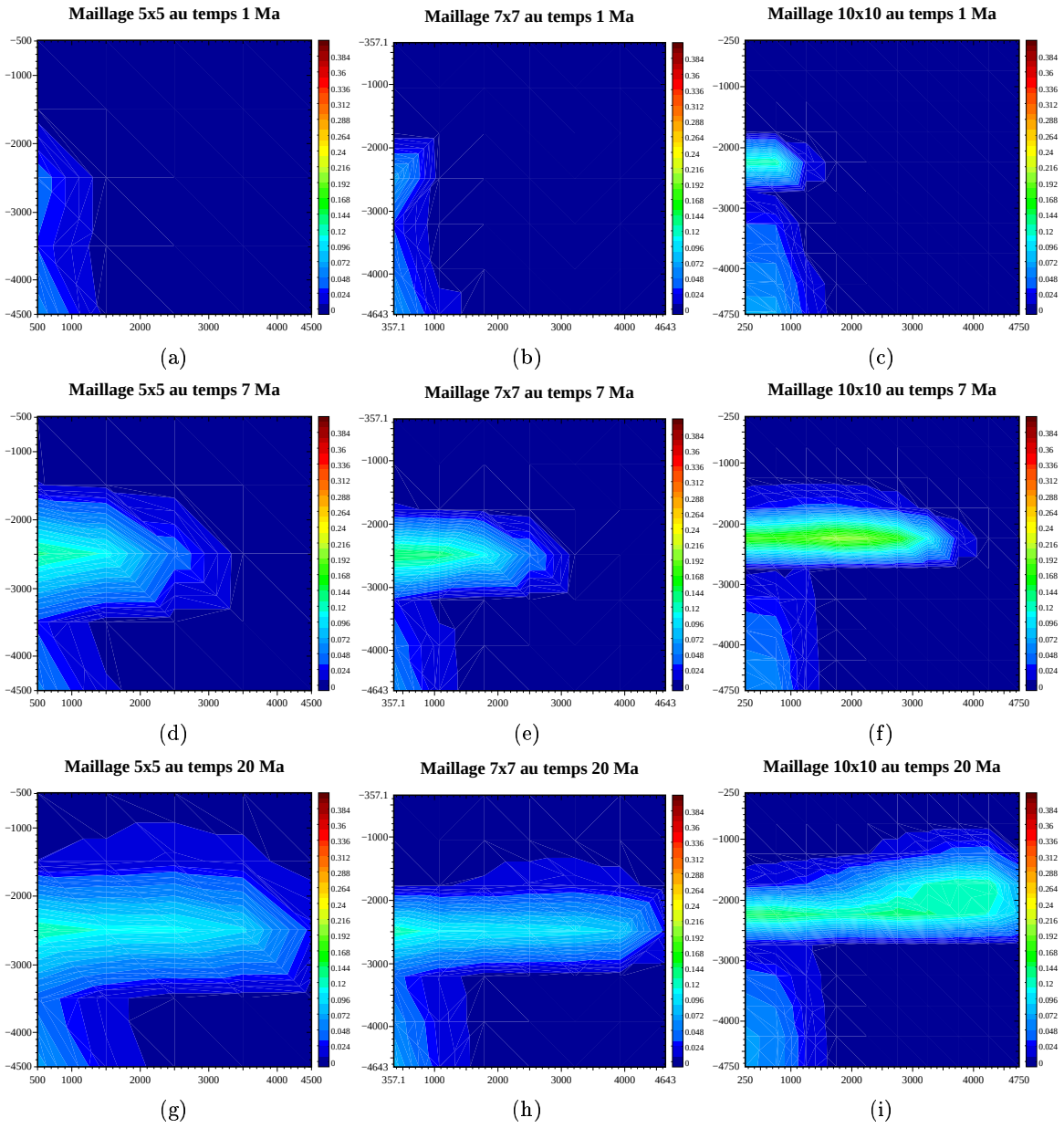


Figure 6.29: Saturations de la phase gaz pour différentes tailles de maillage pour le modèle ne tenant pas compte de la thermodynamique après le transport.

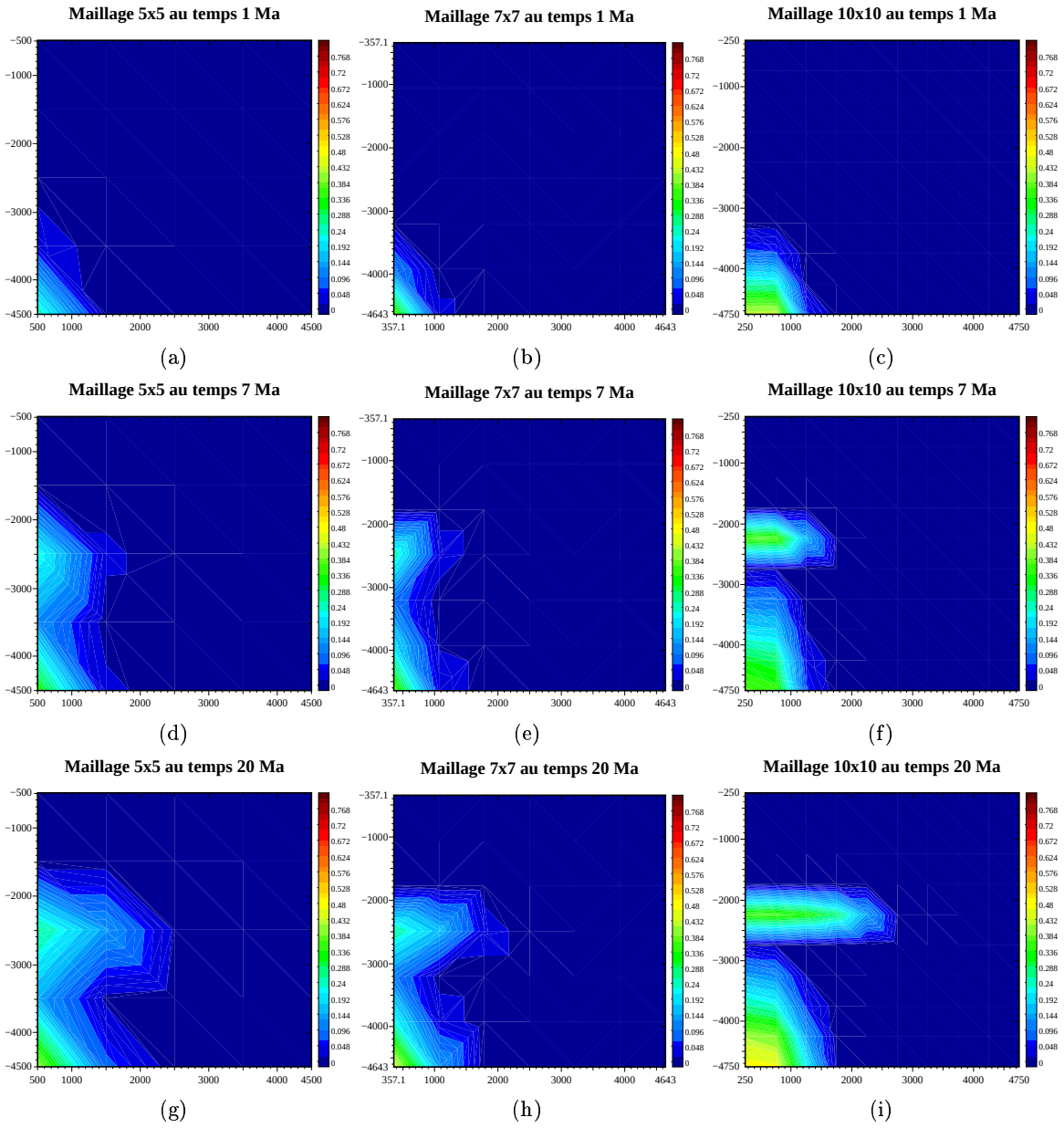


Figure 6.30: Saturations de la phase huile pour différentes tailles de maillage pour le modèle ne tenant pas compte de la thermodynamique après le transport.

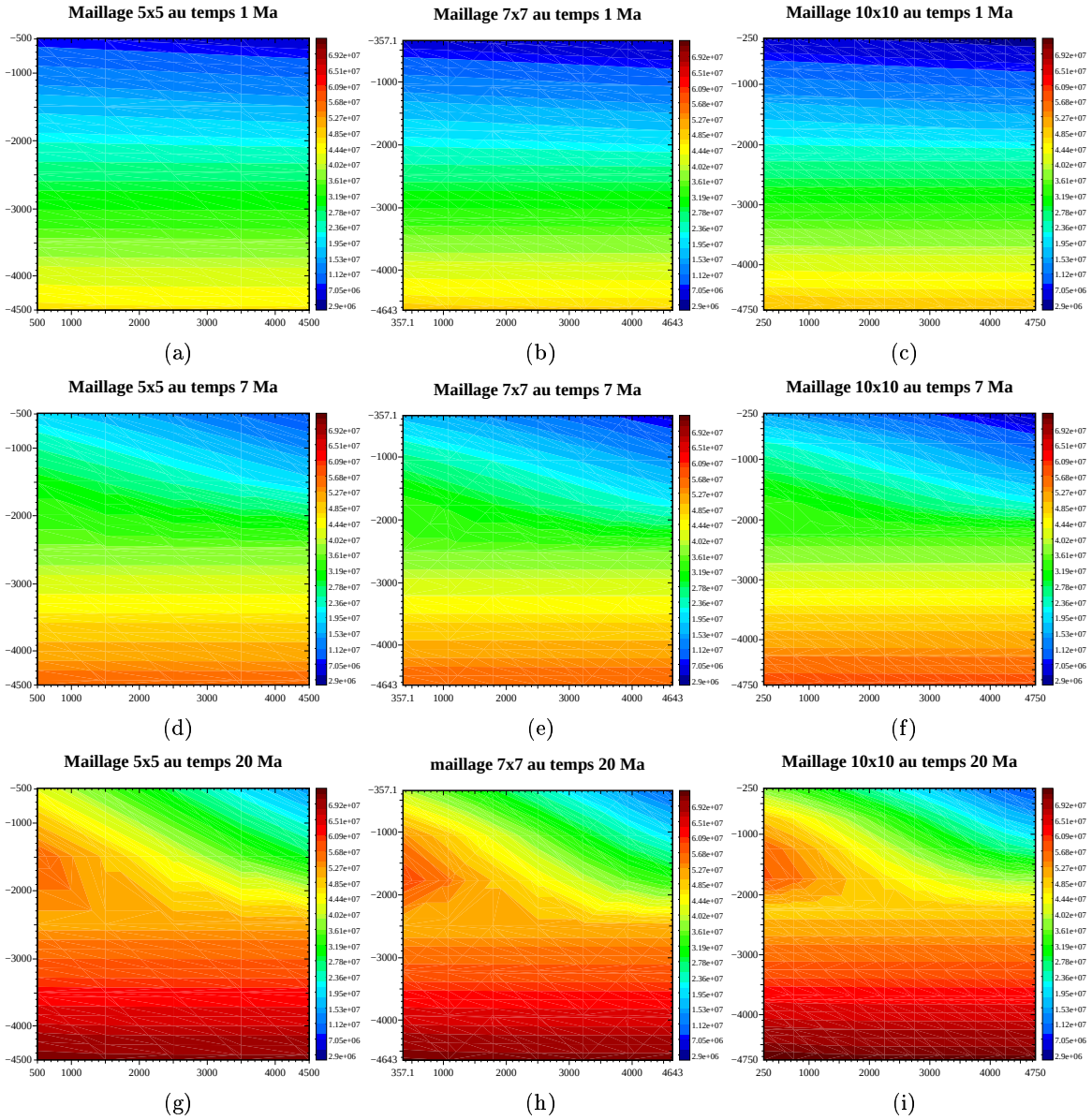


Figure 6.31: Pressions pour différentes tailles de maillage pour le modèle ne tenant pas compte de la thermodynamique après le transport.

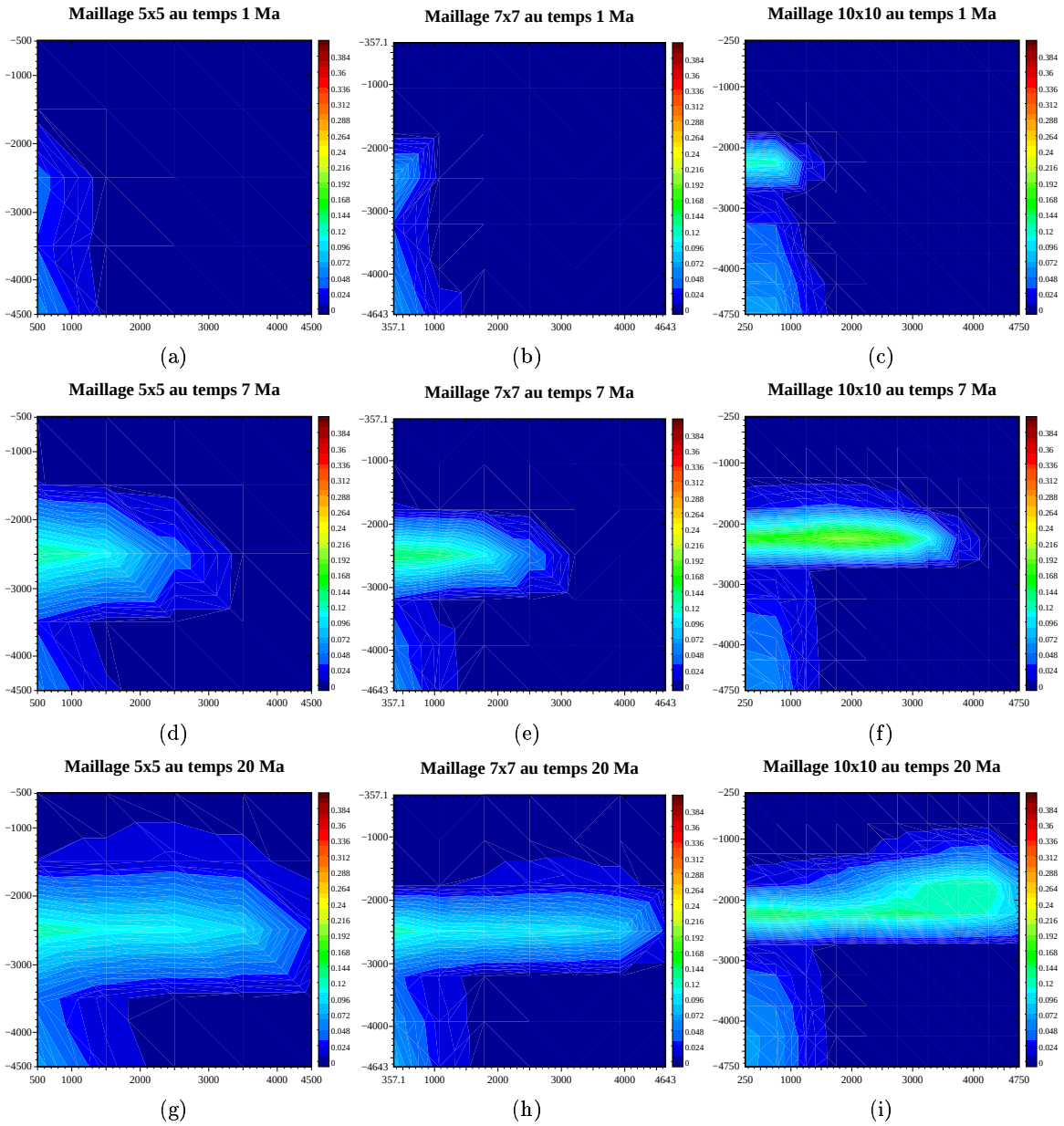


Figure 6.32: Saturations de la phase gaz pour différentes tailles de maillage et un raffinement en temps pour le modèle ne tenant pas compte de la thermodynamique après le transport.

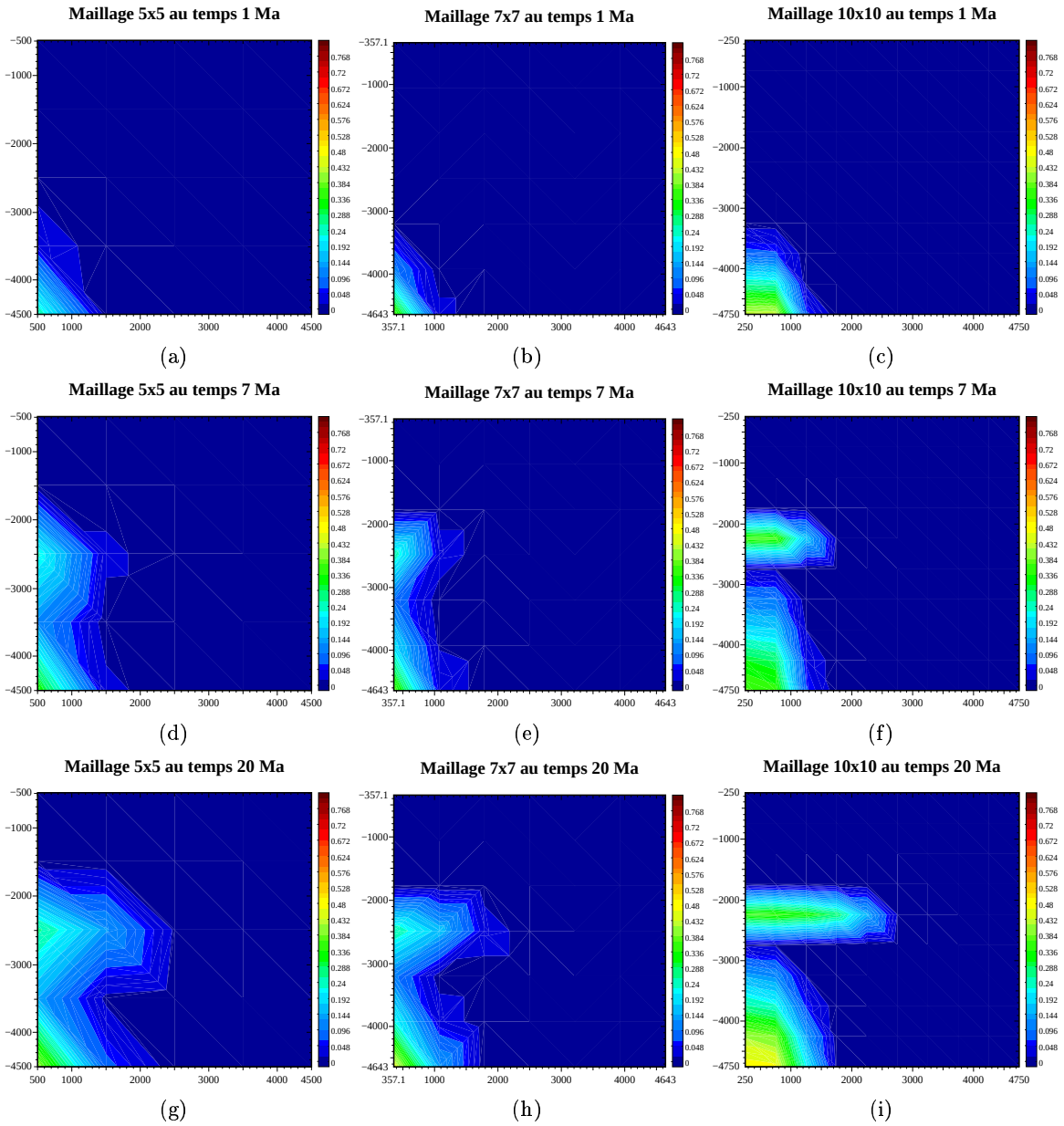


Figure 6.33: Saturations de la phase huile pour différentes tailles de maillage et un raffinement en temps pour le modèle ne tenant pas compte de la thermodynamique après le transport.

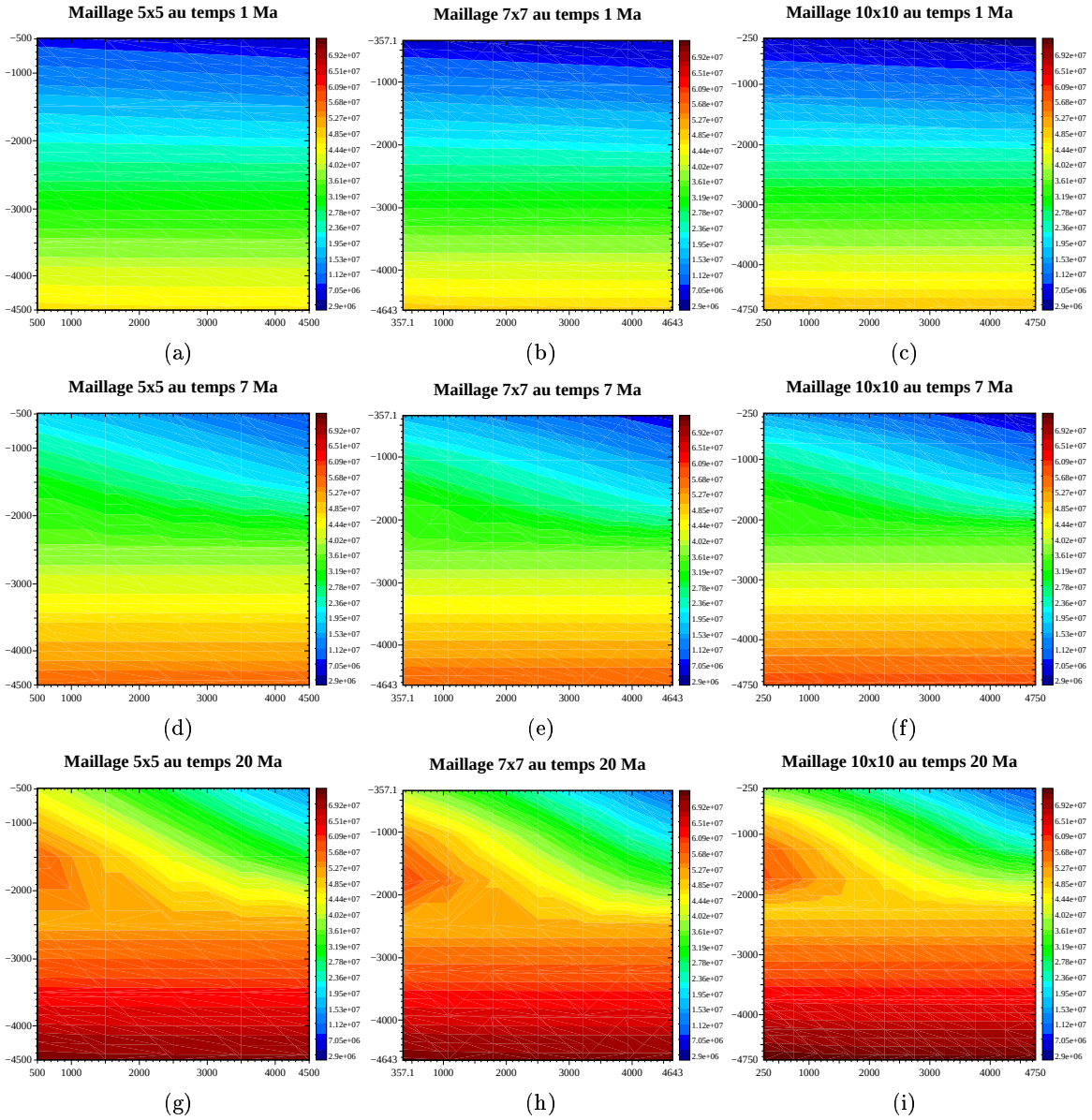


Figure 6.34: Pressions pour différentes tailles de maillage et un raffinement en temps pour le modèle ne tenant pas compte e la thermodynamique après le transport.

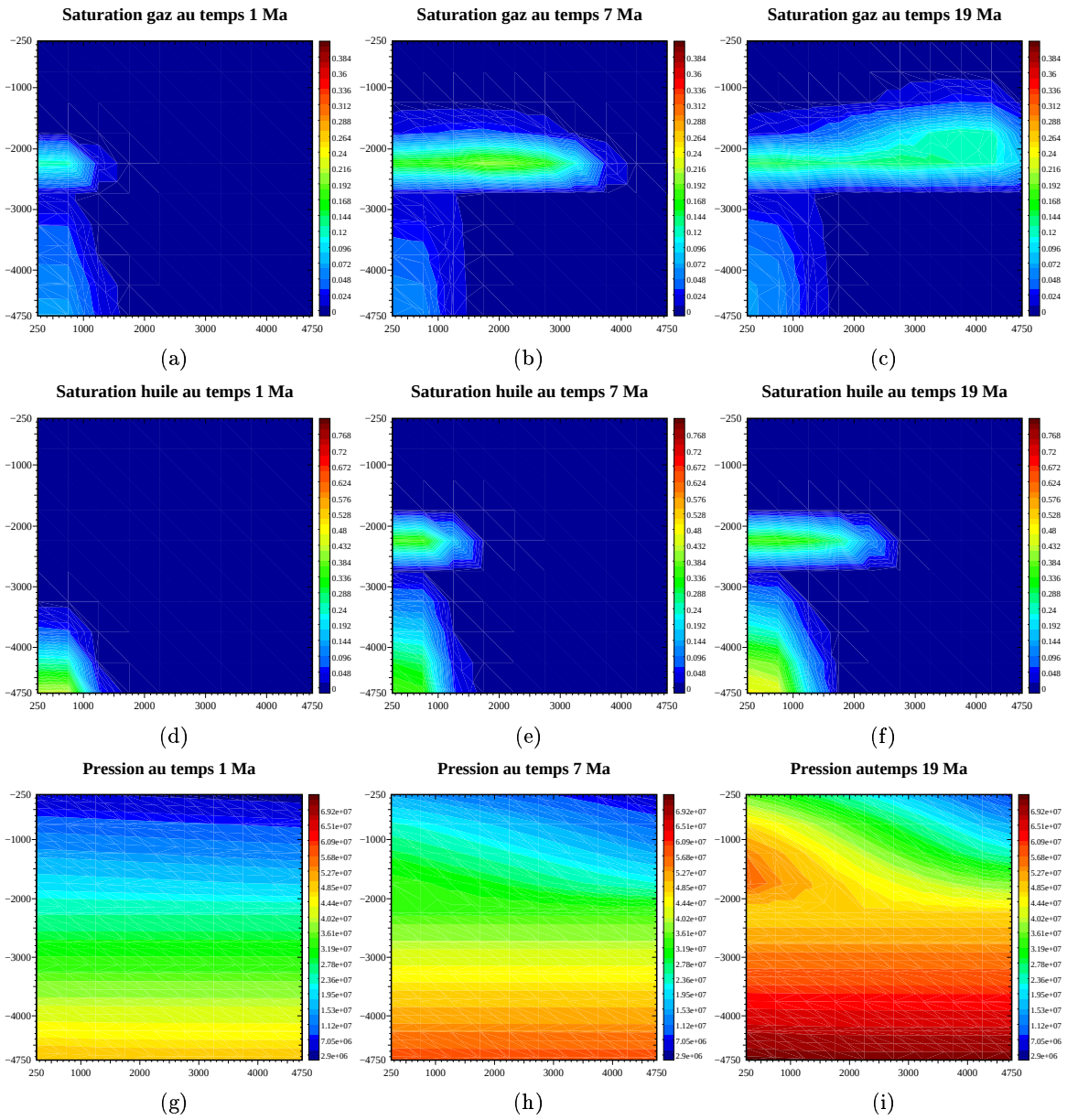


Figure 6.35: Pression, saturations de l'huile et du gaz sur un maillage 10x10 avec un critère de contrôle sur la différence entre la pression issue du transport et celle issue du module thermodynamique .

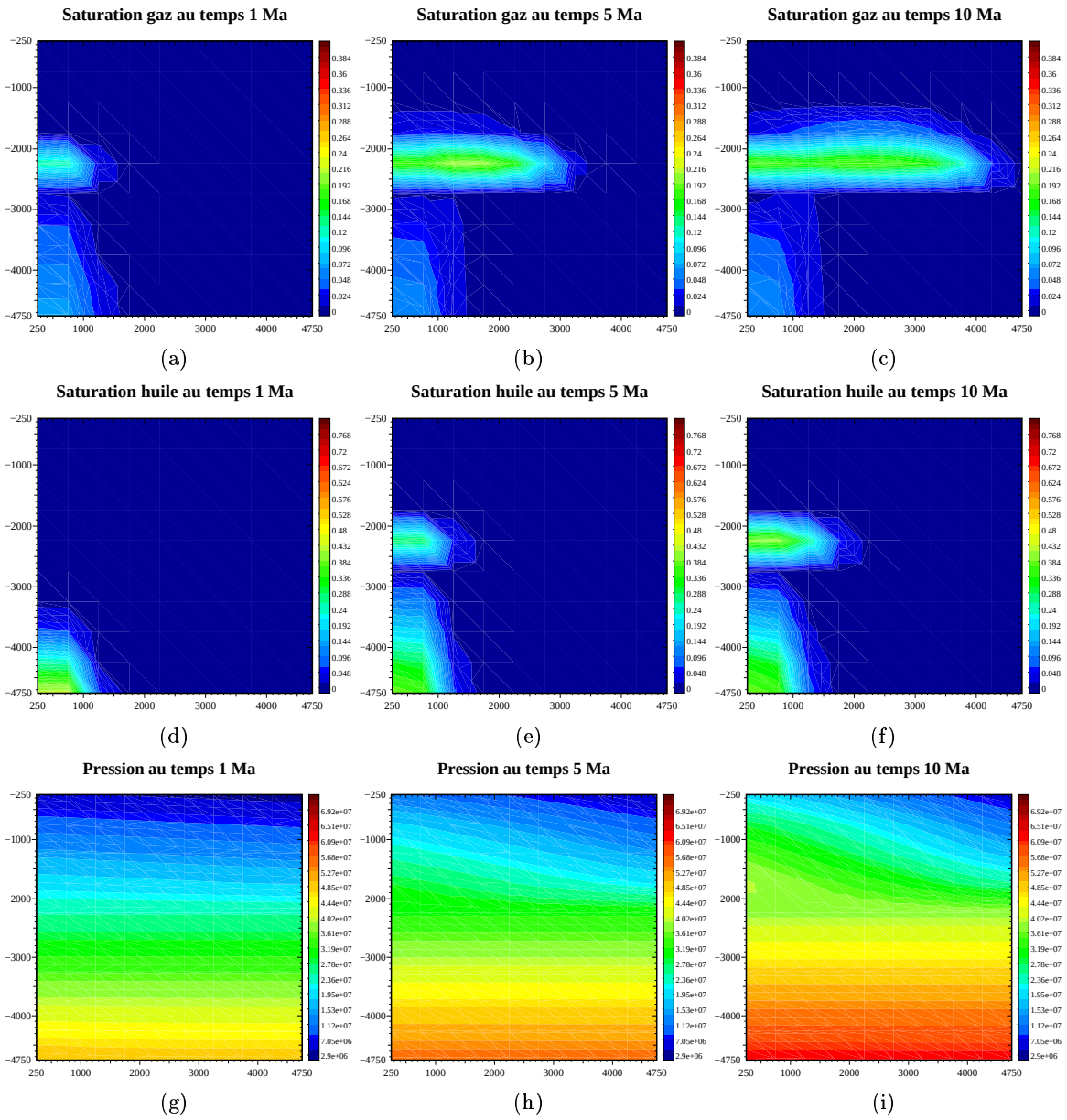


Figure 6.36: Pression, saturations de la phase huile et de la phase gaz pour le modèle ne tenant pas compte du module thermodynamique à masses et volume constants. Résolution sur un maillage 10×10 avec une méthode de point fixe.

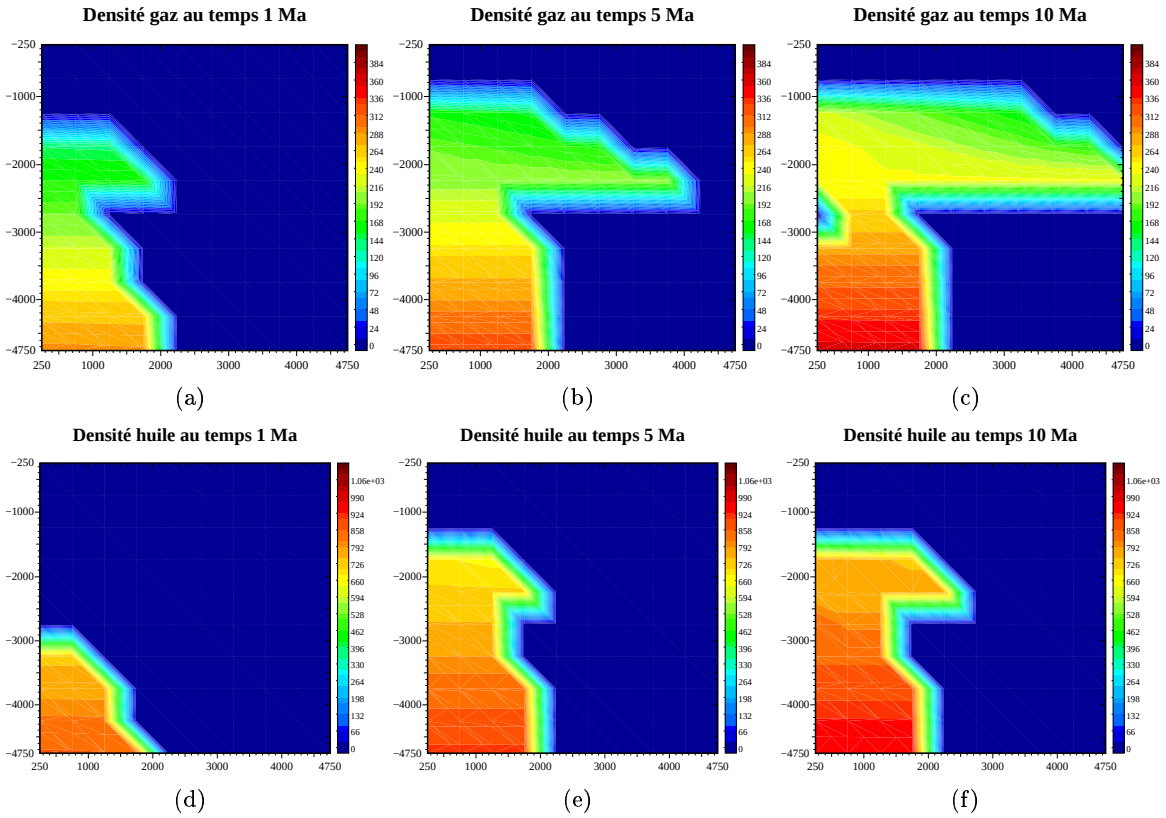


Figure 6.37: Densités de la phase huile et de la phase gaz pour le modèle ne tenant pas compte du module thermodynamique à masses et volume constants. Résolution sur un maillage 10×10 avec une méthode de point fixe.

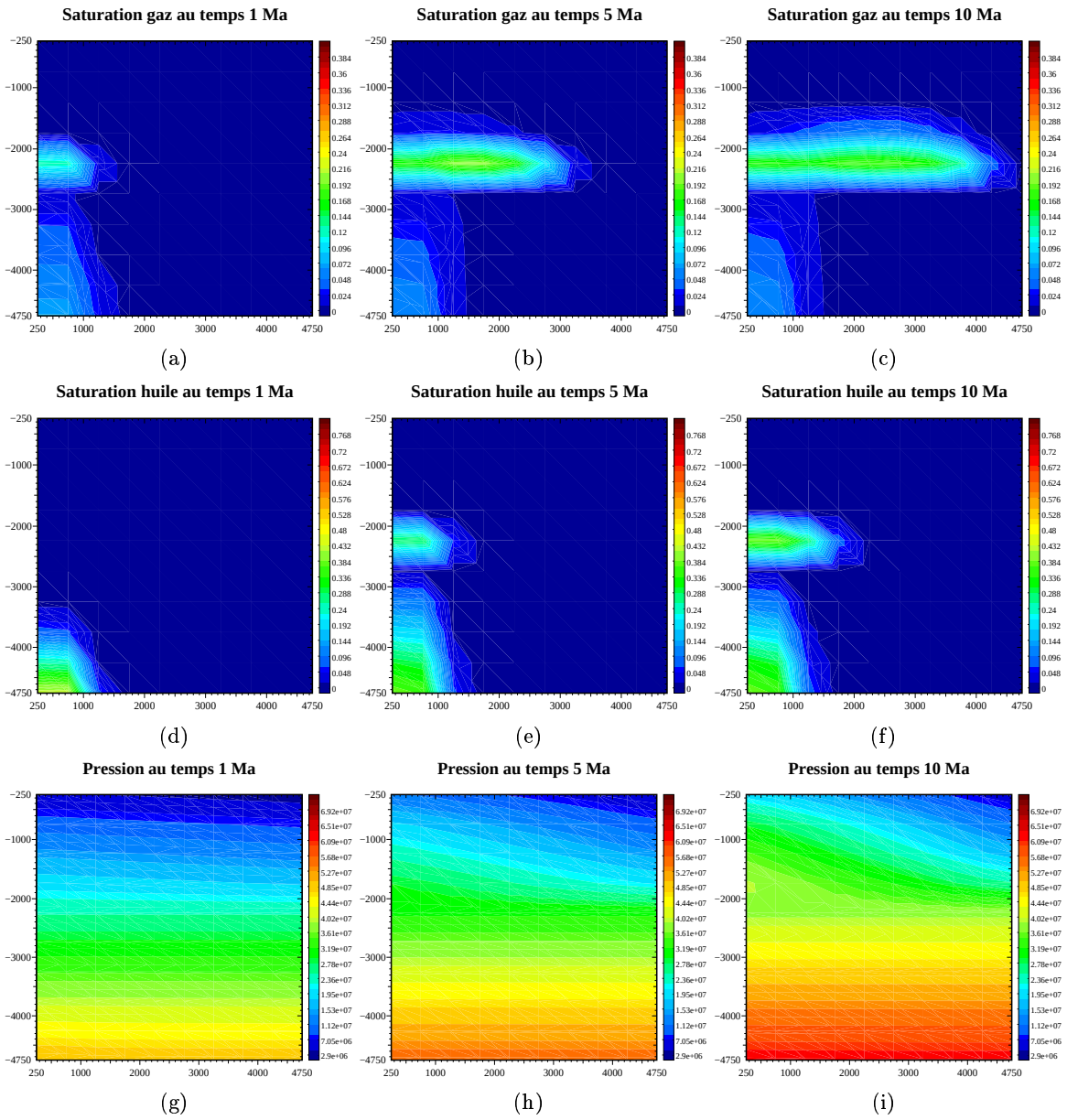


Figure 6.38: Pression, saturations de la phase huile et de la phase gaz pour le modèle tenant compte du module thermodynamique à masses et volume constants. Résolution sur un maillage 10×10 avec une méthode de point fixe.

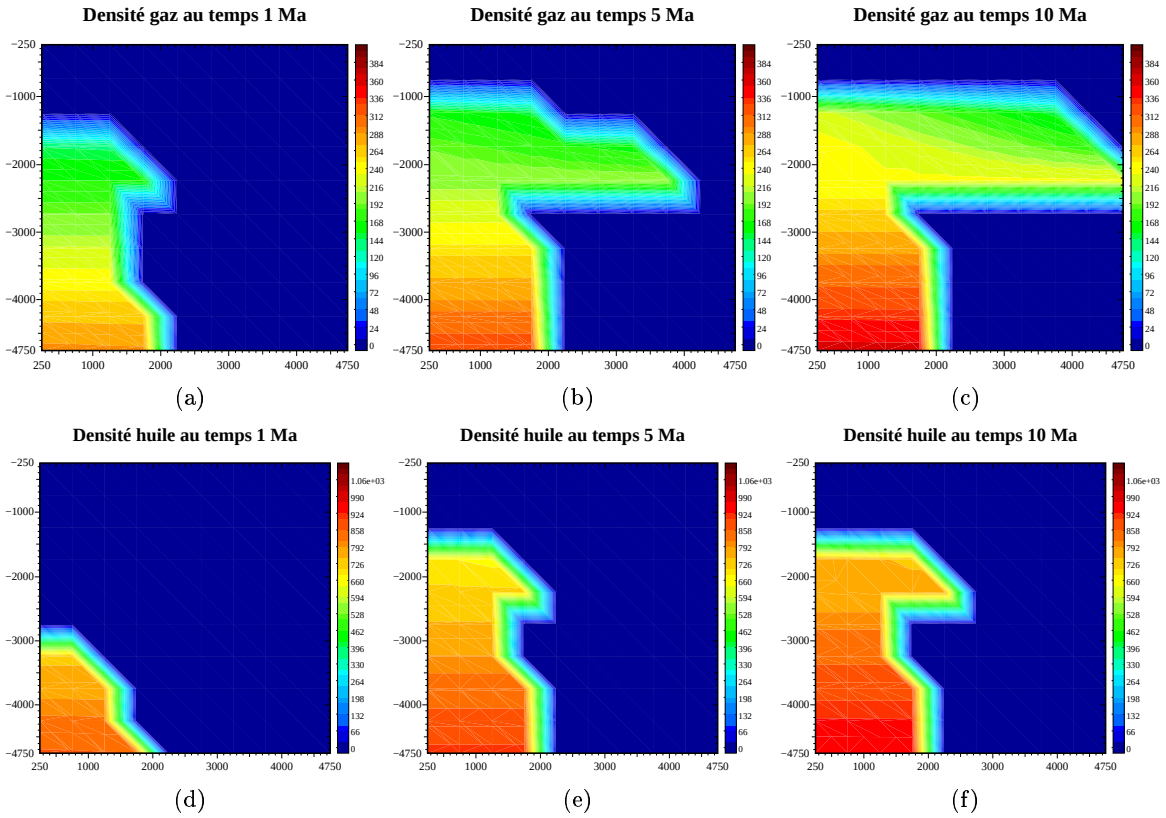


Figure 6.39: Densités de la phase huile et de la phase gaz pour le modèle tenant compte du module thermodynamique à masses et volume constants. Résolution sur un maillage 10×10 avec une méthode de point fixe.

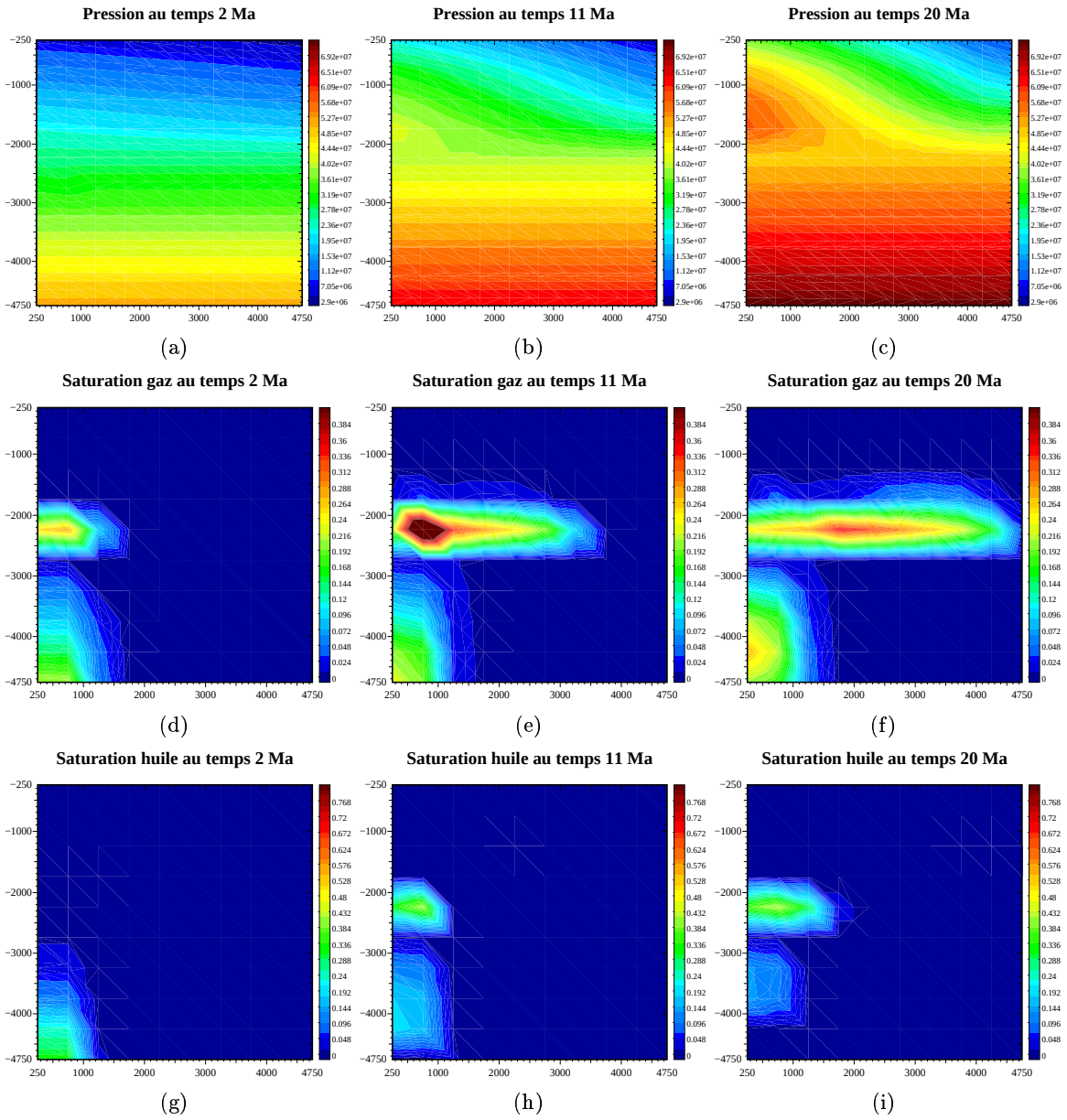


Figure 6.40: Pression, saturations de la phase huile et de la phase gaz pour le modèle tenant compte du module thermodynamique à masses et volume constants pour une loi de densité tronquée et une forte miscibilité.

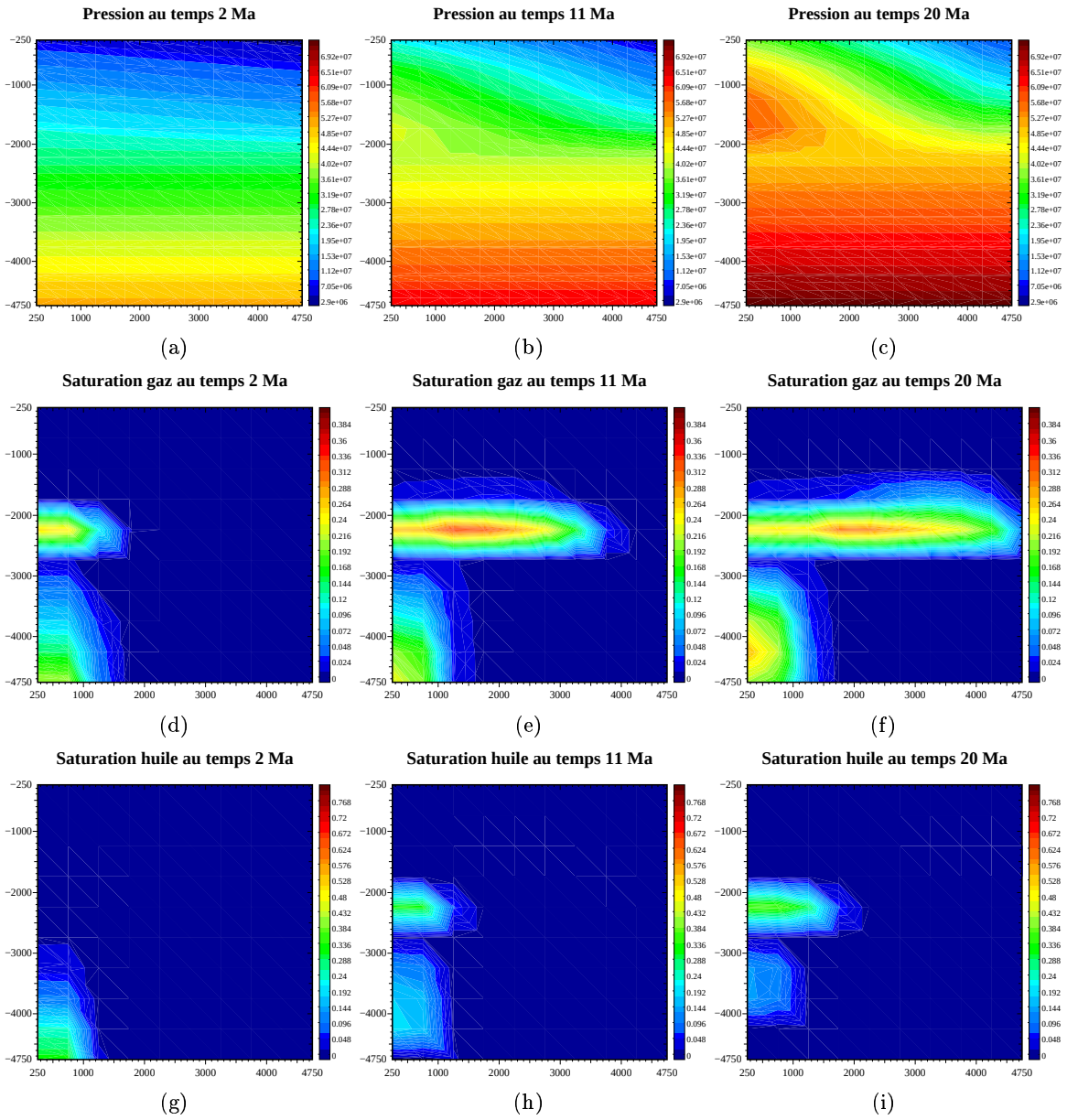


Figure 6.41: Pression, saturations de la phase huile et de la phase gaz pour le modèle ne tenant pas compte du module thermodynamique à masses et volume constants pour une loi de densité tronquée et une forte miscibilité.

Chapitre 7

Gestion du pas de temps

7.1 introduction

Dans le chapitre précédent, on a vu que la voie de correction des cœfficients de thermodynamique en introduisant une étape supplémentaire n'est pas satisfaisante et génère un coût calcul important. On se propose d'explorer une nouvelle voie dans ce chapitre. Pour commencer, on va regarder la stabilité numérique su modèle que l'on a retenu en raffinant en temps et en espace. De cette étude, on propose une stratégie de gestion de pas de temps dans le paragraphe suivant.

7.2 Raffinements en temps et en espace

Le choix pour effectuer ces simulations s'est porté sur un écoulement triphasique, compressible et miscible avec deux constituants hydrocarbures. La gestion des répartitions des deux constituants au sein des deux phases hydrocarbures s'effectue avec un module thermodynamique de type "Black-oil".

7.2.1 Simulation sur un maillage 10×10 sans raffinement en temps

Description de la simulation

Dans ce premier paragraphe, on simule un écoulement triphasique, une phase eau et deux phases hydrocarbures, avec compaction affine en temps et en espace. Le but, ici, est de présenter une simulation qui va servir de référence pour l'étude de la stabilité du schéma lorsque l'on va raffiner en temps et en espace.
Le domaine est un carré $[0, 5000m] \times [0, -5000m]$, constitué de trois couches géologiques, deux couches d'argile de perméabilités différentes et une couche de sable qui les sépare. L'argile du fond du bassin est moins imperméable que l'argile du toit qui sert de couverture au drain. Ce dernier sert donc de roche magasin. Les densités des phases hydrocarbures sont compressibles. Le module thermodynamique qui régit les échanges entre les phases

hydrocarbures est un "Black-oil" simple puisque seul le constituant léger, présent dans la phase gaz, se dissout dans la phase huile, le constituant lourd restant dans la seule phase huile.

Résultats et observations

Les résultats de la simulation sur ce maillage sont présentés sur les graphiques 7.1 et 7.2. On ne fera la comparaison que sur les pressions, les porosités et les saturations d'huile et de gaz puisque ces quantités permettent le calcul de toutes les autres grandeurs thermodynamiques (viscosité, densité, fraction massique et cœfficient de répartition).
On constate qu'une bulle de surpression (figure 7.1(c)) apparaît dans l'argile imperméable se situant au dessus du drain. Cette bulle de surpression est due à une vitesse de compaction un peu trop importante pour un domaine fixe comme on l'a supposé dans notre cas. Ceci n'a qu'une faible influence sur le comportement du modèle, mais cela permet d'augmenter la migration latérale dans le drain et dans la couche d'argile inférieure. Le comportement de la porosité suit assez bien celui de la pression puisque l'on retrouve des porosités plus petites au niveau du pic de surpression par rapport au niveau des valeurs des porosités voisines (figure 7.1(e)(f)). Le comportement des phases hydrocarbures est attendu puisqu'elles remplissent bien le drain et vont s'accumuler sur le bord du bassin avant de migrer vers le toit (figure 7.2(a) à (f)). Toutefois, on observe que la phase gaz diffuse au travers de l'argile imperméable qui sert de "bouchon".
On présente avec une échelle différente les mêmes saturations d'huile sur les figures 7.2 (g)(h)(i) et 7.1(a)(b)(c). Cela permet de montrer l'étalement du front de saturation de l'huile avec un maillage 10×10.
Enfin, le pas de temps pour cette simulation est assez oscillant puisqu'il a fallu 570 annulations de pas de temps pour achever la simulation: le pas de temps est globalement croissant jusqu'à 14 Ma, puis décroît jusqu'à la fin de la simulation. Ce phénomène est dû, comme pour la bulle de pression, à une trop forte vitesse de sédimentation. Une réduction de cette vitesse de sédimentation fait disparaître la chute du pas de temps en seconde partie de la simulation.

Le paragraphe suivant est consacré au raffinement en temps de cette simulation.

7.2.2 Raffinement en temps sur un maillage 10×10

But de la simulation

Le raffinement en temps présenté dans ce paragraphe permet d'analyser la stabilité du pas de temps adaptatif ou sa nuisance à propager des erreurs rendant par la suite le schéma instable. Cette question vient naturellement lorsqu'on regarde les oscillations et le nombre d'annulations du pas de temps au cours d'une simulation de 20 Ma. Pour cela, on a fixé la valeur maximale du pas de temps afin de limiter les oscillations de ce dernier.

Résultats, observations et conclusions

Les graphiques présentés sur les figures 7.3 et 7.4 ont été obtenus avec un raffinement en temps sur un maillage 10×10 en espace. Pour cela, on a fixé la valeur maximale du pas de temps à $0,001$ Ma, valeur choisie en considérant l'évolution du pas de temps donnée par le graphique 7.1(g), tout en retenant la plus grande valeur des chutes de pas de temps. Le pas de temps obtenu pour cette simulation de raffinement est constant et s'établit à sa valeur maximale. Aucune annulation de pas de temps n'a eu lieu. Si l'on compare les graphiques des figures 7.3 et 7.4 avec les graphiques des figures 7.1 et 7.2, on constate qu'il n'y a quasiment aucune différence entre ces graphiques bien que le front de saturation de la phase huile soit un peu plus étalé dans le cas du raffinement en temps (*cf.* 7.4(a)(b)(c)) par rapport à la simulation avec le pas de temps adaptatif (*cf.*7.2(a)(b)(c)). Le changement d'échelle pour la représentation des saturations (graphiques 7.2(g)(h)(i) et 7.4(g)(h)(i)), montre que le front de saturation est mieux pris en compte lors du raffinement du pas de temps puisque la diffusion latérale est moins importante. Ce constat justifie l'avancée plus importante du front de saturation avec le raffinement du pas de temps.
Ce premier test de raffinement en temps sur un maillage 10×10 montre que le schéma est stable en temps, pour cet exemple, et que le pas de temps adaptatif mis en œuvre limite les effets d'instabilité.
Enfin, on observe sur les graphiques que la migration des hydrocarbures s'effectue de façon verticale dans l'argile et horizontale dans le drain. On va donc naturellement raffiner dans un premier temps verticalement puis ensuite horizontalement.

7.2.3 Raffinement en temps sur un maillage 10×20

On analyse le comportement du pas de temps et du schéma lorsque l'on raffine uniquement selon la direction verticale privilégiée par les écoulements.

Résultats, observations et conclusions

Raffinement en espace

Dans ce paragraphe, on retient un maillage de 10×20, 10 en abscisse, 20 en ordonnée pour cette simulation. La valeur du pas de temps est fixée à *0.2 Ma*. Les figures 7.5 et 7.6 présentent les résultats de cette simulation.

Le premier constat que l'on peut faire par rapport à la simulation sur le maillage 10×10 est la chute du pas de temps. En effet, pour cette simulation (figure 7.5(g)) le pas de temps atteint une valeur maximale de *0.01 Ma* alors qu'il se situait autour de *0.03 Ma* pour la simulation précédente (figure 7.1(g)). De plus, le pas de temps de cette simulation est beaucoup plus oscillant puisque 3640 annulations de pas de temps ont été comptabilisées contre 570 précédemment. Cette chute de pas de temps est liée au raffinement retenu puisque la thermodynamique est la même que dans la simulation précédente. Le fait de diminuer la hauteur des mailles, impose au pas de temps une diminution compte tenu de la condition *C.F.L.* à respecter. De plus, le calcul de ce pas de temps dépend du volume de la maille et il diminue donc avec le raffinement.

Si l'on compare les pressions obtenues (graphiques 7.5(a)(b)(c)) avec celles obtenues avec la simulation de référence (graphiques 7.1(a)(b)(c)), on observe un écart minime de 1% entre les valeurs. En revanche, les porosités sont en augmentation significative, notamment sur le bord latéral droit du bassin. Cela provient de la méthode de calcul de la porosité qui tient compte du nombre de mailles verticales du domaine puisque le calcul se fait de proche en proche.

Les saturations, présentées aux figures 7.6, montrent un écart important par rapport à celles présentées lors de la simulation avec un maillage 10×10 (figures 7.2). Les écarts sont d'environ 40% pour les saturations de la phase huile. On peut supposer que ces écarts proviennent des différences de porosité observées. On a donc repris la simulation avec une porosité constante. Des écarts de même ordre entre les saturations sont observés. Le changement d'échelle pour la représentation graphique (figure 7.6(g)(h)(i) et 7.2(g)(h)(i)) permet de mieux comprendre cette différence. On observe que le front de saturation de la phase huile est moins étalé avec le raffinement 10×20 qu'avec le raffinement 10×10. On suit donc mieux l'évolution du front de saturation, ce qui explique l'augmentation de la valeur des saturations (la diffusion numérique est moins importante dans le cas 10×20 que dans le cas 10×10).

Raffinement en temps

Dans un deuxième temps, on a repris cette simulation, mais en raffinant en temps (en fixant la valeur maximale du pas de temps à $2\ 10^{-4} Ma$). Les résultats sont présentés sur les figures 7.7 et 7.8. Les pressions, les porosités et les saturations de gaz sont identiques, seules les valeurs de saturation de la phase huile diffèrent. En effet, en comparant les graphiques 7.8(c) et 7.6(c), on observe que la poche d'huile n'apparaît plus entre 250m et 1000m (7.6(c)). Les saturations sont plus homogènes. Ce phénomène est lié aux effets de maillage de la discrétisation en espace. En effet, on prévilégie, dans notre discrétisation, deux directions, l'une verticale, l'autre horizontale (schéma VF5). Le raffinement opéré demande une plus grande précision et donc une condition $C.F.L$ plus restrictive. Le raffinement en temps respecte mieux cette condition de $C.F.L.$ que le pas adaptatif, d'où cet aspect plus homogène des saturations dans le drain.

Dans le paragraphe suivant, on va observer le comportement du schéma avec un raffinement encore plus fin mais seulement dans la direction verticale.

7.2.4 Raffinement en temps sur un maillage 10×40

Dans ce paragraphe, on se propose de raffiner le maillage afin d'analyser l'effet de maillage constaté dans le paragraphe précédent.

Résultats, commentaires et conclusions

Raffinement en espace

Dans ce paragraphe, le raffinement est uniquement vertical avec un maillage 10×40. Les résultats de cette simulation sont présentés aux figures 7.9 et 7.10.
Le pas de temps de cette simulation reste dans la même plage de valeurs que celui de la simulation en 10×20 (7.5(g)), mais légèrement plus petit. Ceci est logique puisque le pas de temps est basé sur les flux et les volumes des mailles. Comme ces dernières diminuent, cela implique une diminution du pas de temps. Ce pas de temps est également plus oscillant puisque 7324 annulations de pas de temps ont été comptabilisées au cours de la simulation contre 3641 pour la simulation en 10×20. Cette différence provient du critère retenu pour les variations des masses qui semble moins adapté à ce raffinement que précédemment. On est donc éloigné du pas de temps optimal du critère résultant de la condition *C.F.L.* généré par les termes explicites du schéma numérique.
Le comportement des pressions (7.9(a)(b)(c)) reste similaire aux comportements observés lors des simulations précédentes avec des variations inférieures à 2% par rapport à la simulation avec un maillage 10×10 (7.1(a)(b)(c)). Par contre, le comportement de la porosité est sensiblement différent par rapport à celui observé lors de la simulation de référence. En effet, sur les figures 7.9(d)(e)(f), on observe une diminution de la porosité dans l'argile au dessus du drain plus importante que dans les simulations précédentes (7.5(d)(e)(f)et 7.1(d)(e)(f)). Ce tassement est lié à la meilleure prise en compte de la compaction qui dépend du nombre de mailles du domaine. Le même phénomène apparaît sur le bord latéral droit du domaine pour le gonflement de la porosité.
Enfin, le comportement des saturations, compte tenu de la remarque faite pour le raffinement en 10×20, est celui attendu puisque le raffinement en espace permet d'éviter l'étalement du front de saturation, comme on peut l'observer sur les figures 7.10(g)(h)(i). De plus, la diminution du volume des mailles augmente les valeurs des saturations. Par conséquent, le front de saturation sera plus avancé lors de raffinement en espace (*cf.* 7.10,7.6 et 7.2 pour comparaison).

Raffinement en temps

On a repris cette simulation en fixant la valeur maximale du pas de temps à 5 $10^{-5} Ma$. Les résultats sont présentés aux figures 7.11 et 7.12. On ne constate quasiment aucune différence tant pour les pressions que pour les porosités ou les saturations de l'huile et du gaz. La réduction de la valeur de la saturation de l'huile lors du raffinement en temps sur le maillage 10×20 ne s'observe plus: le volume des mailles est réduit et l'on a toujours la

même masse d'hydrocarbure. En conséquence, le remplissage des mailles est plus rapide avec ces petites mailles et l'effet d'accumulation lié aux effets de maillage disparaît.

Ayant raffiné verticalement, on va maintenant raffiner uniquement horizontalement et voir les conséquences sur le schéma.

7.2.5 Raffinement en temps sur un maillage 20×10

Dans ce paragraphe, on s'intéresse à l'influence du raffinement horizontal sur les écoulements et notamment sur l'étalement du front de saturation. On peut s'attendre toutefois à des résultats beaucoup moins marqués puisque la migration latérale est plus faible (à l'exception des écoulements dans le drain. Cependant, du fait des vitesses de filtration rapides dans ce milieu, la diffusion latérale est peu importante).

Résultats, commentaires et conclusions

Raffinement en espace

Un maillage 20×10 est utilisé pour le raffinement. Les résultats sont présentés aux figures 7.13 et 7.14.
On remarque que l'allure de la courbe de pas de temps n'est pas très différente de celle obtenue lors de la simulation sur un maillage 10×10. Ce pas de temps est légèrement plus oscillant que celui de la simulation de référence puisque 831 annulations de pas de temps ont été comptabilisées contre 570. On en déduit donc que le raffinement selon l'axe des abscisses est moins influent sur le pas de temps que le raffinement selon l'axe des ordonnées. Ceci paraît logique puisque les hydrocarbures migrent principalement verticalement avec une légère migration horizontale (ceci est dû à une plus forte variation des pressions verticalement malgré une sédimentation affine au toit). La comparaison des pressions et des porosités entre les deux simulations (figures 7.13 et 7.1) montre que les valeurs sont semblables. En revanche, comme on l'a observé avec le raffinement 10×20, le front de saturation des hydrocarbures est moins étalé horizontalement dans la simulation avec un maillage 20×10 que dans celle avec un maillage 10×10 (figures 7.14 et 7.2). L'étalement du front persiste verticalement puisque l'on n'a pas raffiné dans cette direction. En conséquence, la valeur de saturation varie légèrement, mais ces variations sont moins marquées qu'avec le raffinement vertical.

Raffinement en temps

On s'est intéressé, comme dans les simulations précédentes, au raffinement en temps en fixant la valeur maximale à $2\ 10^{-4} Ma$. Les résultats sont donnés aux graphiques 7.15 et 7.16. On peut constater que le raffinement en temps n'a pas modifié le comportement du front de saturation, ni les valeurs des saturation, pression et porosité. Ceci provient du fait que le mouvement général des hydrocarbures, pour notre exemple, est surtout vertical plutôt qu'horizontal.

Le paragraphe suivant présente les résultats avec un maillage 40×10.

7.2.6 Raffinement en temps sur un maillage 40×10

On raffine encore par rapport au paragraphe précédent. Le but est d'observer si, lorsque l'on raffine uniquement horizontalement, on influence la migration verticale (les mailles étant plus petites, elles se remplissent plus rapidement)

Résultats et commentaires

Raffinement en espace

On a pris un maillage 40×10. Les résultats sont présentés aux graphiques 7.17 et 7.18. Ce raffinement de maillage ne modifie quasiment pas les valeurs des pression, porosité et saturation comme on peut le remarquer en comparant les graphiques 7.1, 7.2, 7.13, 7.14, 7.17 et 7.18. Le front de saturation est mieux pris en compte que précédemment. On ne constate pas de migration plus importante verticalement malgré le raffinement horizontal. Le comportement du pas de temps de cette simulation peut paraître surprenant. En effet, il oscille moins que dans le cas du maillage 20×10 puisque 674 annulations de pas de temps ont été comptabilisées contre 831 (figures 7.13(g) et 7.17(g)). Cette différence provient de la façon dont est calculé le pas de temps. Le pas de temps dépend du flux des hydrocarbures au travers d'une maille, du volume de la maille et du critère sur les variations des masses que l'on se fixe *a priori*. On montre que ce critère influence le nombre d'annulations du pas de temps et le temps de calcul. Plus ce critère est petit, moins on a d'annulations de pas de temps. Or, avec un tel critère, le pas de temps évolue moins vite, ce qui pénalise le temps calcul qui croît. La difficulté est de trouver un "bon" compromis entre ces deux facteurs qui varient selon le type de simulation. La valeur du critère retenue est 0.4 pour l'ensemble des simulations. Cette valeur semble mieux adaptée pour la simulation avec un maillage 40×10 que pour la simulation avec un maillage 20×10. De plus, on remarque que le pas de temps de la simulation sur un maillage 40×10 est plus petit au début de la simulation que dans le cas du maillage 20×10. Tout ceci explique la différence du nombre d'annulations de pas de temps entre les deux simulations.

Raffinement en temps

Les graphiques 7.19 et 7.20 montrent les résultats numériques de la simulation avec un maillage 40×10 obtenus avec une valeur de pas de temps maximale de 0.001. Le comportement et les valeurs sont semblables à ceux obtenus aux graphiques 7.17 et 7.18.

Ayant raffiné horizontalement et verticalement séparément, on présente dans les deux derniers paragraphes les simulations avec le même raffinement selon les deux axes.

7.2.7 Raffinement en temps sur un maillage 20×20

Dans les paragraphes précédents, on a raffiné tout d'abord selon la direction privilégié de migration des hydrocarbures, l'axe vertical, puis selon l'axe horizontal. On se propose d'observer maintenant le comportement du schéma lorsque l'on raffine simultanément horizontalement et verticalement et d'apprécier le cumul, l'amélioration ou la dégradation des phénomènes observés séparément.

Résultats, commentaires et conclusions

Raffinement en espace

Dans ce paragraphe, on a simulé les écoulements des hydrocarbures de notre bassin sur un maillage 20×20. Les résultats sont présentés aux figures 7.21 et 7.22.
On observe que le pas de temps (figure 7.21(g)) est semblable à celui issu de la simulation sur le maillage 10×20 (figure 7.5(g)). Ceci confirme que les phénomènes les plus délicats à prendre en compte se produisent lors de la migration verticale. La différence au niveau des annulations de pas de temps vient du fait que l'on a raffiné dans les deux sens (on cumule les problèmes rencontrés lors des raffinements séparés).
En comparant les graphiques 7.21 et 7.22 avec ceux issus de la simulation avec le maillage 10×20 (figure 7.5 et 7.6), on constate qu'il n'y a que très peu de différence entre les résultats des deux simulations. Cette petite différence provient de la meilleure prise en compte du déplacement latéral du front de saturation grâce au raffinement sur l'axe des abscisses.

Raffinement en temps

On a également raffiné en temps en fixant la valeur maximale du pas de temps à $5\ 10^{-5}$. Les résultats sont donnés sur les figures 7.23 et 7.24. Les graphiques sont similaires: seule la saturation de l'huile est plus homogène avec le raffinement en temps (figure 7.24(a)(b)(c)) qu'elle ne l'est avec le pas adaptatif (figure 7.22(a)(b)(c)). Ce phénomène avait été observé avec le raffinement de maillage uniquement vertical.

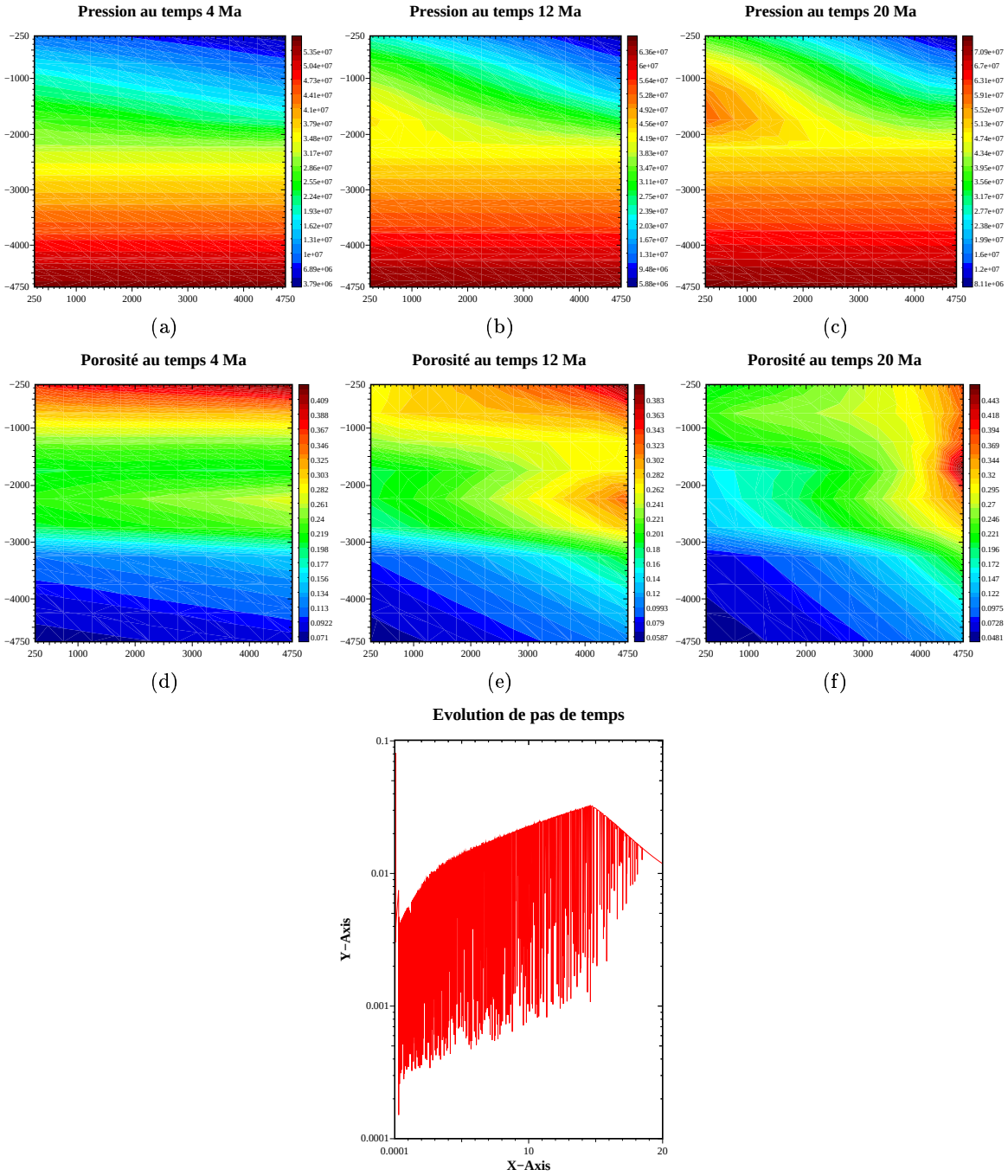
Le dernier paragraphe est consacré à la simulation avec un maillage 40×40.

7.2.8 Raffinement en temps sur un maillage 40×40

Pour terminer ce chapitre, on raffine le domaine avec un maillage 40×40 et l'on présente les résultats aux figures 7.25 et 7.26.
Comme on l'a remarqué précédemment, le pas de temps de cette simulation est semblable à celui de la simulation avec un maillage 10×40, seul le nombre d'annulations de pas de temps diffère. On constate que l'influence du critère de seuil sur les variations de masses est important pour cette simulation comparée à celle exposée dans le paragraphe précédent puisque l'on a presque le double d'annulations de pas de temps: 13216 pour la simulation avec un maillage 40×40 contre 7324 pour la simulation avec le maillage 10×40.
On observe aussi que les valeurs de porosité, de pression et de saturation de l'huile et du gaz sont sensiblement égales pour les simulations avec un maillage 40×40 et avec un maillage 10×40 (graphiques 7.9, 7.10, 7.25 et 7.26 pour les comparaisons).

7.2.9 Conclusion

Dans ce paragraphe, on a montré les résultats obtenus pour différents types de raffinement de maillage et de temps. On a montré l'intérêt à raffiner verticalement sans nécessairement raffiner horizontalement pour l'exemple traité. Enfin, ces simulations ont montré que la stratégie de pas de temps développée était stable pour le schéma numérique, et respectait les différentes conditions de *C.F.L.* apparues au cours des exemples développés.



(g) 570 reprises de pas de temps

Figure 7.1: Pressions et porosités aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ et évolution du pas de temps pour un domaine à trois couches dans un cas diphasique compressible sur un maillage 10×10.

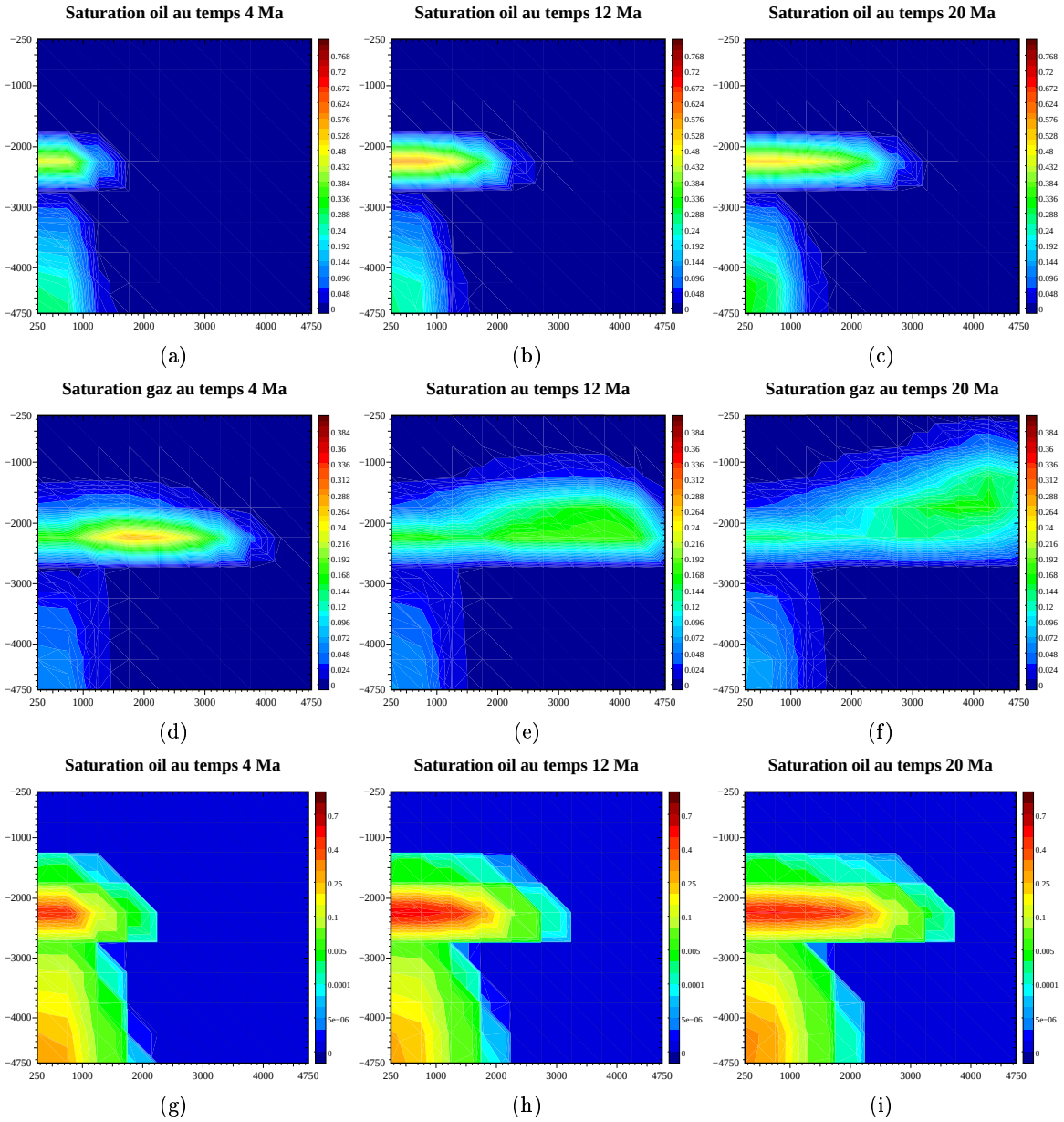


Figure 7.2: Saturations de l'huile et du gaz aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ pour un domaine à trois couches dans un cas diphasique compressible sur un maillage 10×10.

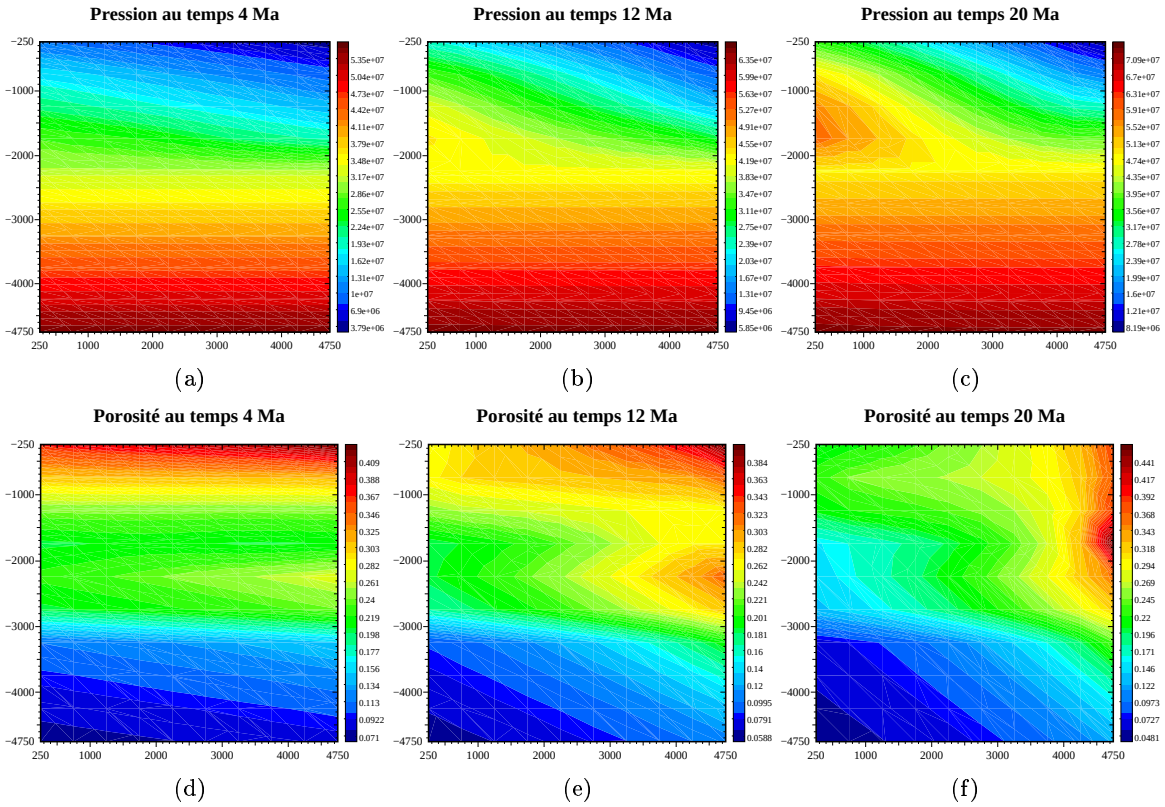


Figure 7.3: Pressions et porosités aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 10×10 et d'un raffinement en temps.

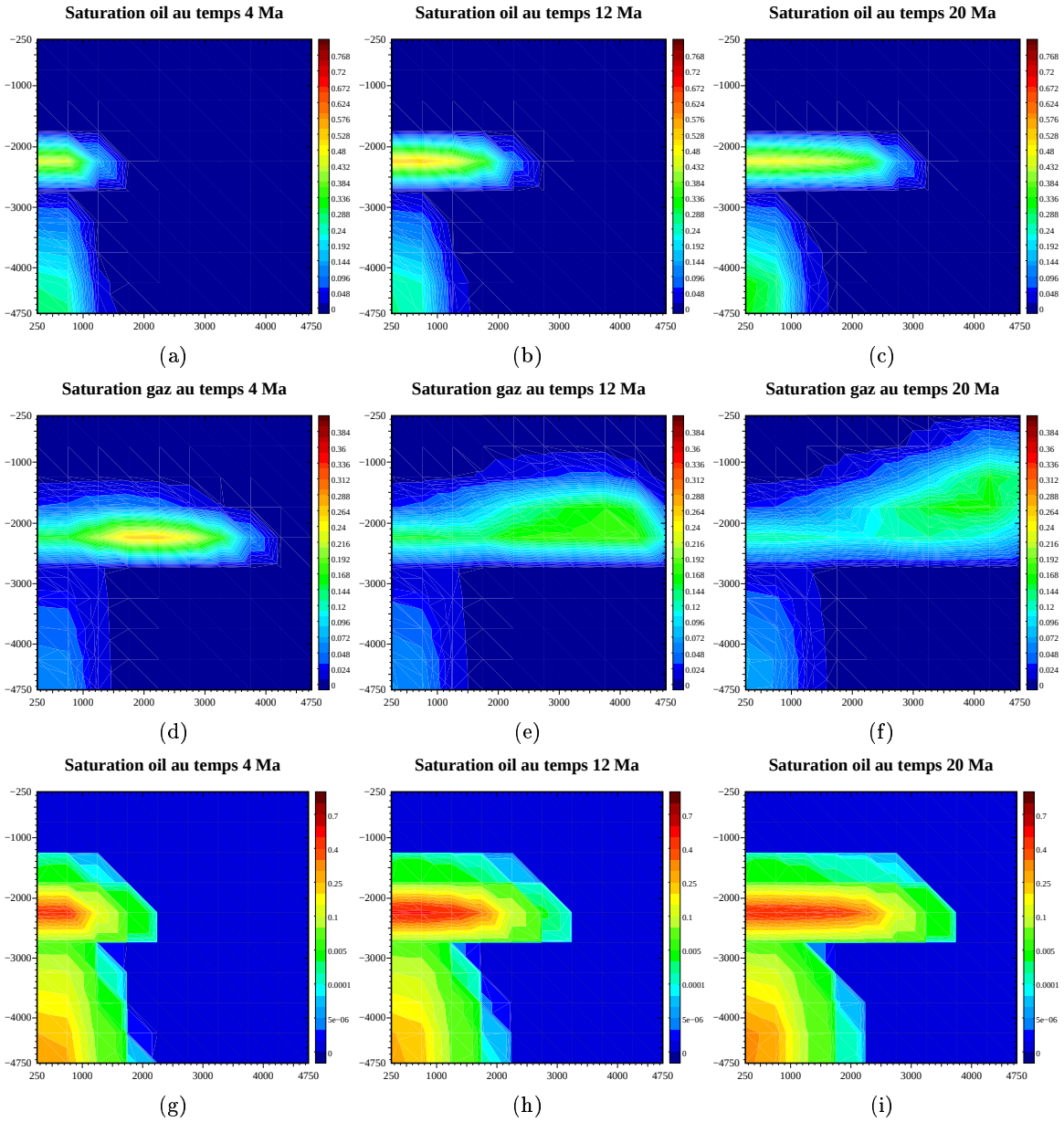
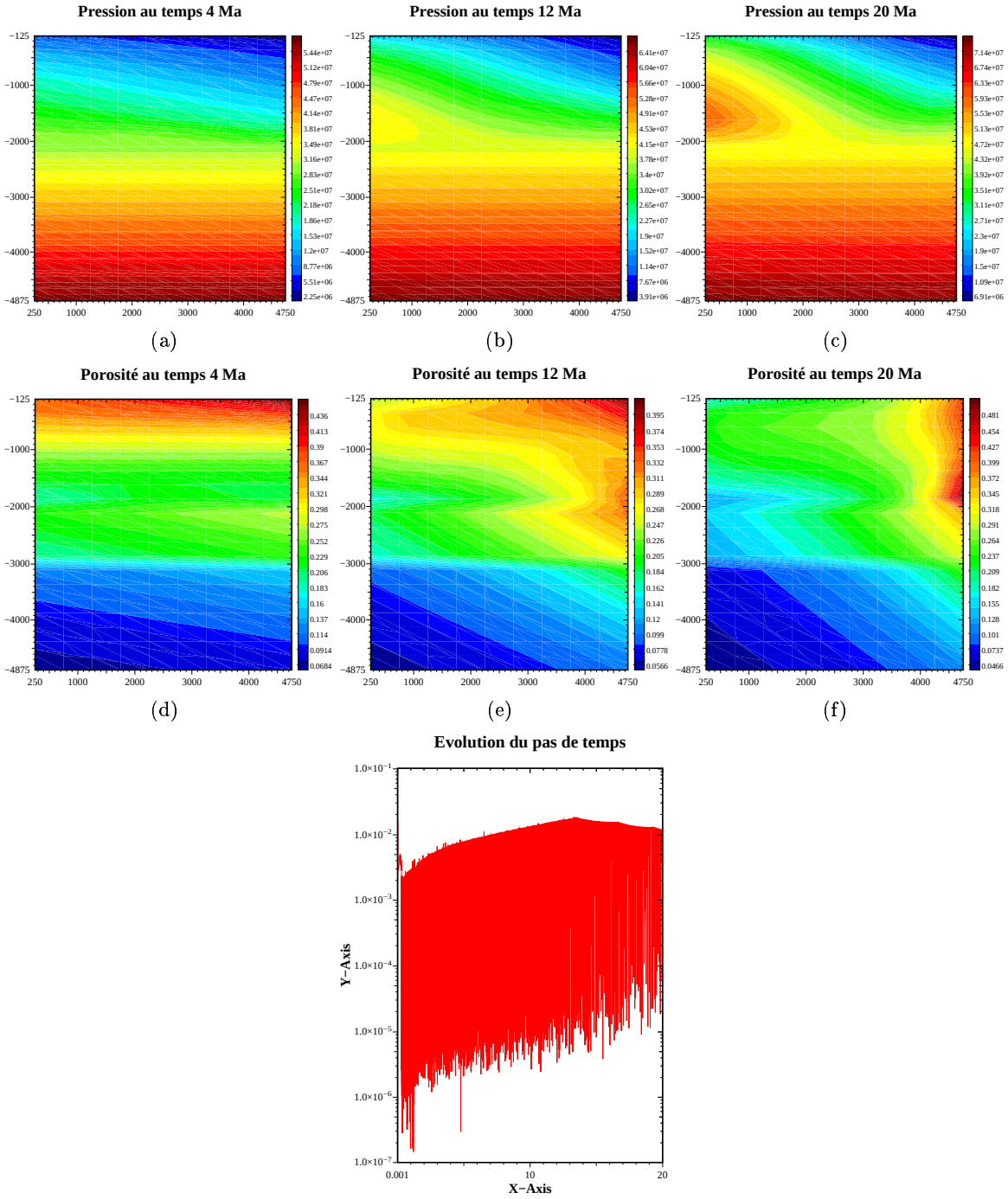


Figure 7.4: Saturations de l'huile et du gaz aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 10×10 et d'un raffinement en temps.



(g) 3641 reprises de pas de temps

Figure 7.5: Pressions et porosités aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 10×20 sans raffinement en temps.

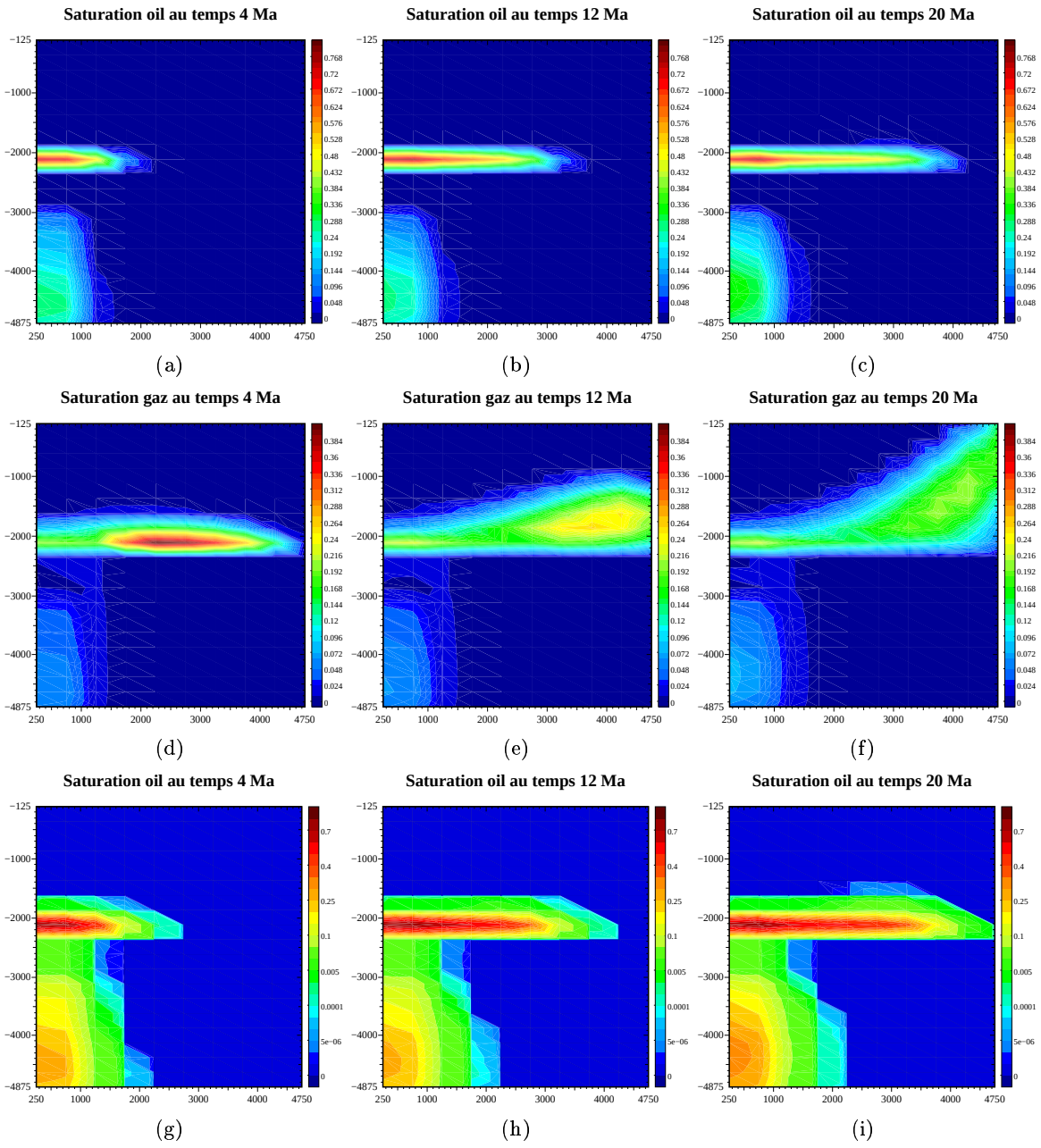


Figure 7.6: Saturations de l'huile et du gaz aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 10×20 sans raffinement en temps.

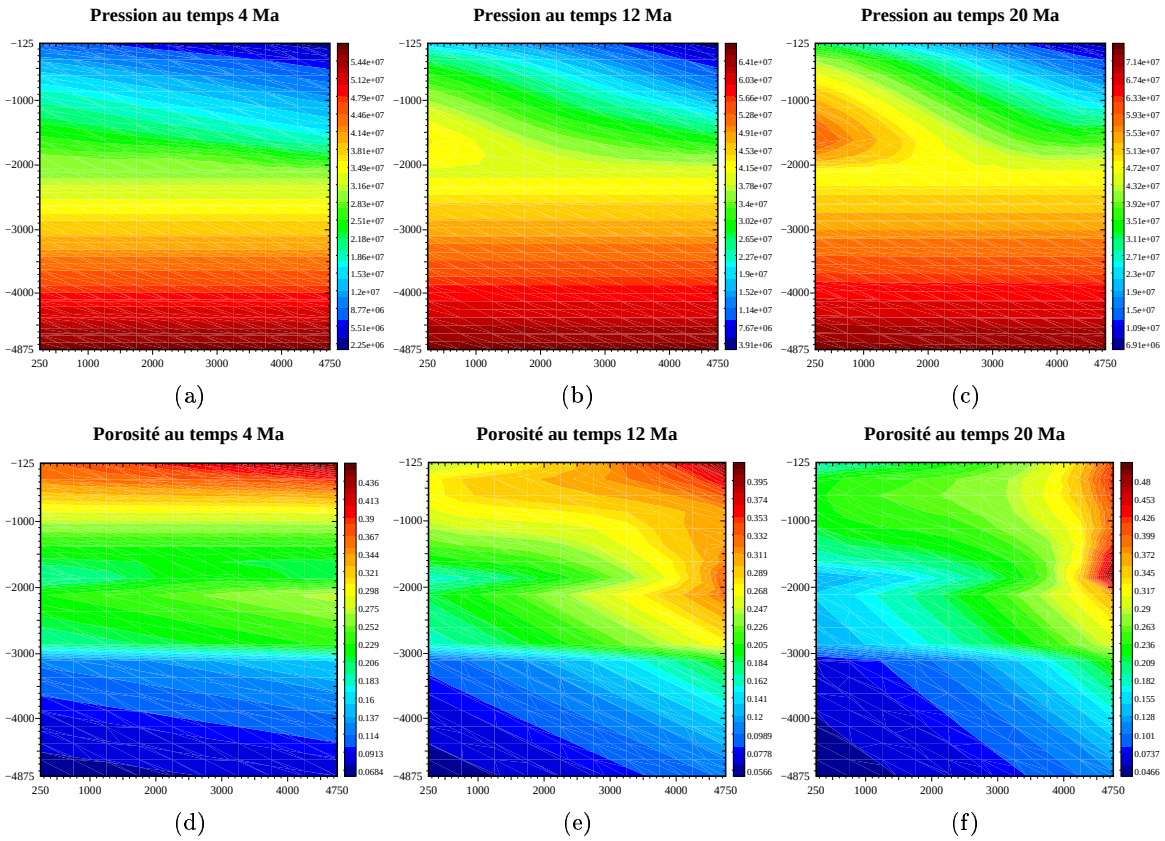


Figure 7.7: Pressions et porosités aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ et évolution du pas de temps dans le cas d'un maillage 10×20 et raffinement en temps

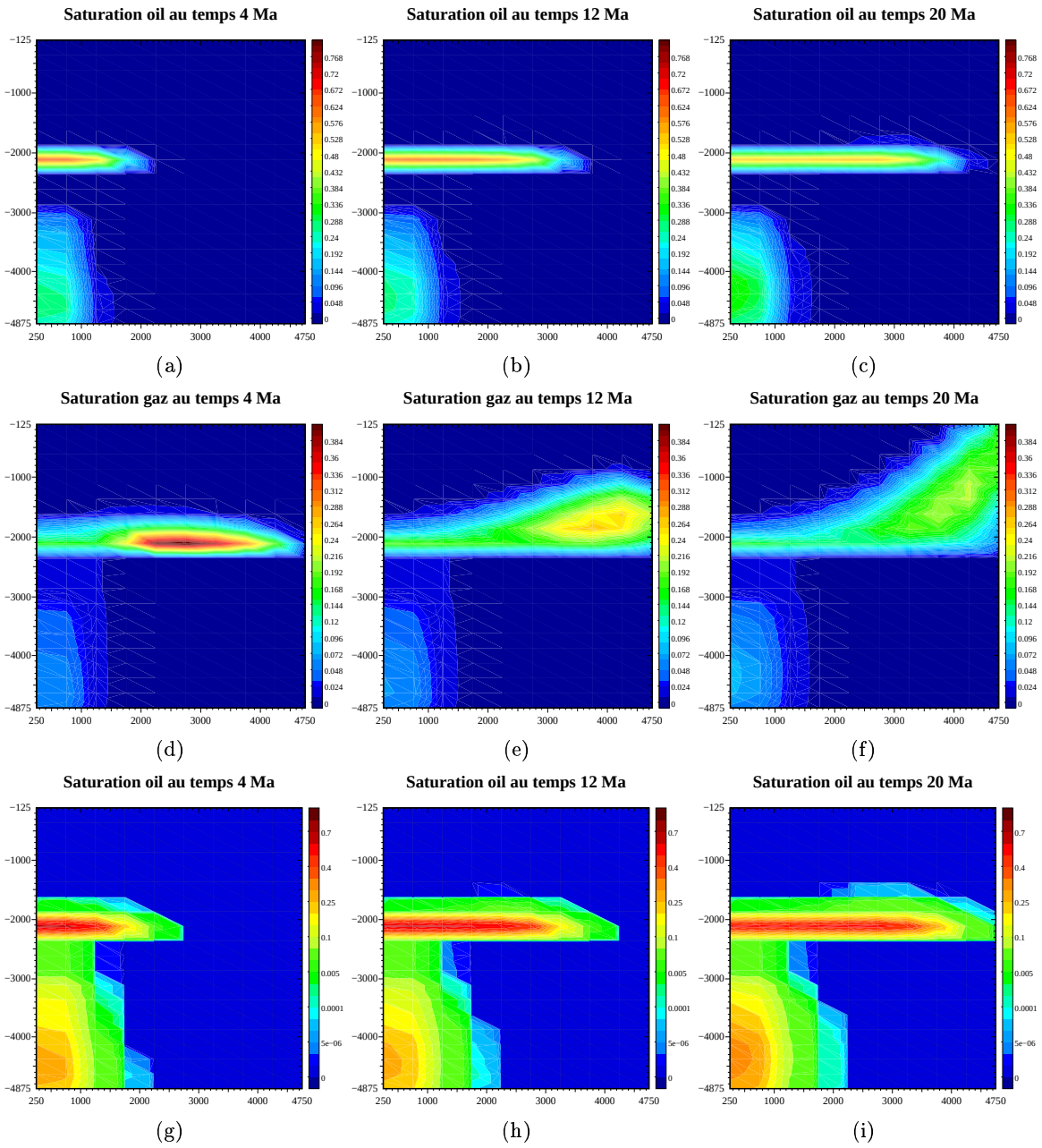
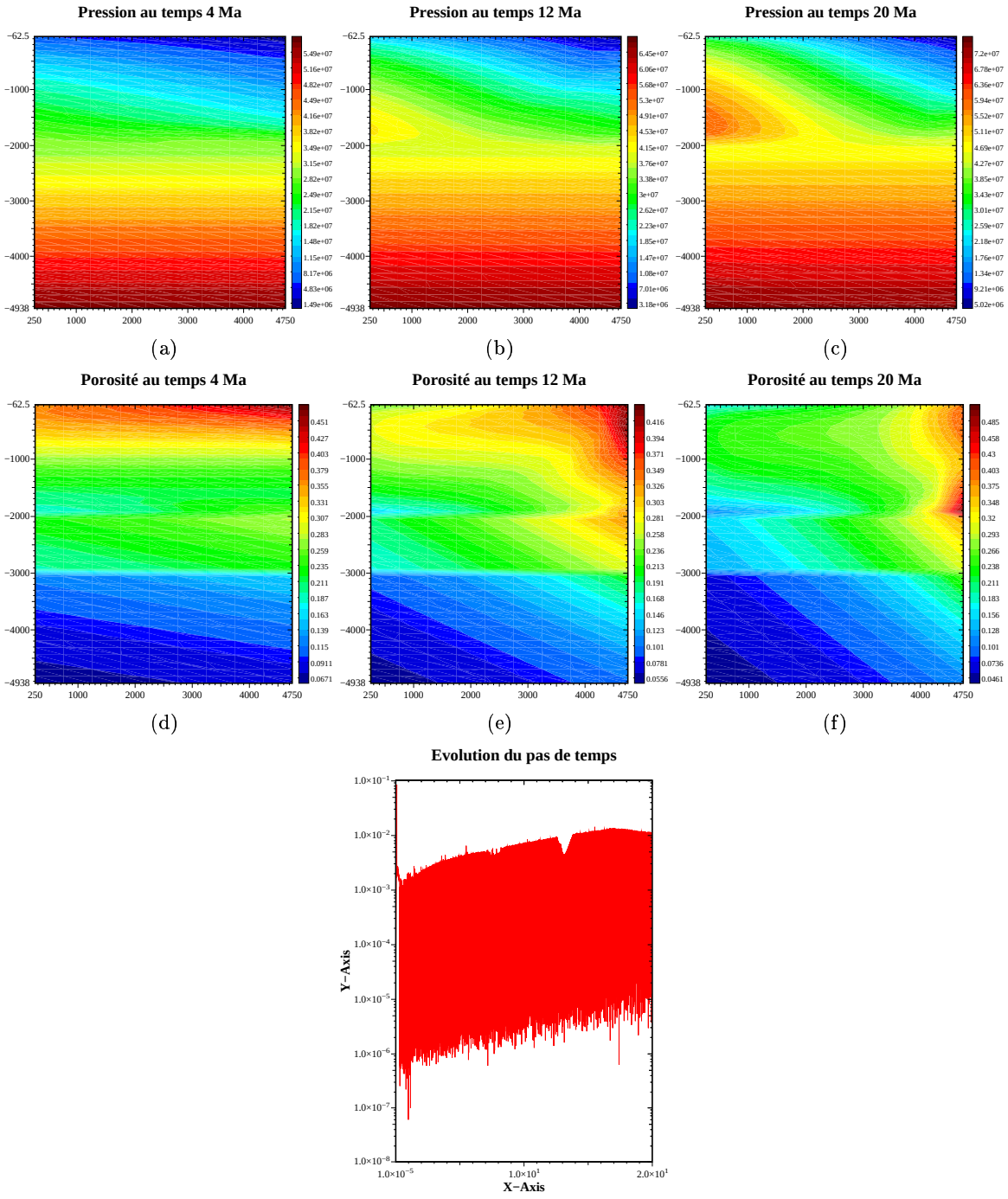


Figure 7.8: Saturations de l'huile et du gaz aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 10×20 et raffinement en temps.



(g) 7324 reprises de pas de temps

Figure 7.9: Pressions et porosités aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ et évolution du pas de temps dans le cas d'un maillage 10×40 sans raffinement en temps.

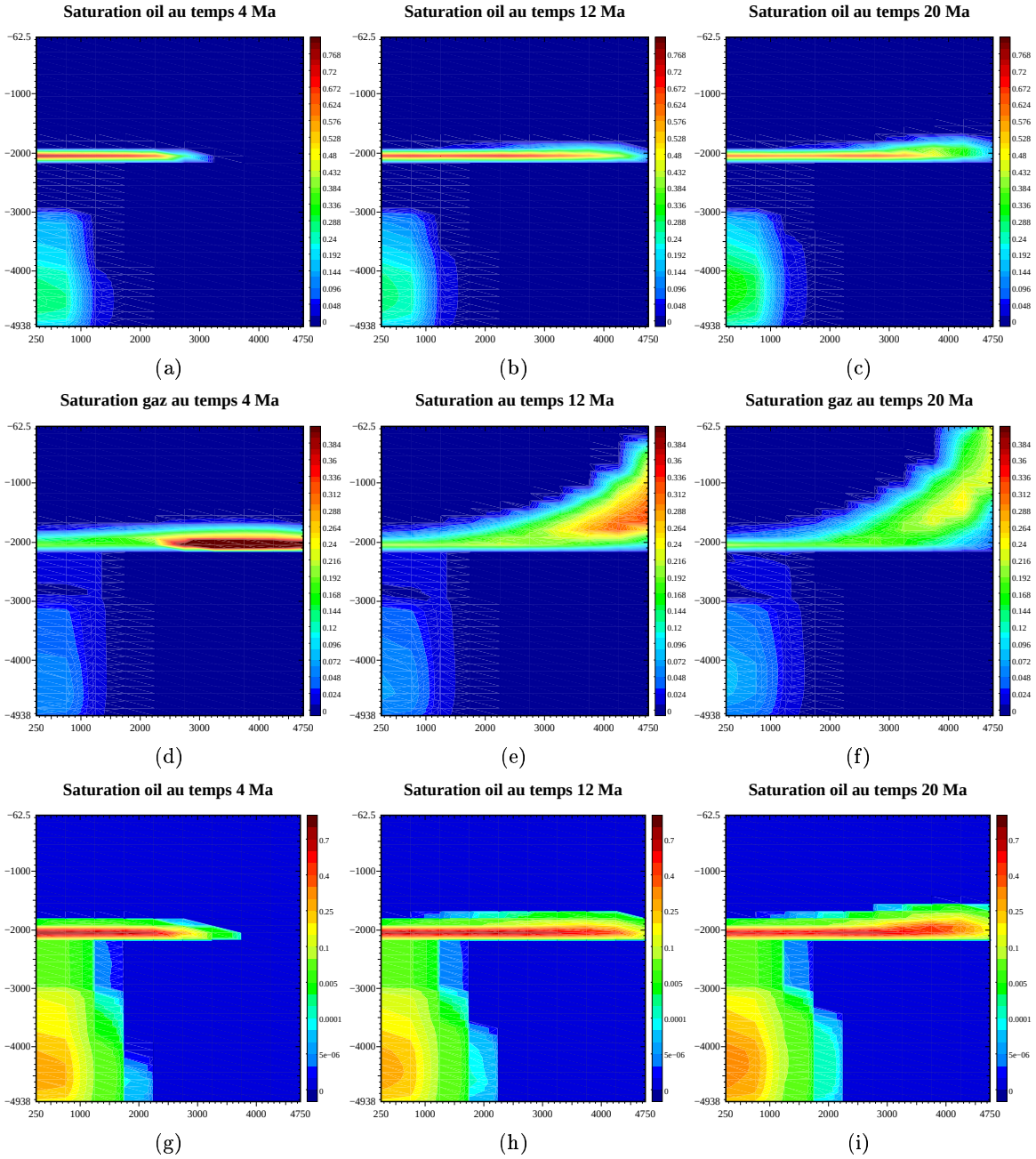


Figure 7.10: Saturations de l'huile et du gaz aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 10×40 sans raffinement en temps.

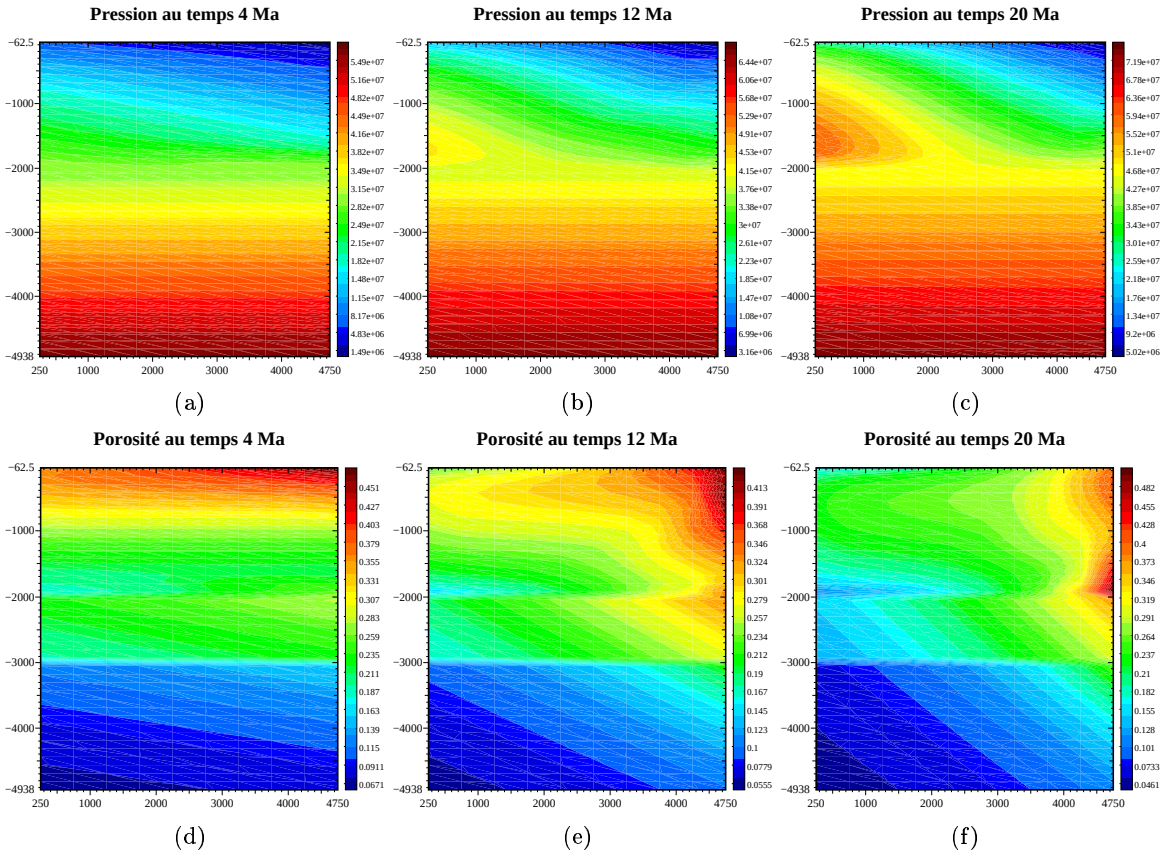


Figure 7.11: Pressions et porosités aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 10×40 et raffinement en temps.

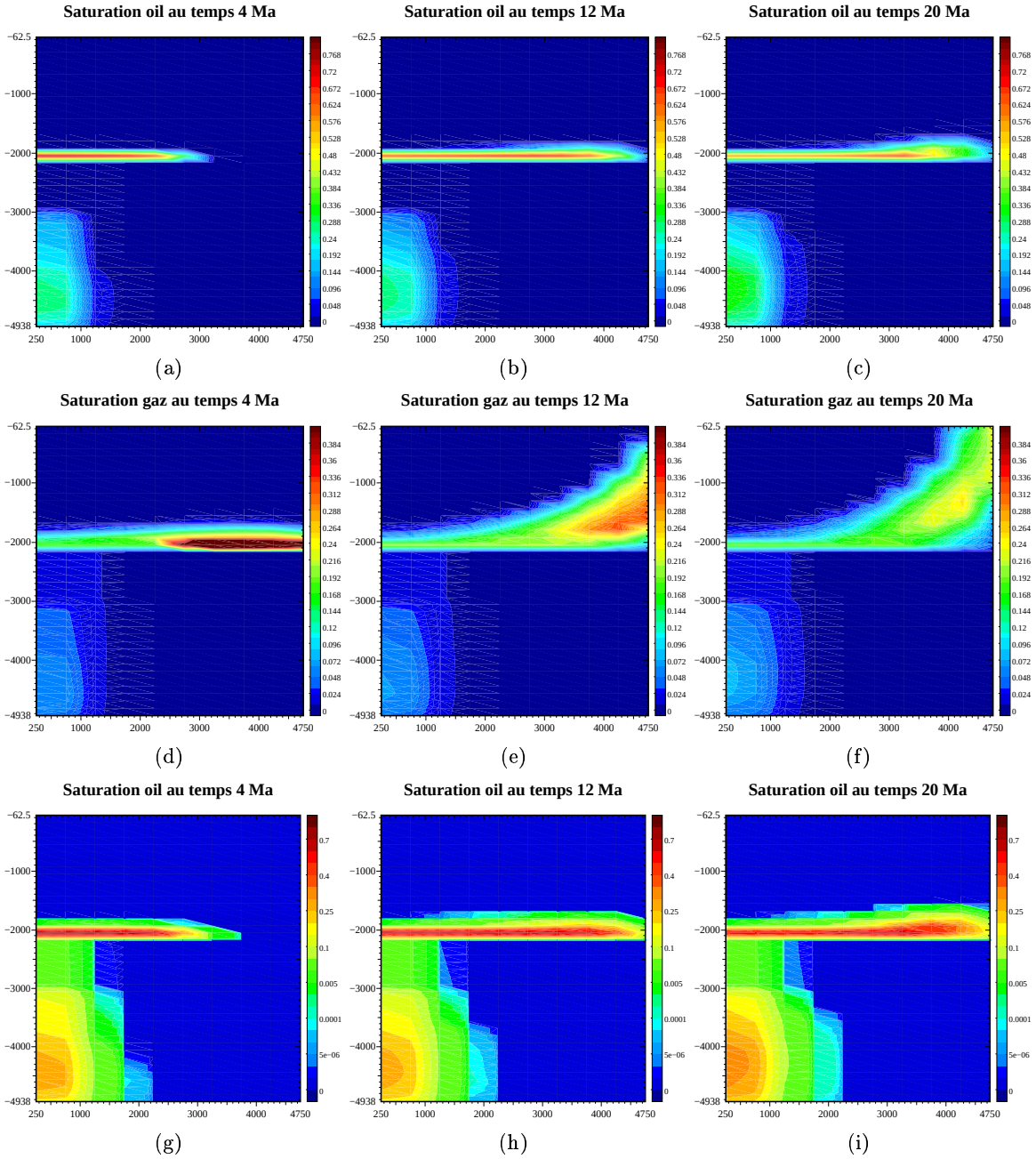
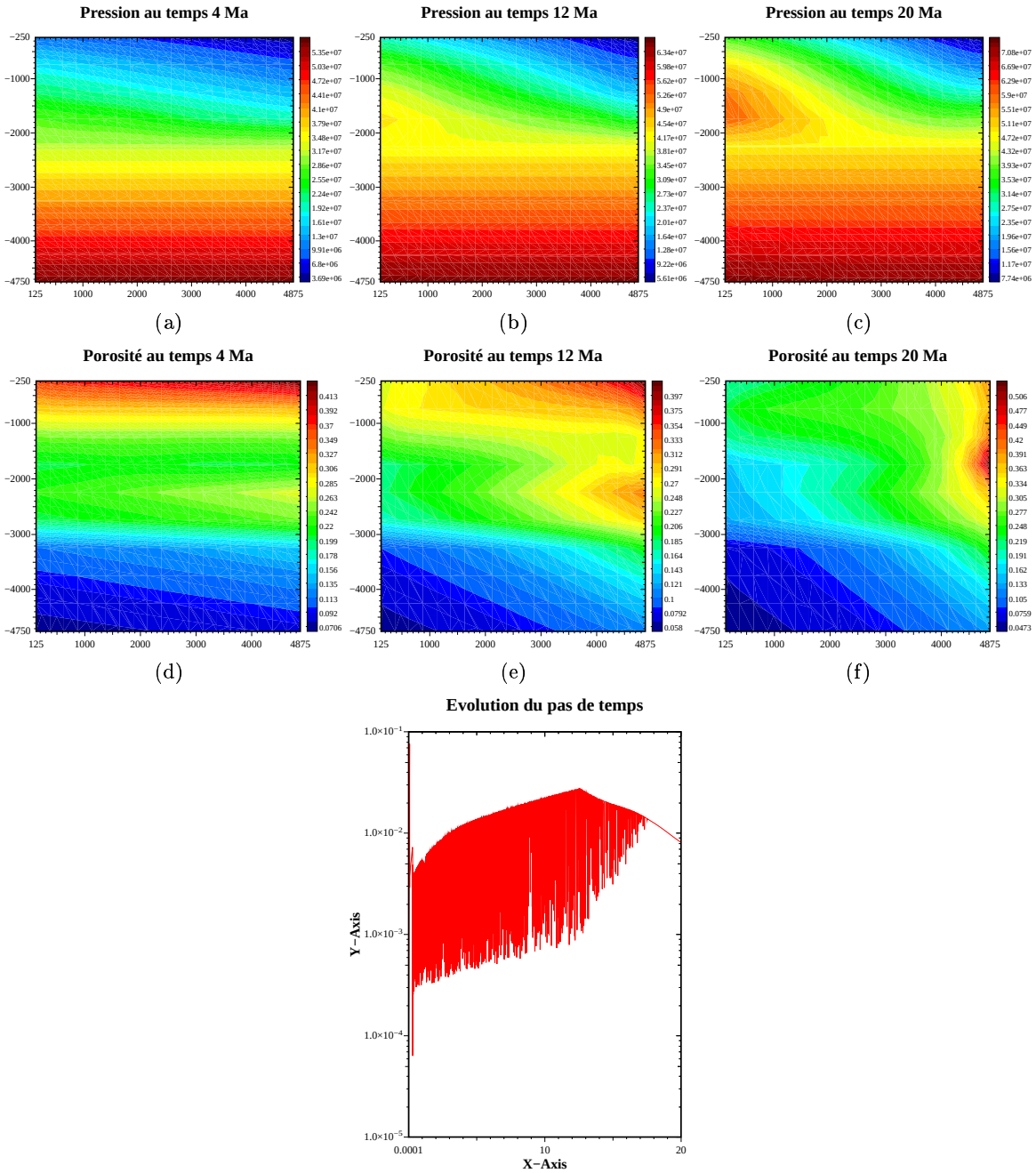


Figure 7.12: Saturations de l'huile et du gaz aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 10×40 et raffinement en temps.



(g) 831 reprises de pas de temps

Figure 7.13: Pressions et porosités aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 20×10 sans raffinement en temps.

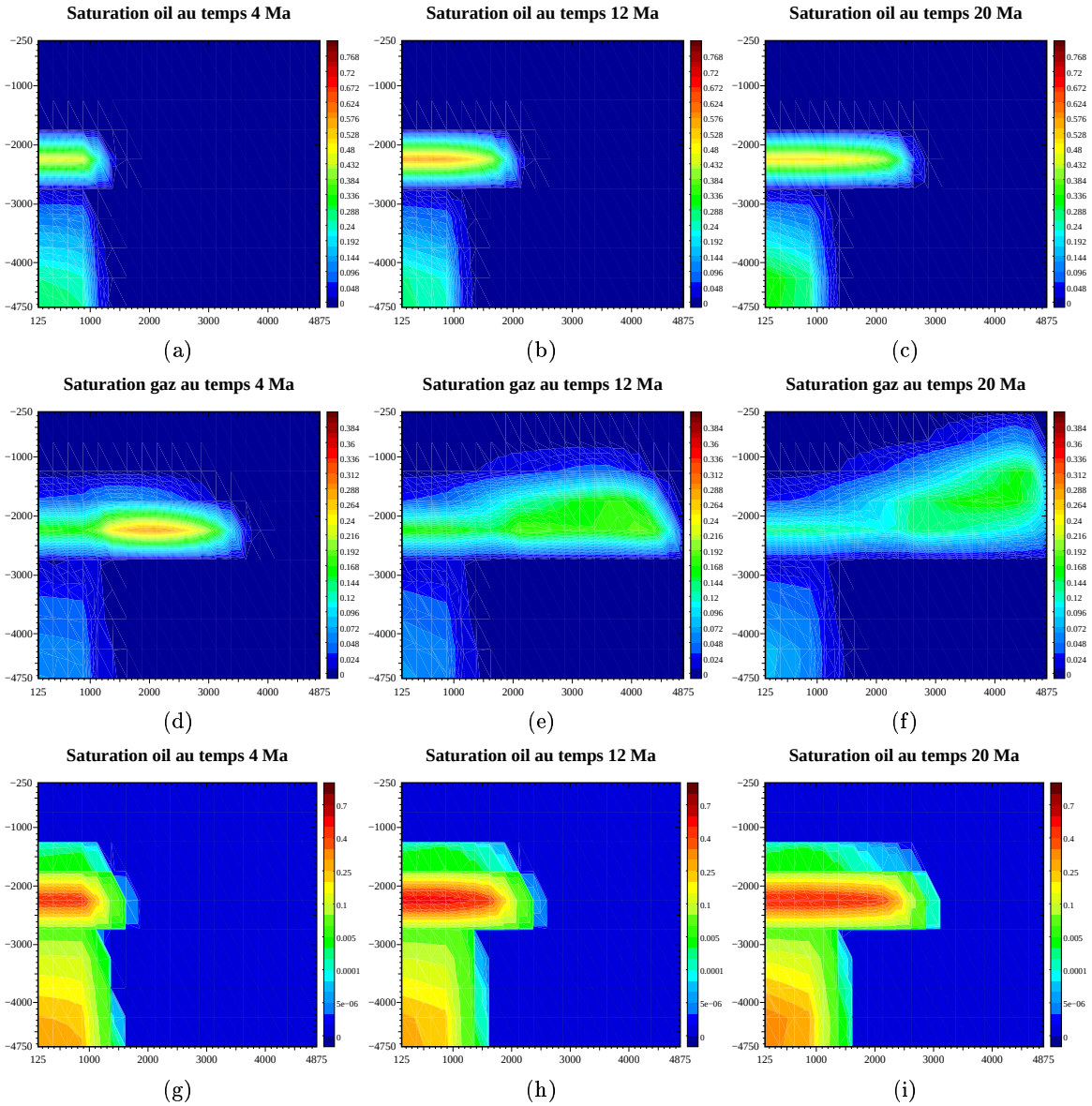


Figure 7.14: Saturations de l'huile et du gaz aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 20×10 sans raffinement en temps.

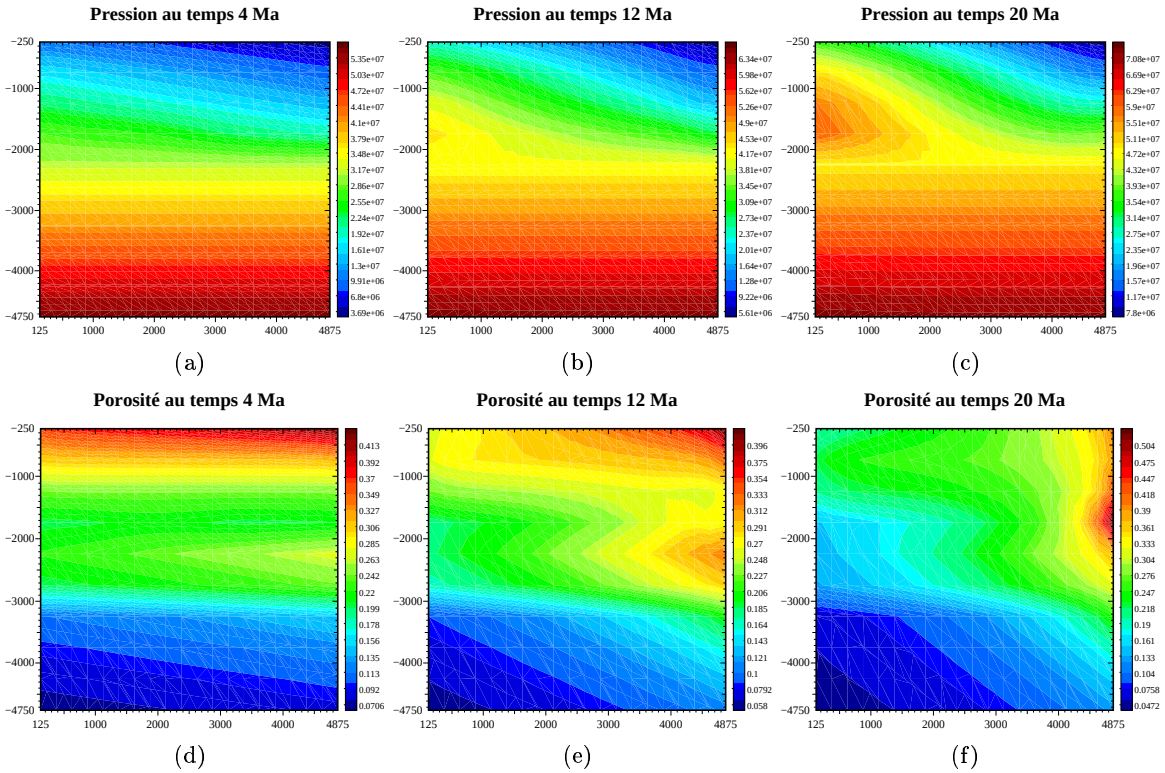


Figure 7.15: Pressions et porosités aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ et évolution du pas de temps dans le cas d'un maillage 20×10 et raffinement en temps.

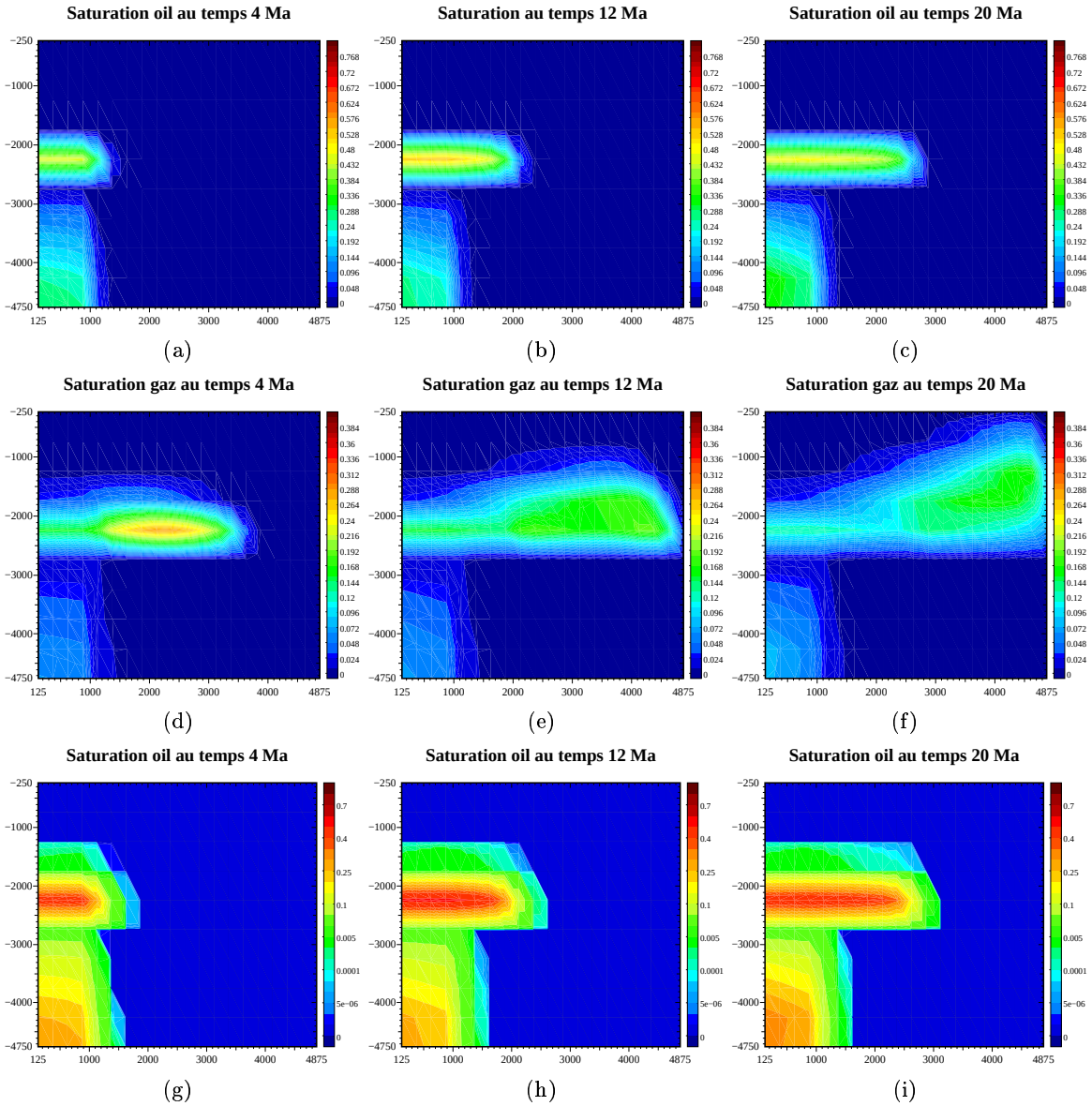
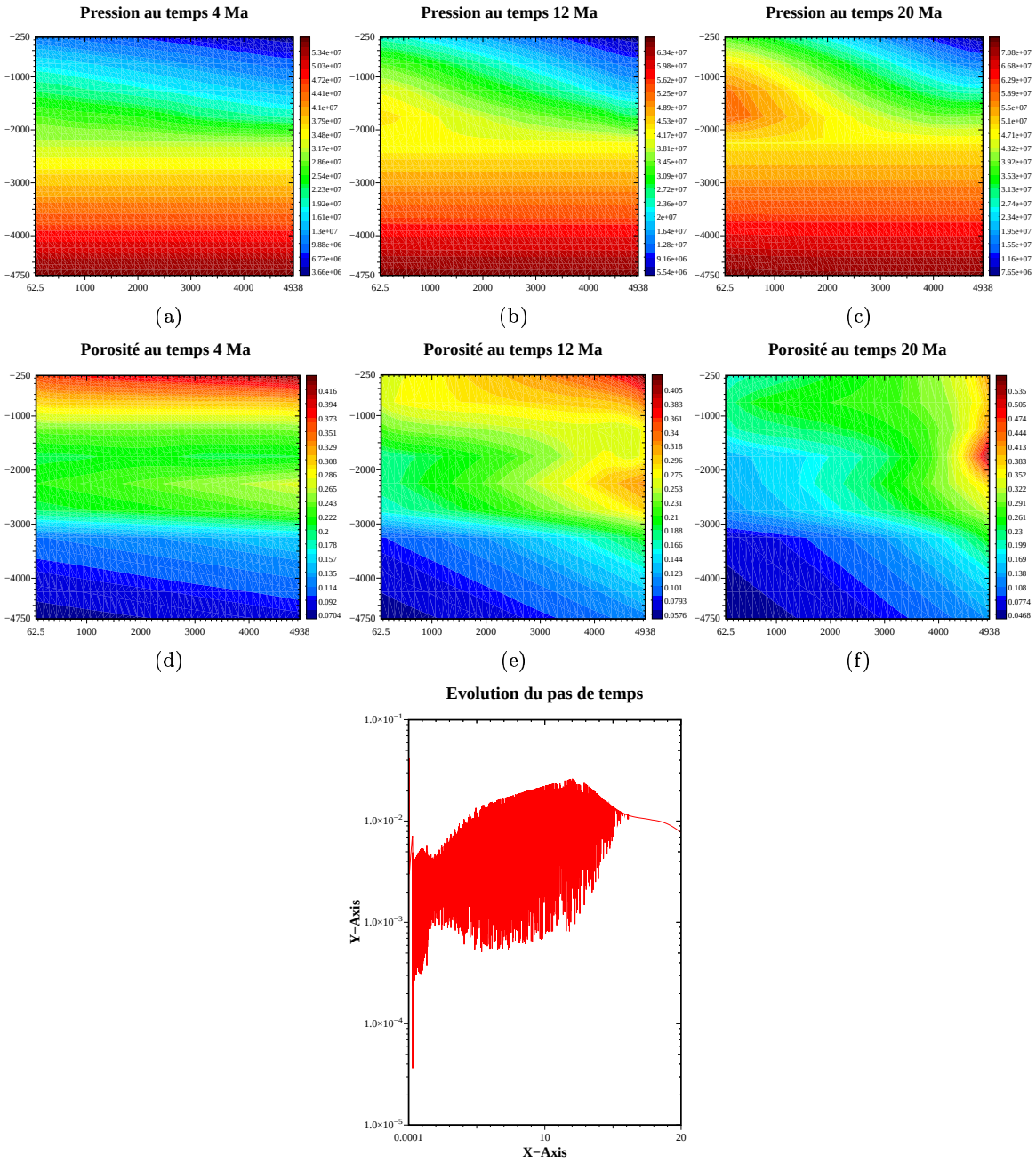


Figure 7.16: Saturations de l'huile et du gaz aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 20×10 et raffinement en temps.



(g) 674 reprises de pas de temps

Figure 7.17: Pressions et porosités aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ et évolution du pas de temps dans le cas d'un maillage 40×10 sans raffinement en temps.

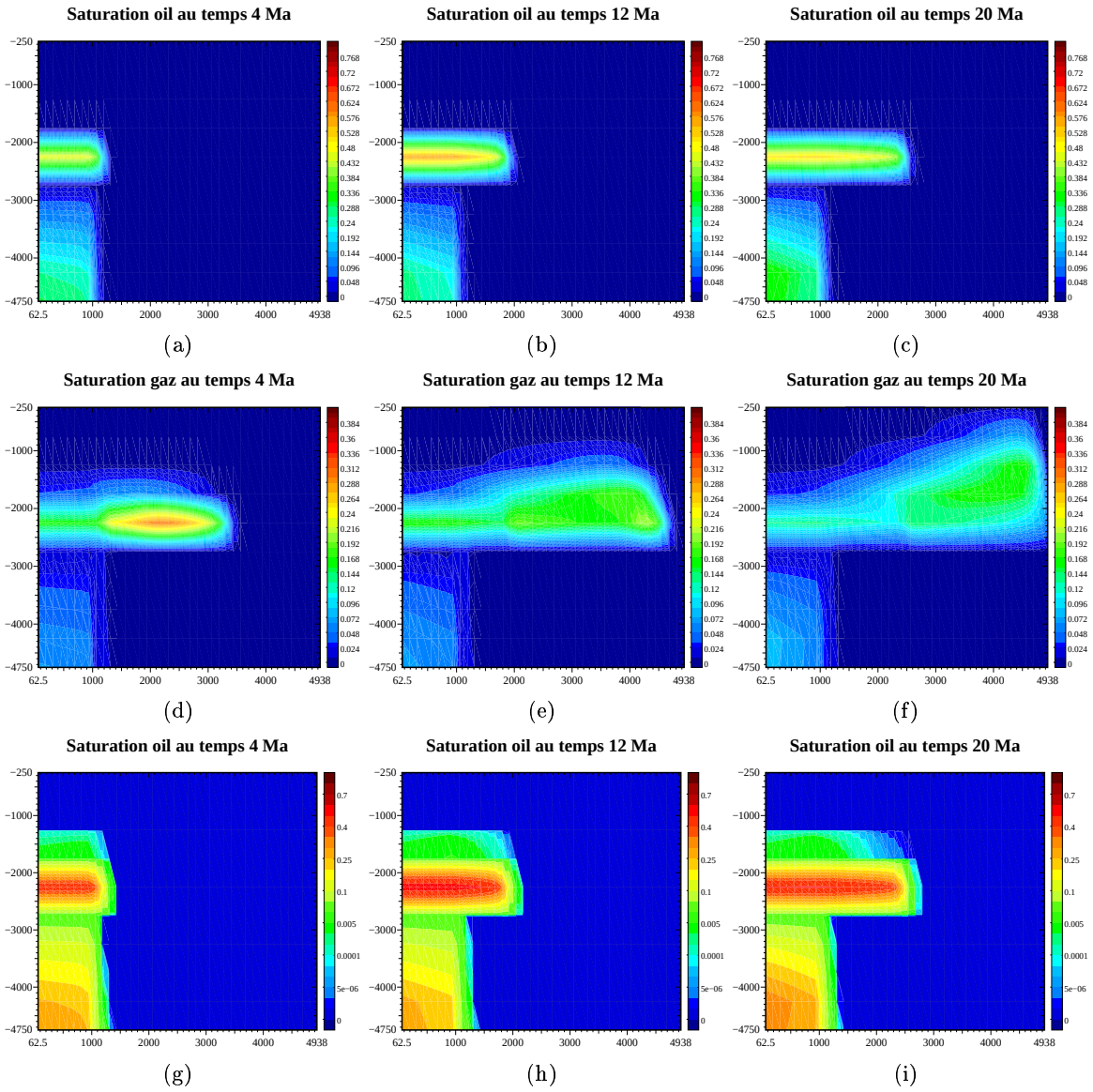


Figure 7.18: Saturations de l'huile et du gaz aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 40×10 sans raffinement en temps.

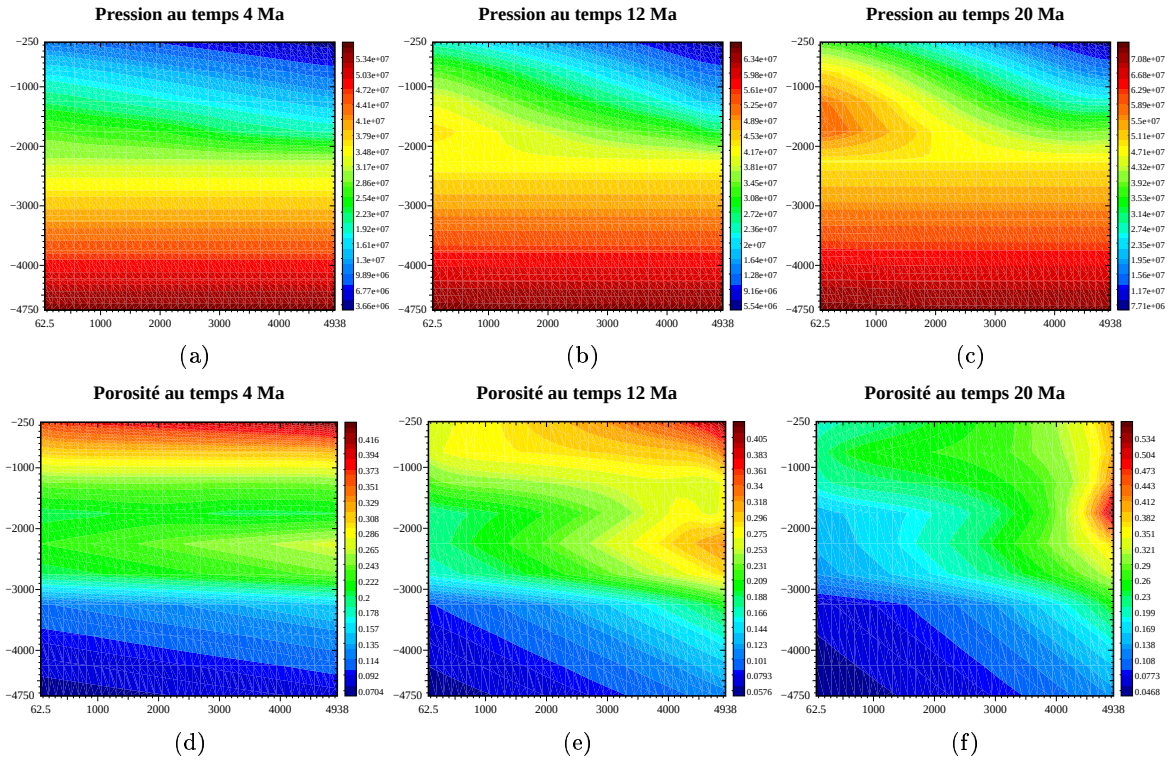


Figure 7.19: Pressions et porosités aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ et évolution du pas de temps dans le cas d'un maillage 40×10 et raffinement en temps.

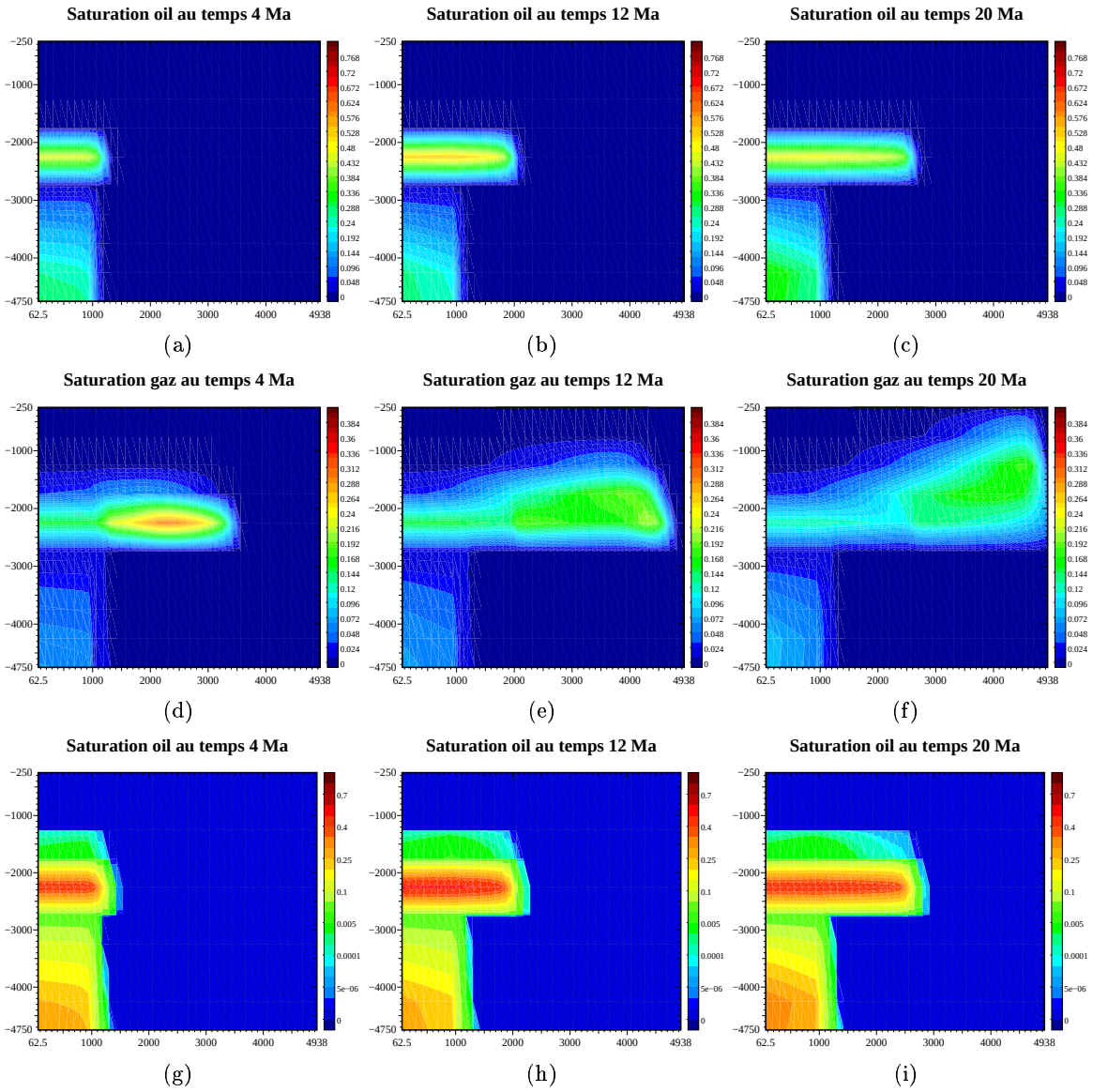
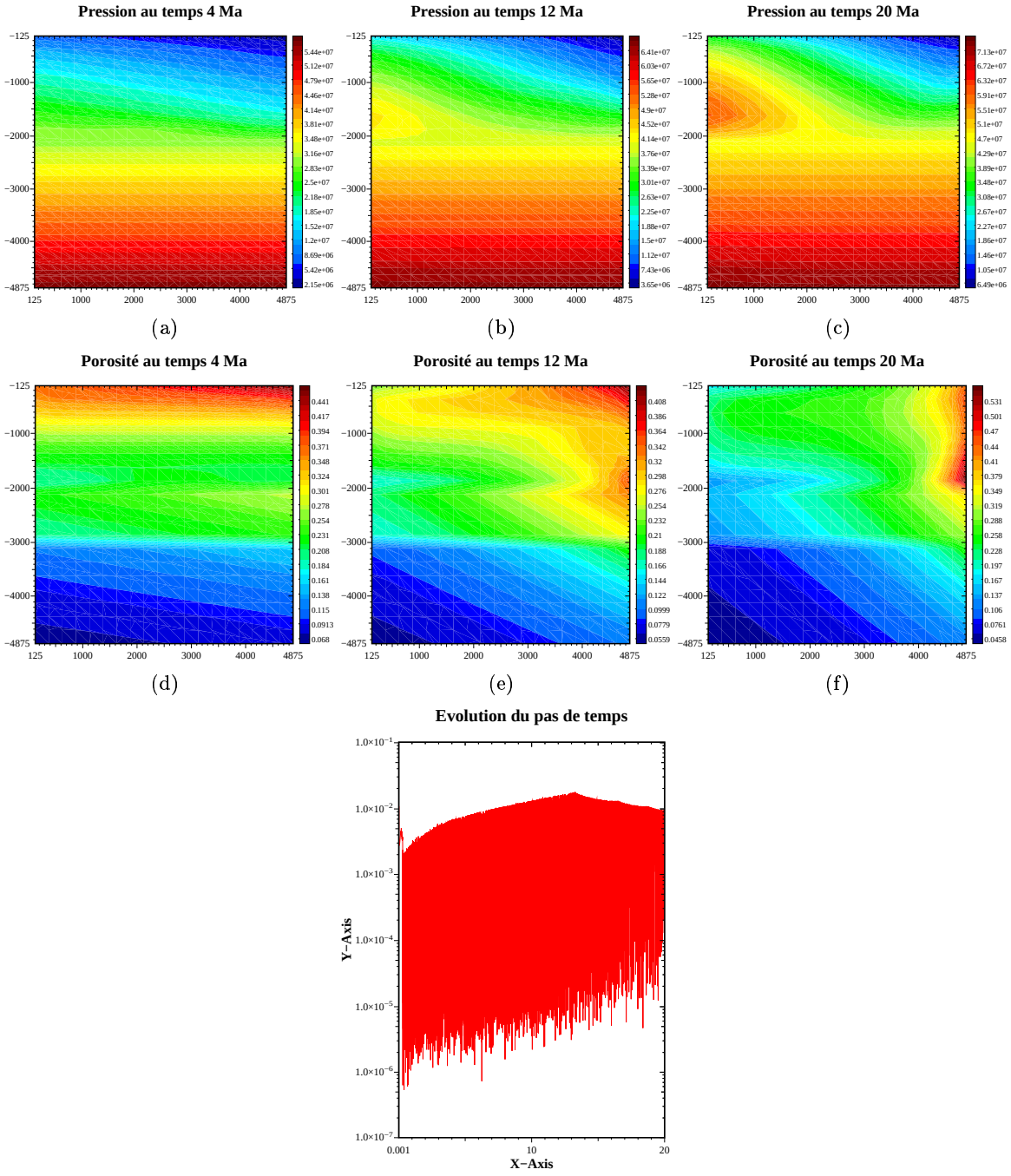


Figure 7.20: Saturations de l'huile et du gaz aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 40×10 et raffinement en temps.



(g) 5555 reprises de pas de temps

Figure 7.21: Pressions et porosités aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 20×20 sans raffinement en temps.

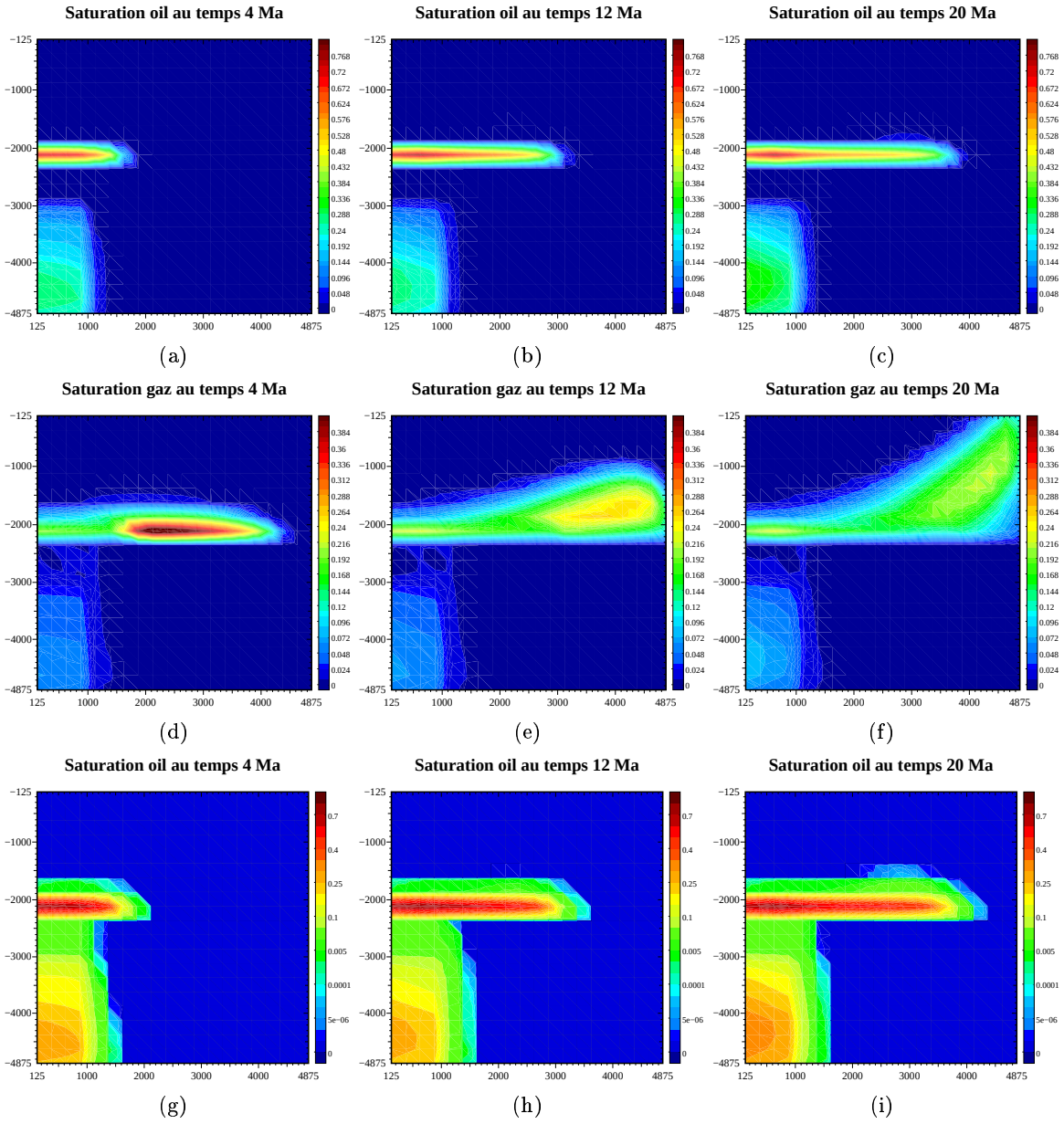


Figure 7.22: Saturations de l'huile et du gaz aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 20×20 sans raffinement en temps.

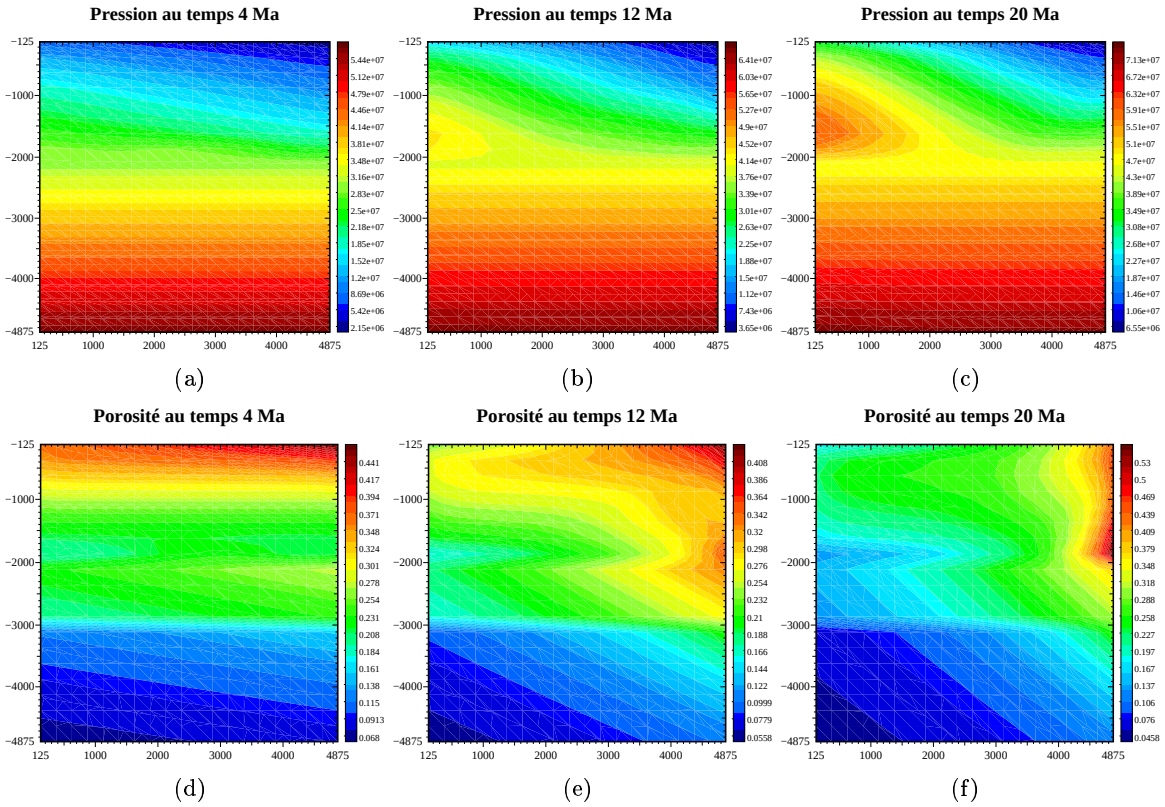


Figure 7.23: Pressions et porosités aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ et évolution du pas de temps dans le cas d'un maillage 20×20 et raffinement en temps.

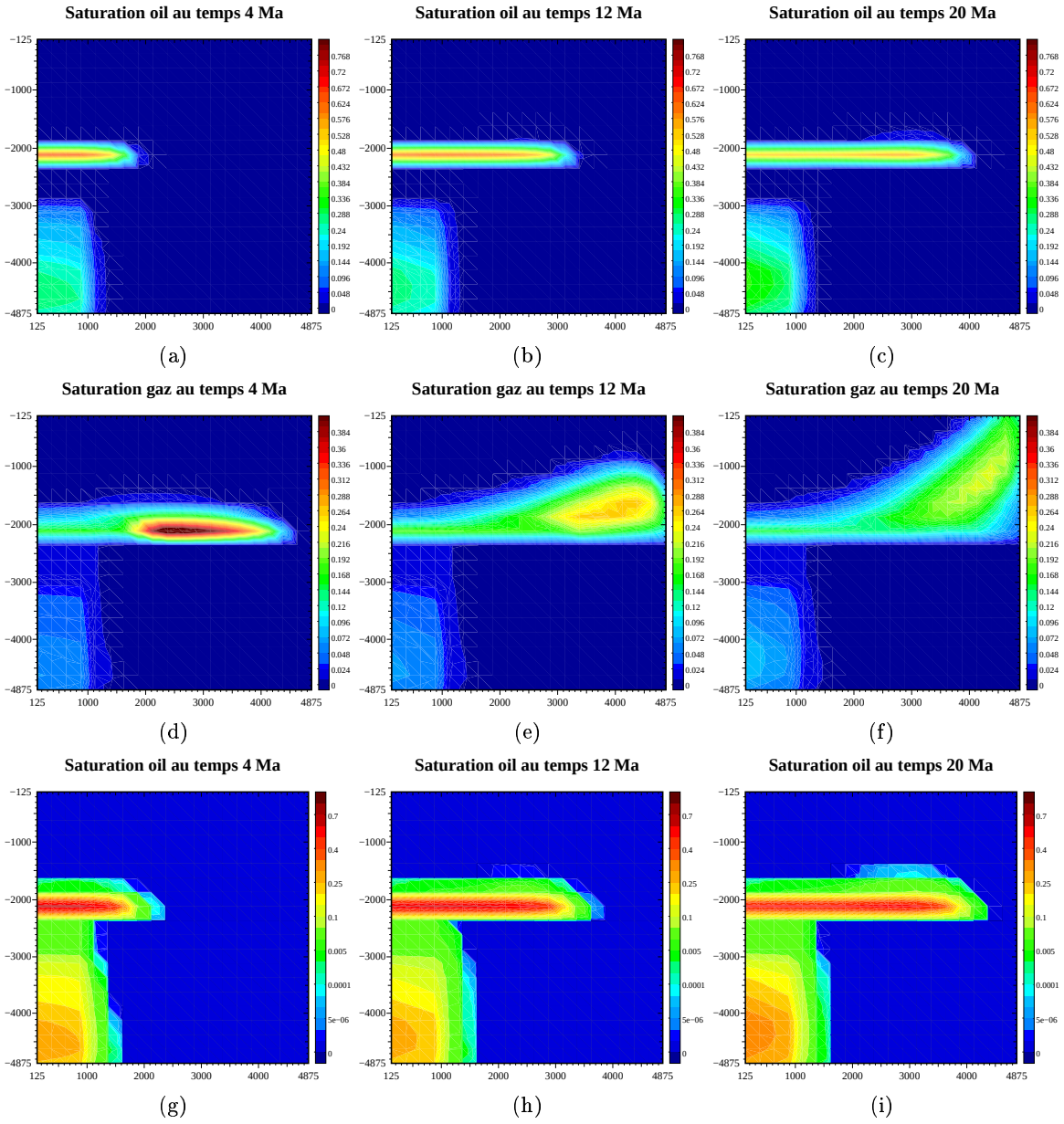
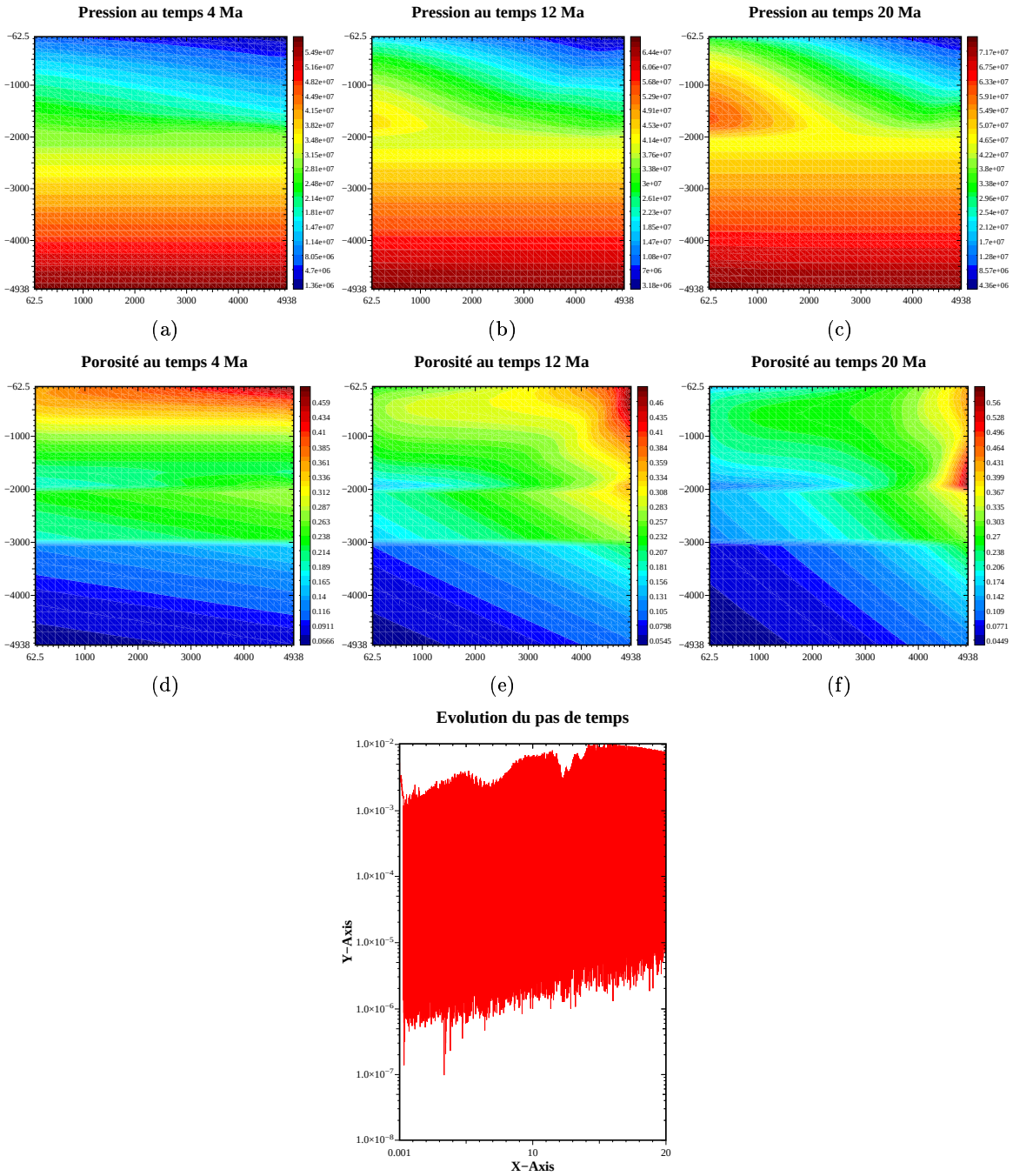


Figure 7.24: Saturations de l'huile et du gaz aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 20×20 et raffinement en temps.



(g) 13216 reprises de pas de temps

Figure 7.25: Pressions et porosités aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 40×40 sans raffinement en temps.

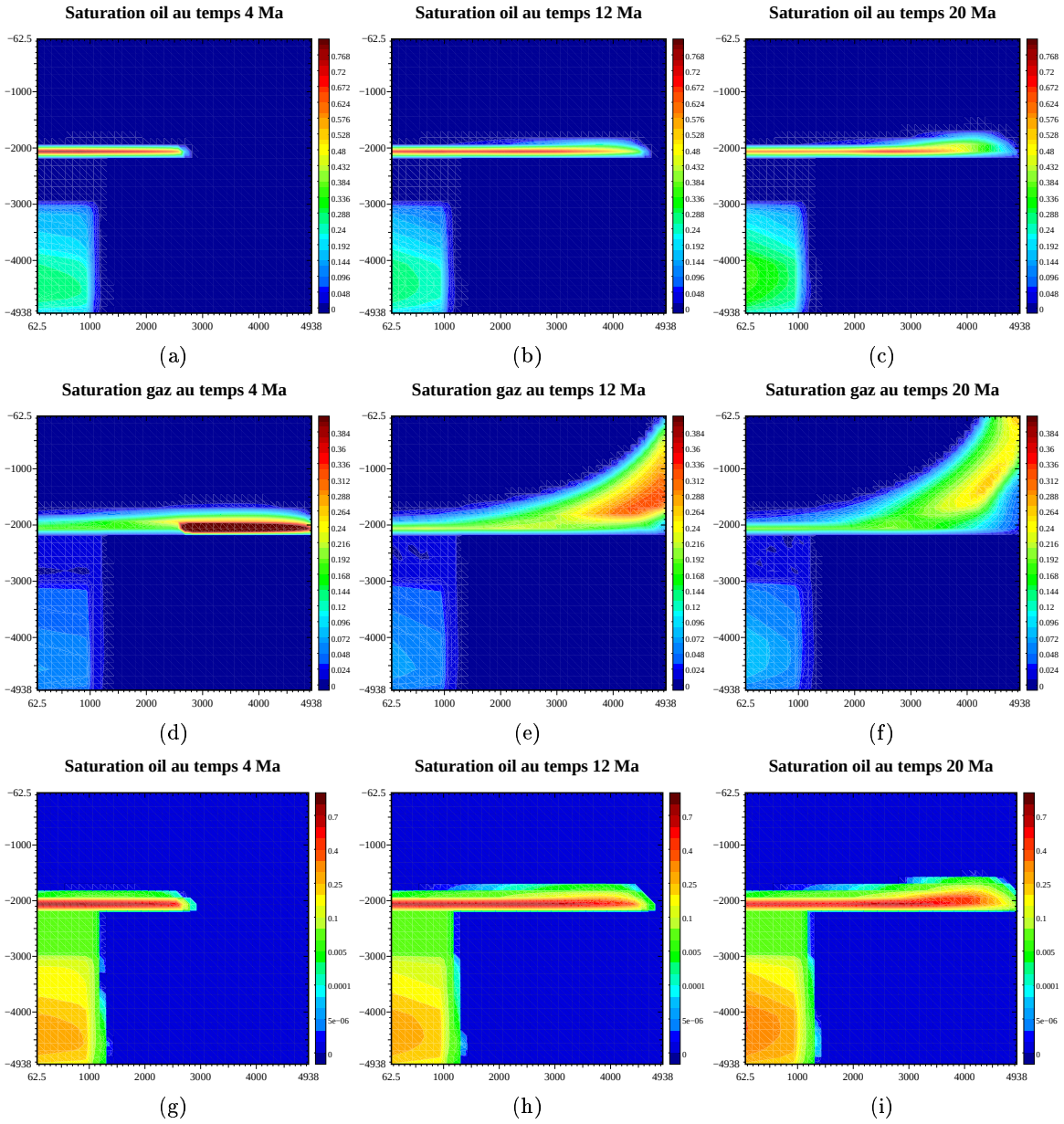


Figure 7.26: Saturations de l'huile et du gaz aux temps $4Ma$, $12Ma$, $20Ma$ dans le cas d'un maillage 40×40 sans raffinement en temps.

7.3 Motivation

Lorsque l'on effectue des simulations avec un pas de temps constant sur de longues périodes de temps, il apparaît plusieurs inconvénients. Afin de conduire la simulation à son terme, on est obligé de choisir un pas de temps de façon à ce que tous les critères physiques soient respectés au cours de la simulation. Or, ces critères varient d'un pas de temps à l'autre et d'un moment de la simulation à l'autre. On peut avoir pendant une longue période des écoulements lents (cas des écoulements dans l'argile au fond du bassin) qui peuvent se simuler avec de "grands" pas de temps, ou des écoulements très rapides (comme dans le drain) qui nécessitent de petits pas de temps. Or, comme on veut exécuter toute la simulation, le pas de temps à imposer est celui lié aux écoulements dans le drain. De ce fait, on génère des calculs superflus pour simuler les écoulements dans l'argile avant leur arrivée dans le drain. De plus, cette situation est réalisable si l'on connait à l'avance le pas de temps nécessaire pour les écoulements dans le drain. Au vu de la complexité de la physique rencontrée, il est illusoire de trouver le bon pas de temps du premier coup! (si on le pouvait, le pas adaptatif serait idéal puisque l'on connaîtrait celui-ci à tout instant. Comme on le verra plus loin, ce n'est pas tout à fait le cas...). Tous ces phénomènes imposent donc que le pas de temps s'adapte au cours du temps afin d'éviter au maximum les calculs superflus. On présente donc, dans ce chapitre, différentes techniques pour réduire ces calculs.

7.4 Mise en œuvre d'un pas adaptatif

7.4.1 Une adaptation empirique

Dans ce paragraphe, on présente la méthode de pas de temps adaptatif utilisée dans le simulateur TEMISCOMP, qui s'inspire de celle présentée dans la thèse d'Isabelle Faille [31]. Cette stratégie de pas de temps est dite "empirique" au sens où elle utilise des critères donnés et adaptés par l'utilisateur en fonction de la physique rencontrée. On décrit ci-dessous l'algorithme mis en œuvre pour le pas adaptatif.
Si la résolution de l'équation en pression par la méthode de Newton n'a pas convergé, on annule l'itération en temps et on la recommence en divisant le pas de temps par deux. Dans le cas de convergence de celui-ci, on calcule les nouvelles masses. Si celles-ci deviennent négatives (en dessous d'un seuil laissé à la discrétion de l'utilisateur) on divise le pas de temps par deux et on recommence l'itération. Dans l'autre cas, on calcule les saturations de chaque phase en vérifiant qu'elles sont bien comprises entre zéro et un, à epsilon près (sinon, on divise le pas de temps par deux et on recommence l'itéré en temps). Une fois tous ces critères vérifiés, on cherche à prédire le pas de temps suivant. Pour cela, on regarde la valeur maximale des variations des saturations. Si celle-ci est plus grande que la valeur seuil fixée par l'utilisateur, on estime que le flux au pas de temps suivant sera rapide, on divise le pas de temps par deux, sans recommencer celui-ci. Dans le cas contraire, on multiplie le pas de temps par 1.2 afin de l'augmenter. Cette prédiction de pas de temps se fait par phase. Le pas de temps que l'on retient est le plus petit de tous ces pas de temps. Enfin, on contrôle que le nouveau pas de temps prédit n'est ni trop grand, ni trop petit en le comparant avec les pas de temps maximal et minimal fixés par l'utilisateur. On schématise cette description ci-dessous.

Le calcul du nouveau pas de temps s'effectue de la manière suivante:

$$\begin{cases} \Delta t_\alpha := \dfrac{\Delta t}{2} & \text{si } \ \Delta S_\alpha \geq \Delta S_{\text{seuil}} \\ \Delta t_\alpha := 1.2 * \Delta t & \text{sinon} \end{cases}$$

puis $\Delta t = \min\limits_{\alpha=1,\ldots,n_\alpha} \{\Delta t_\alpha\}$
Cette prédiction de pas de temps s'intègre au schéma global suivant:

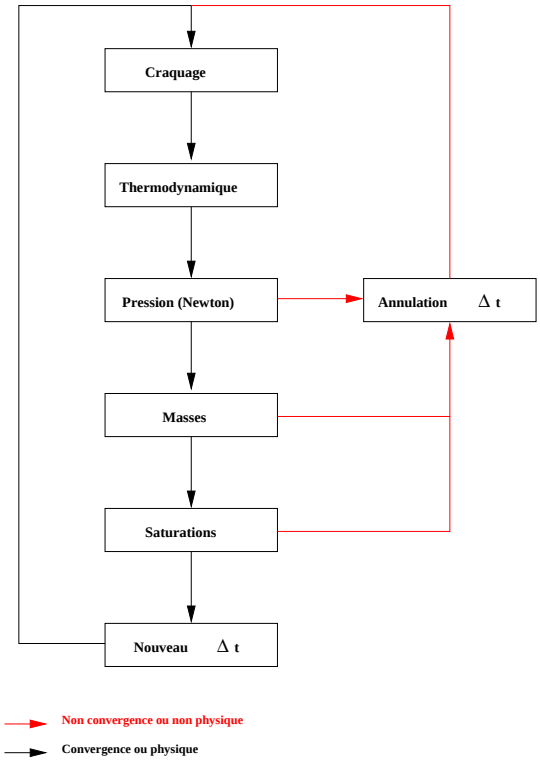


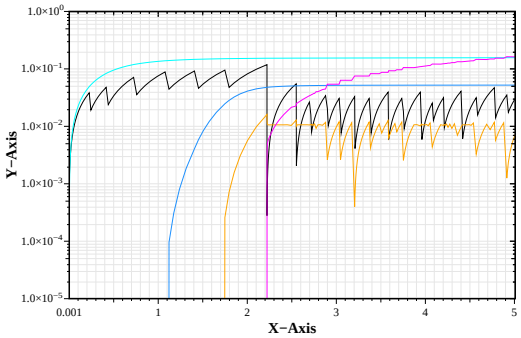
Figure 7.27: Algorithme du pas adaptatif

7.4.2 Limites et inconvénients de ce pas de temps

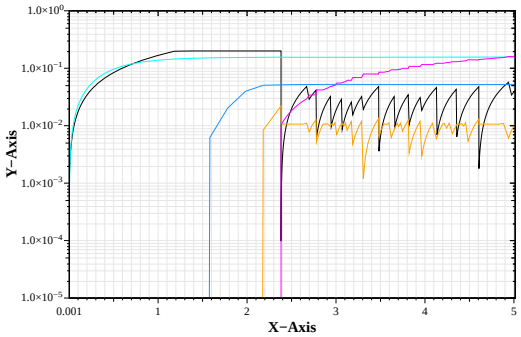
La mise en œuvre d'un tel pas de temps a permis un gain important en temps de calcul par rapport à un pas de temps constant: il permet de diviser le temps d'attente par trois environ. Ceci confirme l'intêret de l'étude d'une gestion du pas de temps. Cependant, des remarques et inconvénients sont apparus avec ce type de pas de temps.

- Le critère de prédiction du pas de temps est basé sur les saturations alors que les inconnues du modèle sont les masses (à l'exception des perméabilités relatives qui font intervenir les saturations).
- La deuxième remarque se rapporte à la piètre prise en compte du front de saturation au niveau du drain: lors du passage de la zone argileuse à la zone sableuse et lors de la migration verticale des hydrocarbures dans ce dernier. Ceci se visualise sur les graphiques 7.28 par des chutes de pas de temps.
- La dernière remarque porte sur le choix des critères de variation du pas de temps. En effet, on divise par deux le pas de temps si les critères physiques ne sont pas respectés, on multiplie par un cœfficient "qui marche" pour augmenter le pas de temps ou on divise par deux (sans annulation du pas de temps) si on "estime" que les vitesses de phase seront grandes au prochain pas de temps.

Ces trois points ont motivé la proposition d'une nouvelle stratégie de pas de temps qui est présentée au paragraphe suivant.



(a) critère de 0.007



(b) critère de 0.02

Figure 7.28: Représentation logarithmique du pas de temps (en noir) et de l'évolution de la saturation de l'huile dans la maille de roche mère (bleu), dans l'argile (bleu foncé), dans le drain (orange et rose) sur $5Ma$ avec trois couches géologiques pour deux critères différents sur les variations de saturation dans la prédiction du pas de temps.

7.5 Nouvelle stratégie de pas de temps

7.5.1 Origine

Le critère de pas adaptatif est basé sur les constatations théoriques des équations hyperboliques. Prenons par exemple l'équation scalaire hyperbolique linéaire en dimension un suivante:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a\frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (a > 0) \tag{7.1}$$

On sait que la condition *C.F.L.* est $\Delta t \leq a\Delta x$, ce qui signifie que le pas de temps ne peut pas être plus grand que le pas d'espace multiplié par la vitesse de déplacement. Le principe est le même pour les dimensions supérieures puisque les critères théoriques de *C.F.L.* sont basés sur les fonctions de flux. Ces critères sont difficiles à mettre en exergue (*cf.*[38]).

7.5.2 Présentation de la stratégie

Comme dans le cas empirique, si la résolution de l'équation en pression par la méthode de Newton ne converge pas ou que des masses négatives apparaissent, on divise le pas de temps en deux et on recommence l'itération en temps. La différence vient dans la prédiction du pas de temps pour l'itération suivante. On va définir un critère sur les masses. On part de l'équation de conservation de la masse suivante:

$$\frac{\partial m_j}{\partial t} = div\ Flux_j.$$

On va chercher à imposer un critère sur les variations de masses, ce qui revient à imposer le critère sur les flux. La variation de masses d'un pas de temps à un autre s'écrivant $|m_j^{n+1} - m_j^n|$, on obtient le critère suivant:

$$\max_{V\in\Sigma} |\frac{\Delta t}{mesV} * \int_{\partial V} Flux_j^n.\vec{n}| \leq \epsilon,$$

où

- Σ représente le nombre total des mailles du bassin,
- ϵ paramètre laissé à la discrétion de l'utilisateur.

Il devient alors facile d'évaluer le nouveau pas de temps, il suffit de prendre comme valeur: $\Delta t_j = \max_{V\in\Sigma} \frac{\epsilon * mesV}{\int_{\partial V} Flux_j^n.\vec{n}}$ puis $\Delta t = \min_{j=1,\ldots N} \Delta t_j$ par exemple.
On va maintenant détailler le flux $Flux_j^n$. Deux possibilités sont envisageables.

Une première possibilité pour les flux (technique I)

Cette première possibilité consiste à reprendre les flux que l'on a calculés lors de l'évaluation des masses. Ces flux s'écrivent comme suit:

$$Flux_j^n = \sum_{\alpha=o,g,w} (C_j^\alpha)^n \underline{\underline{K}}^n \rho_\alpha^n \frac{kr_\alpha^n}{\mu_\alpha^n} \left(\vec{\nabla} P^{n+1} - \rho_\alpha^n \vec{g} \right).$$

où l'indice n indique les quantités calculées lors de l'itération précédente ou au début du pas de temps.
L' avantage d'utiliser ce flux est qu'aucun calcul supplémentaire n'est nécessaire.
On présente maintenant la deuxième méthode de calcul des flux, mais qui est plus conséquente à mettre en œuvre.

Une deuxième possibilité pour les flux (technique II)

Au lieu de reprendre les flux calculés lors de l'évaluation des masses, comme on connaît la valeur des saturations à la fin du pas de temps, l'idée est d'utiliser ces saturations pour calculer les flux et ainsi déterminer un nouveau pas de temps. Ces flux s'écrivent alors:

$$Flux_j^n = \sum_{\alpha=o,g,w} (C_j^\alpha)^n \underline{\underline{K}}^n \rho_\alpha^n \frac{kr_\alpha^{n+1}}{\mu_\alpha^n} \left(\vec{\nabla} P^{n+1} - \rho_\alpha^n \vec{g} \right).$$

L'inconvénient majeur de cette technique est la mise à jour des flux (kr_α) et du décentrage amont des pétroliers en fonction des quantités nouvellement évaluées. Une mise à jour des coefficients thermodynamiques est possible s'ils ne dépendent que de la pression. Dans le cas contraire, il faudra aussi tenir compte des masses qui sont issues du craquage primaire au pas de temps suivant.

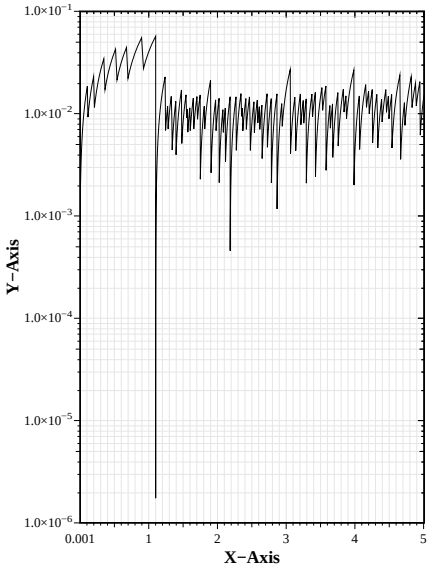
7.5.3 Simulation

Descriptif succinct de la simulation

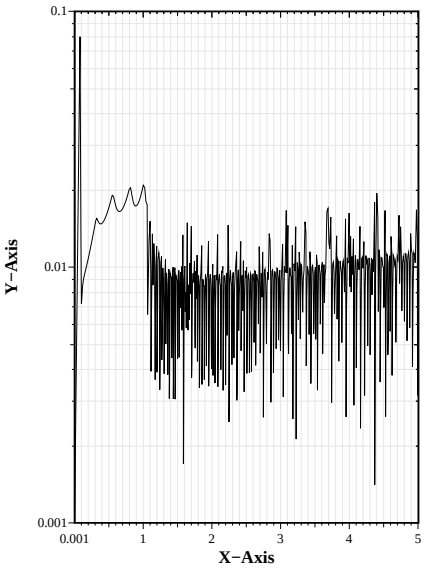
Pour cette simulation, on se place dans un cas diphasique eau-huile incompressible, avec un seul constituant présent dans la phase hydocarbure. Le bassin est constitué de deux couches d'argile séparées par une couche sableuse qui représente le drain. Le but de cette simulation est de présenter l'amélioration, dans un cas simple, de la nouvelle stratégie de prédiction du pas de temps par rapport à la prédiction empirique. La simulation se déroule sur $5Ma$.

Résultats, commentaires et conclusions

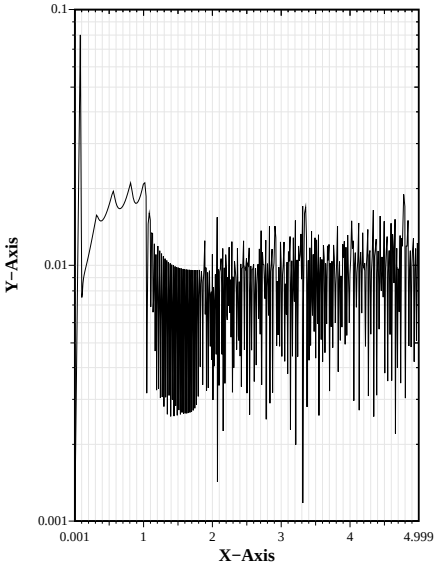
La figure 7.29 présente les trois techniques de pas de temps sur la même simulation. On voit que le pas de temps empirique (figure 7.29(a)) présente une chute de pas de temps que ne présente pas les deux nouvelles techniques de prédiction de pas de temps (figure 7.29(b) et 7.29(c)). On remarque aussi que les oscillations sont plus régulières sur les nouveaux pas de temps adaptatifs . A la vue des graphiques, on pourrait penser que le pas de temps empirique, paraissant moins oscillant que les deux autres techniques, permet de terminer la simulation plus rapidement. En fait, le temps de simulation de ces $5Ma$ pour le pas de temps empirique est de 195 secondes contre 177 secondes pour le pas de temps calculé par la technique I et 231 secondes pour le pas de temps calculé par la technique II. La différence de temps vient du nombre de pas de temps recommencés. Il est de 104 pour le pas de temps empirique, de 12 pour celui de la technique I et unique pour la technique II. On montre par cet exemple que la nouvelle approche de prédiction du pas de temps est plus efficace que celle empirique. Toutefois, la deuxième technique est pénalisée puisque la structure du programmme n'a pas été prévue ni optimisée pour ce cas là.



(a) pas de temps empirique



(b) pas de temps technique I



(c) pas de temps technique II

Figure 7.29: Représentations logarithmiques du pas de temps sur $5Ma$ dans un bassin avec trois couches géologiques pour les différentes stratégies mises en œuvre.

7.6 Critique sur la mise en œuvre

La discrétisation en espace de ce schéma est un schéma Volumes-Finis différences finies 5 points (VF5).
Le pas de temps développé dans le programme est adapatif, *i.e.* que si les conditions de convergence de Newton pour la résolution de l'équation en pression, du principe du maximum pour les saturations ou de positivité des masses ne sont pas respectées, on annule le pas de temps et on le recommence en divisant la longueur du pas de temps par deux. *A contrario*, on augmente le pas de temps à l'aide de la prédiction de pas de temps que l'on vient de proposer. Lorsque l'on annule un pas de temps, on recommence la simulation pour tout le domaine alors que seule une zone du domaine est en situation critique, et que la solution calculée dans le reste du domaine est acceptable. C'est le cas, par exemple, lorsque le front de saturation arrive au niveau des mailles du drain juste après la couche argileuse. La différence des milieux induit une augmentation de la vitesse de filtration de chaque phase qui a pour conséquence de générer des masses négatives. Des annulations successives de pas de temps apparaissent qui se manifestent par des pics sur les graphiques, comme on l'a constaté à la simulation 7.29. Ces annulations deviennent très coûteuses en temps de calcul lorsque l'on augmente le nombre de mailles du domaine. Une solution est de ne recommencer les calculs que dans la zone critique du domaine, en considérant que la solution obtenue dans l'autre partie du domaine est acceptable. Un deuxième inconvénient pour la méthode du pas de temps adaptatif est que l'on a une gestion globale de celui-ci. Une gestion locale de ce pas de temps diminuerait le temps calcul. On rejoint alors l'idée proposée précédemment. On présente au paragraphe suivant la solution retenue et mise en œuvre.

7.7 Schéma du raffinement local en temps

On introduit tout d'abord, les notations suivantes:

- Ω représente le domaine global de discrétisation,
- Ω_t représente le domaine de raffinement local qui évolue au cours du temps,
- Δt est le pas de temps de discrétisation du domaine global,
- $\Delta t_2 = \dfrac{\Delta t}{k}$ ($k \in \mathbb{N}^*$ indice de raffinement) est le pas de temps pour le raffinement local.

Le principe de ce raffinement local en temps est le suivant:
on commence par calculer la solution sur le maillage de discrétisation, puis on repère les mailles qui "posent des problèmes" (on a retenu ici comme critère le fait que les masses soient négatives dans la maille). On définit ainsi un domaine que l'on va raffiner que l'on note Ω_t (*cf.* paragraphe suivant pour la stratégie de choix du domaine de raffinement). Afin que le schéma reste conservatif, on impose les flux de chaque constituant sur les bords du domaine Ω_t. En effet, l'hypothèse retenue pour ce raffinement local du pas de temps est que la solution calculée en dehors du domaine Ω_t soit physiquement acceptable et donc que les flux aux interfaces de ces volumes sont acceptables. Ceci montre l'importance de la stratégie du choix du domaine que l'on doit retenir "suffisamment grand" afin que la solution soit acceptable à l'extérieur de cette zone, mais cependant point trop vaste pour assurer une certaine efficacité à la méthode. Les flux imposés sont donc ceux calculés avant l'appel au module de raffinement local du pas de temps.

La discrétisaton temporelle du système sur les deux domaines Ω_t et $\Omega \setminus \Omega_t$ s'énonce:

$$
\text{sur } \Omega \setminus \Omega_t \begin{cases}
m_j^{n+\frac{1}{2}} = m_j^n + \Delta t\, x_0 \displaystyle\sum_{l=1}^{L} a_{lj}^{n+\frac{1}{2}} x_l^{n+\frac{1}{2}} + \sum_{j=1}^{N_c} b_{ij}^{n+\frac{1}{2}} m_i^{n+\frac{1}{2}} \quad j = 1, \dots, N_c \\[2ex]
m_w^{n+1} = m_w^n + \Delta t\, div\Big(\underline{\underline{K}}^n (T_w^w)^n (\vec{\nabla} P^{n+1} - \rho_w^n \vec{g})\Big), \\[2ex]
m_j^{n+1} = m_j^{n+\frac{1}{2}} + \Delta t\, div\Big(\underline{\underline{K}}^n \displaystyle\sum_{\alpha=1}^{N_p} (T_j^\alpha)^{n,n+\frac{1}{2}} (\vec{\nabla} P^{n+1} - \rho_\alpha^{n+\frac{1}{2}} \vec{g})\Big) \quad j = 1, \dots, N_c \\[2ex]
\dfrac{m_w^{n+1}}{\rho_w^{n+1}} + \displaystyle\sum_{\alpha=1}^{N_p} \sum_{j=1}^{N_c} \frac{(\beta_j^\alpha)^{n+\frac{1}{2}}\, m_j^{n+1}}{(\rho_j^\alpha)^{n+1}} = \Phi^{n+1},
\end{cases}
$$

$$
\text{sur } \Omega_t \begin{cases}
\text{pour } l = 1, \dots, k \\[2ex]
m_j^{n+\frac{2l-1}{2k}} = m_j^{n+\frac{l-1}{k}} + \Delta t_2\, x_0 \displaystyle\sum_{l=1}^{L} a_{lj}^{n+\frac{1}{2}} x_l^{n+\frac{1}{2}} + \sum_{j=1}^{N_c} b_{ij}^{n+\frac{1}{2}} m_i^{n+\frac{1}{2}} \quad j = 1, \dots, N_c \\[2ex]
m_w^{n+\frac{l}{k}} = m_w^{n+\frac{l-1}{k}} + \Delta t_2\, div\Big(\underline{\underline{K}}^{n+\frac{l-1}{k}} (T_w^w)^{n+\frac{l-1}{k}} (\vec{\nabla} P^{n+\frac{l}{k}} - \rho_w^{n+\frac{l-1}{k}} \vec{g})\Big), \\[2ex]
m_j^{n+\frac{l}{k}} = m_j^{n+\frac{2l-1}{2k}} + \Delta t_2\, div\Big(\underline{\underline{K}}^{n+\frac{l-1}{k}} \displaystyle\sum_{\alpha=1}^{N_p} (T_j^\alpha)^{n,n+\frac{2l-1}{2k}} (\vec{\nabla} P^{n+\frac{l}{k}} - \rho_\alpha^{n+\frac{2l-1}{2k}} \vec{g})\Big) \quad j = 1, \dots, N_c \\[2ex]
\dfrac{m_w^{n+\frac{l}{k}}}{\rho_w^{n+\frac{l}{k}}} + \displaystyle\sum_{\alpha=1}^{N_p} \sum_{j=1}^{N_c} \frac{(\beta_j^\alpha)^{n+\frac{2l-1}{2k}}\, m_j^{n+\frac{l}{k}}}{(\rho_j^\alpha)^{n+\frac{l}{k}}} = \Phi^{n+\frac{l}{k}}, \\[2ex]
\Big(\underline{\underline{K}}^{n+\frac{l-1}{k}} \displaystyle\sum_{\alpha=1}^{N_p} (T_j^\alpha)^{n,n+\frac{2l-1}{2k}} (\vec{\nabla} P^{n+\frac{l}{k}} - \rho_\alpha^{n+\frac{2l-1}{2k}} \vec{g})\Big).\vec{n} = \\
\qquad \Big(\underline{\underline{K}}^n \displaystyle\sum_{\alpha=1}^{N_p} (T_j^\alpha)^{n,n+\frac{1}{2}} (\vec{\nabla} P^{n+1} - \rho_\alpha^{n+\frac{1}{2}} \vec{g})\Big).\vec{n} \quad j = 1, \dots, N_c \ \text{ sur } \ \partial\Omega_t, \\[2ex]
\Big(\underline{\underline{K}}^{n+\frac{l-1}{k}} (T_w^w)^{n+\frac{l-1}{k}} (\vec{\nabla} P^{n+\frac{l}{k}} - \rho_w^{n+\frac{l-1}{k}} \vec{g})\Big).\vec{n} = \Big(\underline{\underline{K}}^n (T_w^w)^n (\vec{\nabla} P^{n+1} - \rho_w^n \vec{g})\Big).\vec{n} \ \text{ sur } \ \partial\Omega_t.
\end{cases}
\tag{7.2}
$$

Remarque 19. *Pour faciliter l'écriture du schéma numérique de décomposition spatio-temporelle, on a supposé que le pas de temps du raffinement Δt_2 était un découpage fixe du pas de temps principal. Dans un premier temps, cette stratégie a été utilisée, mais elle s'est avérée trop coûteuse en temps de calcul puisque le découpage nécessaire du pas de temps était trop important (Δt_2 pouvait être jusqu'à 10 000 fois plus petit que Δt). Pour résoudre ce problème, on a utilisé la même stratégie de pas de temps adaptatif pour le pas de temps de la zone de raffinement que pour le pas de temps global. Cette prédiction de pas de temps n'est basée que sur les flux de la zone raffinée, le pas de temps maximal autorisé étant $\Delta t_2 = \dfrac{\Delta t}{k}$, $k \in \mathbb{N}^\star$, k fixé et petit (compris entre 2 et 5 en général).*

7.7.1 Critère de choix des zones à raffiner

Pour appliquer le schéma numérique présenté dans le paragraphe précédent, il faut déterminer le moment et les zones de raffinement local du pas de temps. Pour cela, on décide que, lors de la résolution de l'équation en pression, si la méthode de Newton ne converge pas, on annule le pas de temps, on divise la longueur du pas de temps par deux et on recommence globalement l'itération de pas de temps. Lorsque la méthode de Newton converge, on calcule les masses et les saturations en gardant en mémoire les mailles qui ne respectent pas les critères physiques (masses négatives, saturations négatives ou supérieure à l'unité). Le problème est de choisir la taille de la zone pour raffiner le pas de temps localement. Pour cela, on a découpé le domaine en zones (le nombre de zones est laissé à la discrétion de l'utilisateur). On commence par déterminer les zones dans lesquelles se situent les mailles à reprendre et on annule toutes les quantités calculées de cette zone. Du fait de l'utilisation du VF5 pour la discrétisation en espace, on a pris les quatre zones avoisinantes de la zone à raffiner selon le même principe de discrétisation de la méthode VF5. On suppose le domaine ainsi construit assez "vaste" pour le raffinement local, et hors de celui-ci la solution correctement calculée. Le schéma 7.30 présente une telle situation. Dans le paragraphe suivant, on présente l'algorithme de mise en œuvre du modèle (7.2).

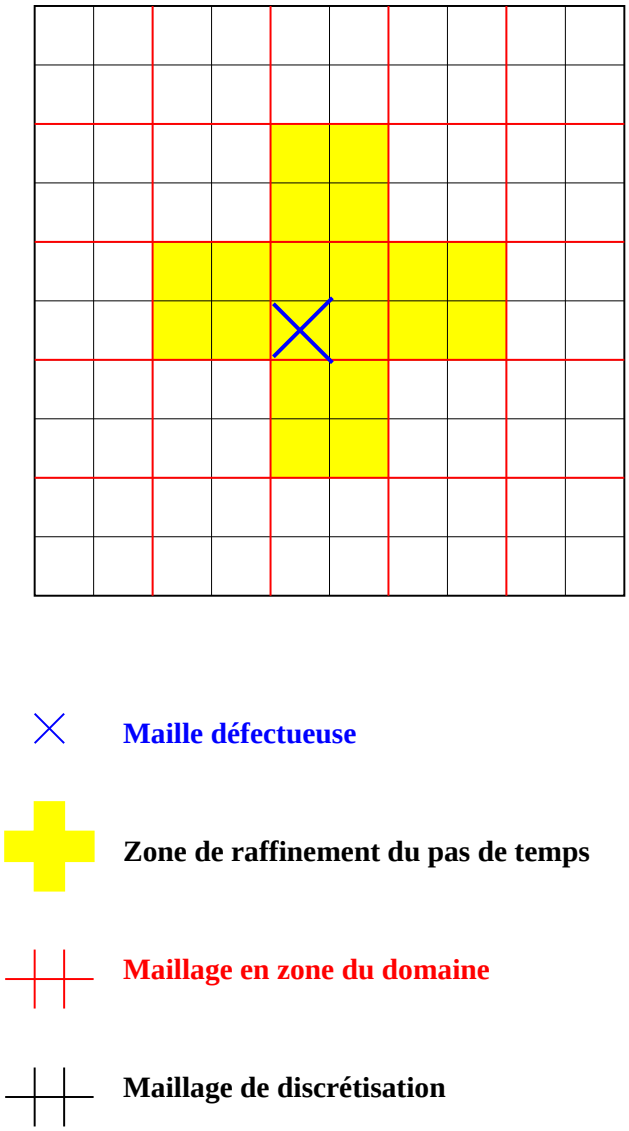


Figure 7.30: Représentation du découpage du domaine en zones avec une maille defectueuse présente et la zone associée pour le raffinement local du pas de temps.

7.7.2 Algorithme du schéma numérique

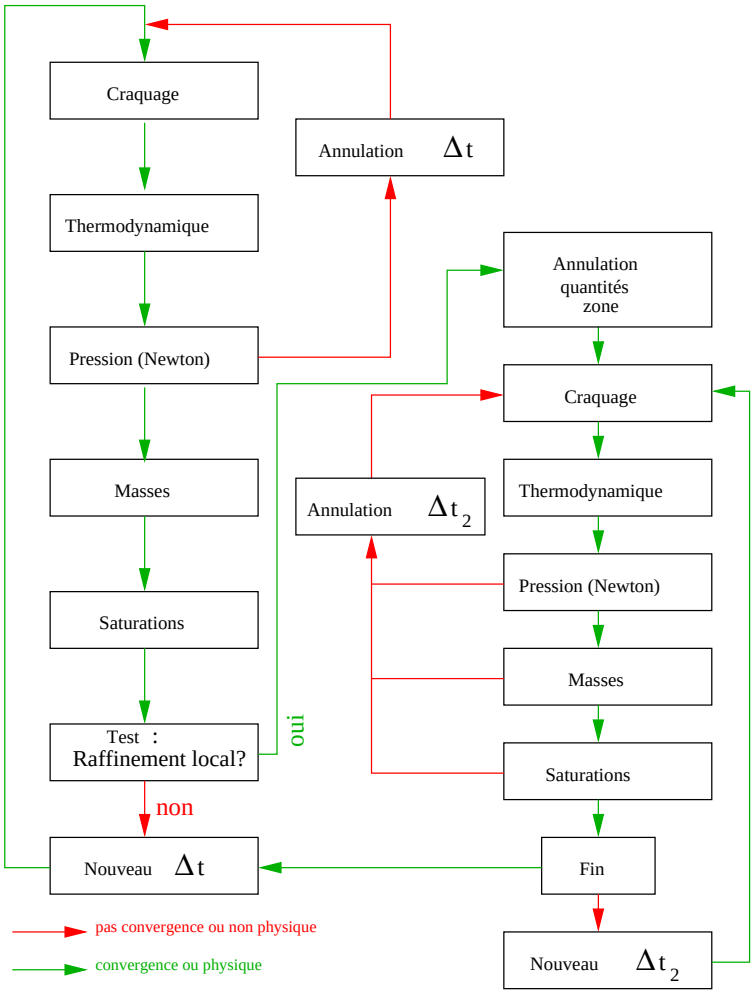


Figure 7.31: Algorithme de résolution d'un pas de temps dans le cas de raffinement local du pas de temps.

Remarque 20.
Pour faciliter la compréhension de l'algorithme, on ne présente que les tests et critères significatifs. La couleur rouge indique que le test sur le critère de convergence ou de validité de la grandeur physique a échoué et qu'il est nécéssaire d'annuler le pas de temps. Dans le cas de la couleur verte, le test est valide et l'on passe à l'étape suivante.

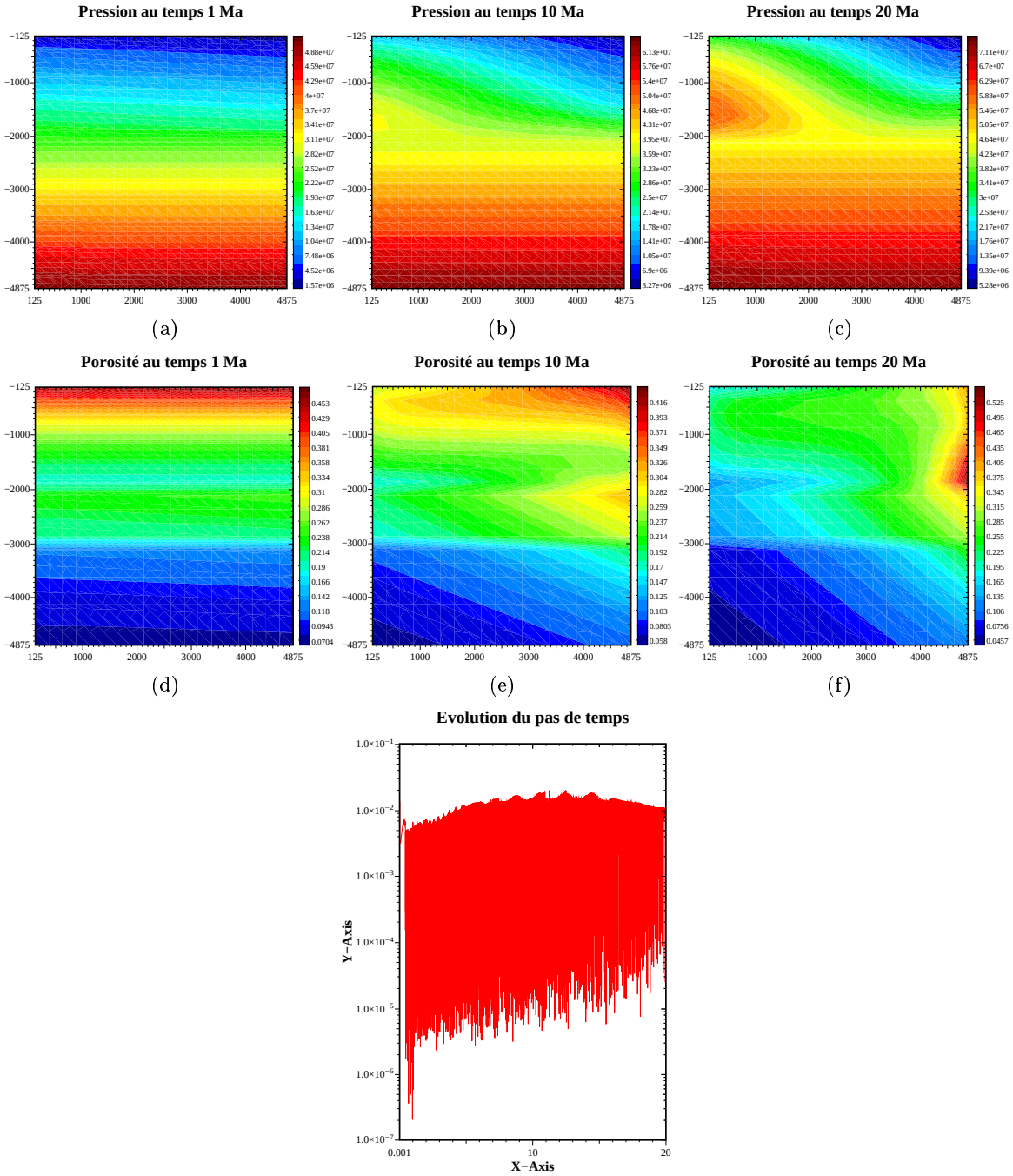
7.8 Résultats numériques

7.8.1 Un cas incompressible

Présentation de la simulation

Le but de cette simulation est de montrer le comportement satisfaisant du nouveau schéma numérique avec raffinement local en temps. On a retenu un cas incompressible afin d'apprécier simplement le comportement du schéma numérique.
Les conditions de simulation s'énoncent: un bassin carré constitué de deux couches d'argile séparées par du sable constituant le drain. L'argile au dessus du drain est fortement imperméable et sert de "bouchon" aux hydrocarbures. On simule un "Black-oil" *i.e.* que le constituant léger, présent dans la phase gaz, se dissout dans la phase huile et le constituant lourd est seulement présent dans la phase huile. La phase huile est donc composée de deux constituants alors que la phase gaz ne contient que le constituant léger.

Résultats, observations, conclusions



(g) 3097 reprises de pas de temps

Figure 7.32: Pressions, porosités et évolution du pas de temps avec annulation globale pour un domaine à trois couches et dans un cas diphasique incompressible, sur un maillage 20×20.

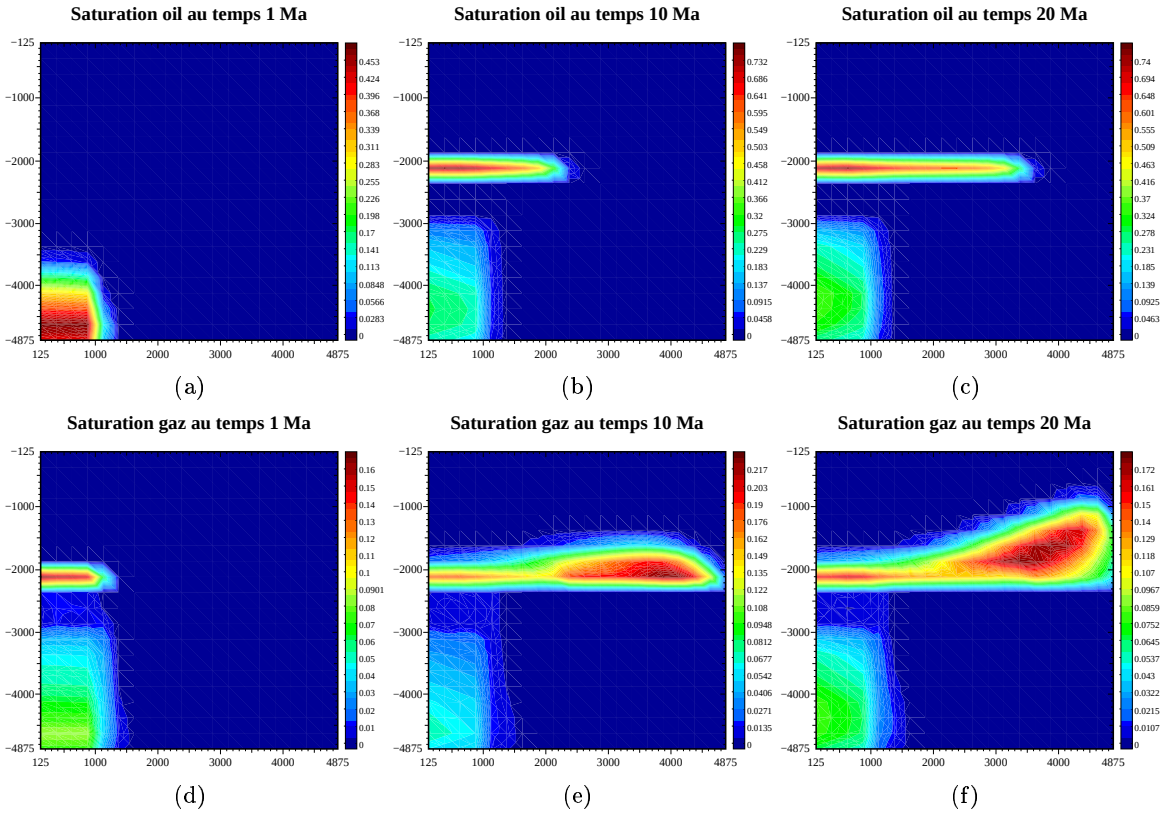


Figure 7.33: Saturations de la phase huile et de la phase gaz pour un domaine à trois couches, dans un cas diphasique incompressible avec annulation globale du pas de temps, sur un maillage 20×20.

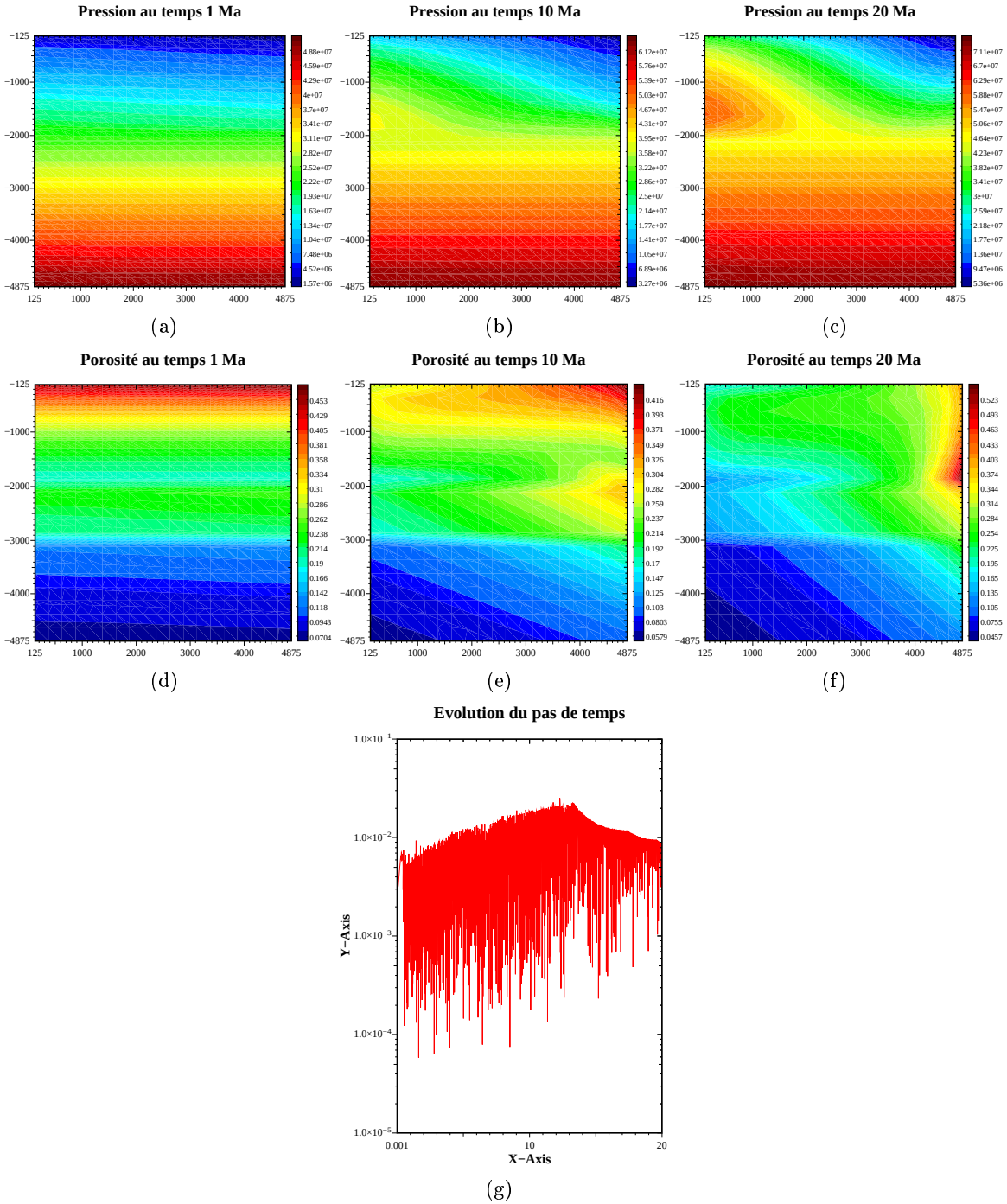


Figure 7.34: Pressions, porosités et évolution du pas de temps avec raffinement local en temps pour un domaine à trois couches et dans un cas diphasique incompressible, sur un maillage 20×20.

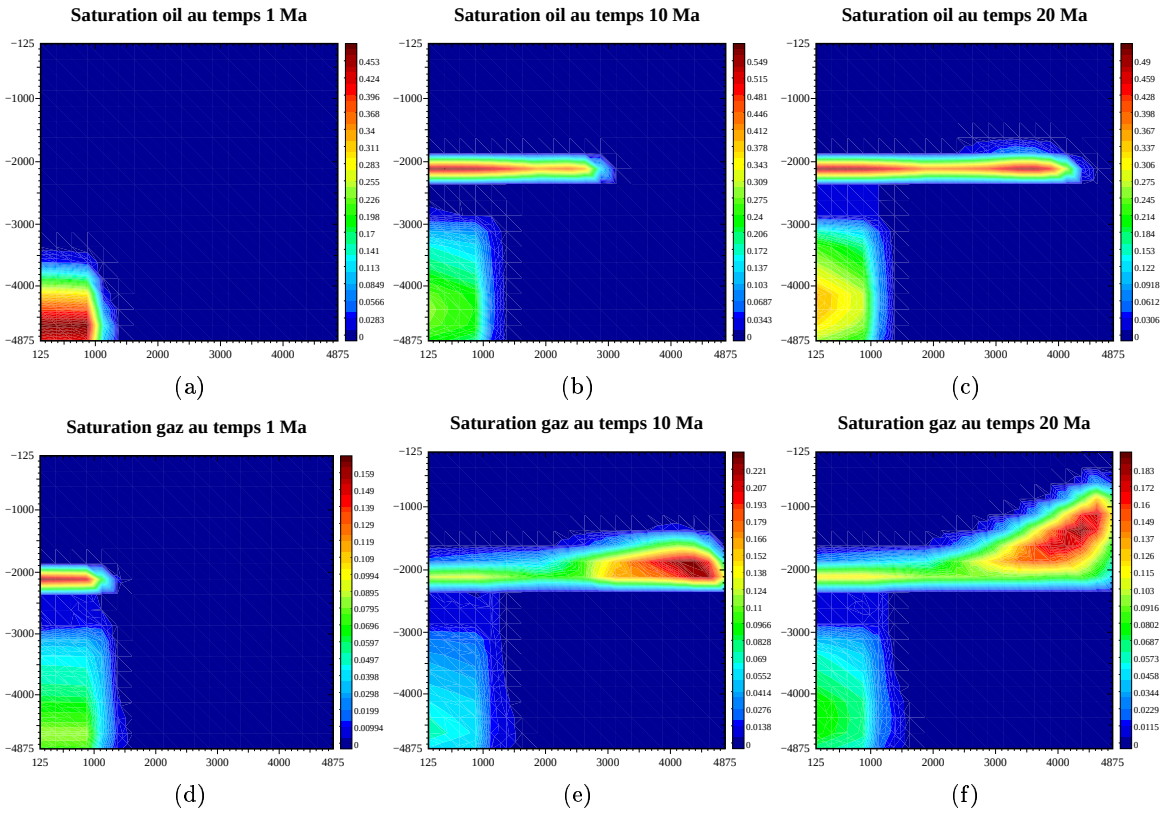


Figure 7.35: Saturations de la phase huile et de la phase gaz pour un domaine à trois couches, dans un cas diphasique incompressible avec raffinement local du pas de temps, sur un maillage 20×20.

Les figures 7.32 et 7.33 présentent les résultats de la simulation dans le cas d'un pas de temps adaptatif avec annulation globale du pas de temps. Les figures 7.34 et 7.35 présentent les résultats de la simulation mais avec un raffinement local du pas de temps. Lorsque l'on compare les pressions et les porosités (7.32(a)à (f) 7.34 (a)à (f)) issues des deux simulations, on n'observe quasiment aucune différence graphique. En revanche, le comportement du pas de temps paraît meilleur avec la gestion du pas de temps local en comparaison avec la gestion du pas de temps globale. En effet, le pas de temps sur le graphique 7.34(g) est moins oscillant (puisque le fait de raffiner localement ne fait pas apparaître la division du pas de temps comme dans le cas de l'annulation globale) et est plus grand. Ceci se retrouve dans le temps de simulation: il a fallu 2h30mn pour effectuer la simulation dans le cas de raffinement gobal du pas de temps contre 1h30mn dans le cas du raffinement local du pas de temps. On note aussi qu'il y a eu 3097 annulations de pas de temps dans le cas de raffinement global du pas de temps contre 940 appels au module de raffinement local du pas de temps. On a donc une meilleure prise en compte de la *C.F.L.* induite par le schéma dans le cas du raffinement local du pas de temps que dans le cas du raffinement global. Ces observations expliquent le gain de temps calcul constaté.
La comparaison des saturations de gaz résultantes des deux simulations ne montre pas une grande différence (graphiques 7.33(d)(e)(f) et 7.35(d)(e)(f)). Par contre, la différence est plus marquée pour les saturations de l'huile. En effet, les saturations sont moins importantes dans le cas de la simulation avec un raffinement local (fig.7.35(a)(b)(c)), le front de saturation est plus avancé que dans l'autre simulation (fig.7.33(a)(b)(c)). Ce même constat est fait lorsque l'on raffine en temps le schéma avec raffinement global du pas de temps (*cf.* chapitre 7.2).
Les résultats obtenus ci-dessus étant encourageants, on s'est alors penché sur la difficulté de définition des zones lorsque les paramètres physiques n'étaient pas respectés dans une ou plusieurs mailles. La question est de déterminer la taille "optimale" souhaitable pour raffiner localement le pas de temps et obtenir un gain maximal du temps calcul. Lors de la simulation précédente, le domaine avait été "découpé" en 25 zones (5 horizontales et 5 verticales). On a donc repris la même simulation, mais en augmentant le nombre de zones à hauteur d'une centaine de zones (10 horizontales et 10 verticales), tout en gardant le maillage $[20 \times 20]$.
La simulation a échoué.On a repris la simulation en fixant "à la main" les zones (dans notre cas, on connait les mailles qui posent des difficultés) de raffinement local du pas de temps. La simulation est arrivée à terme. On déduit que notre stratégie de choix des zones à raffiner n'est pas optimale.
Enfin, on a présenté dans ce paragraphe les simulations avec un maillage $[20 \times 20]$. Ces simulations avaient été effectuées au préalable sur un maillage $[10 \times 10]$, mais le gain de temps obtenu par le raffinement local était non significatif par rapport au raffinement global du pas de temps. On en déduit logiquement que le raffinement local du pas de temps permet de gagner d'autant plus de temps que le nombre de mailles est grand.
Dans le paragraphe suivant, on présente une simulation avec des densités de constituants compressibles.

7.8.2 Un cas compressible

7.8.3 Description de la simulation

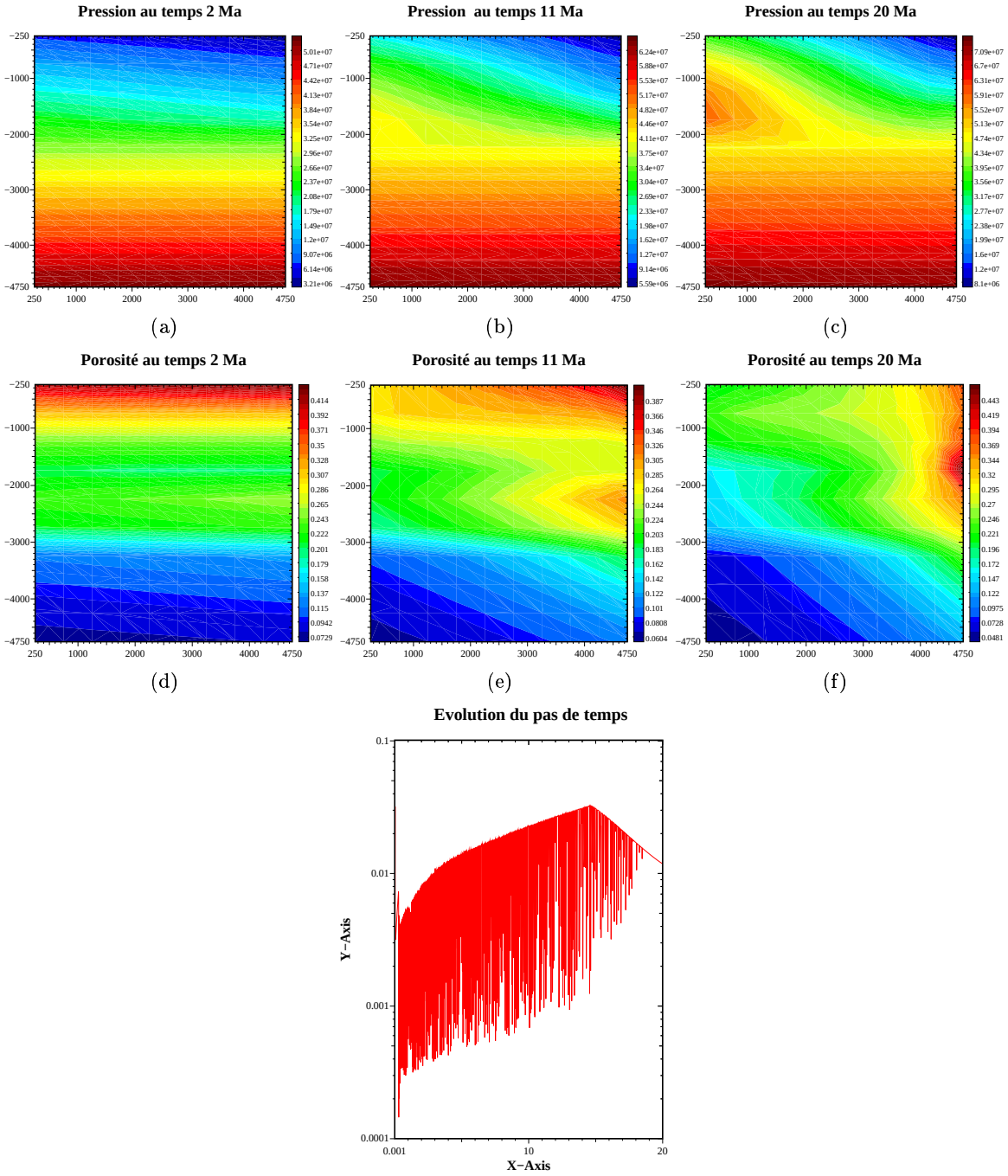
La simulation considérée dans ce paragraphe a pour objet de montrer l'intérêt d'utiliser un schéma avec raffinement local du pas de temps dans le cas de fluides compressibles. La simulation s'effectue toujours dans un bassin carré avec deux couches d'argile séparées par une couche de sable servant de drain et de roche magasin pour les hydrocarbures. Le modèle thermodynamique de simulation des échanges de constituants entre les phases est un "Black-oil".

7.8.4 Résultats et conclusions

Les résultats de la simulation avec raffinement global du pas de temps sont présentés aux figures 7.36 et 7.37. Ceux de la simulation issus du raffinement local du pas de temps sont montrés sur les graphiques 7.38 et 7.39.
Comme dans la simulation incompressible, les pressions et les porosités sont sensiblement les mêmes. Le pas de temps est, tout comme précédemment, moins oscillant dans le cas du raffinement local du pas de temps que dans le cas du raffinement global du pas de temps. Le gain de temps calcul est moins significatif: il a fallu 6mn 30sec pour effectuer la simulation dans le cas du raffinement global du pas de temps contre 5mn 25sec dans le cas du raffinement local du pas de temps. Dans le cas du raffinement global, on a comptabilisé 548 annulations d'itération de temps alors que dans le cas du raffinement local, on a appelé 288 fois le module de raffinement local. On peut supposer que l'écart entre les deux types de raffinement devrait se creuser dans le cas de modules thermodynamiques complexes. Enfin, des phénomènes semblales à ceux de la simulation incompressible apparaissent sur les saturations. Le front de saturation est mieux pris en compte dans le cas du raffinement local du pas de temps que dans le cas de raffinement global de pas de temps.

7.9 Conclusion

Dans ce chapitre, on a présenté la stabilité en temps et en espace du schéma numérique. On s'est ensuite attaché à définir une stratégie de pas de temps adaptatif qui soit plus proche de notre modèle. Il est apparu que ce pas de temps était souvent annulé par des phénomènes locaux (quelques mailles) ce qui pénalisait la simulation et augmentait inutilement le coût de calcul. On s'est donc orienté vers une stratégie de raffinement local en temps qui a prouvé son efficacité en réduisant significativement le temps calcul. Toutefois, il est apparu des difficultés dans la définition de la taille de la zone à raffiner. Ces difficultés sont dues au choix des zones qui est effectué de manière empirique. Pour réduire cet aspect d'empirisme dans le choix de la taille des zones, on peut utiliser les estimateurs *a posteriori*. C'est le but du dernier chapitre de cette thèse.



(g) 548 reprises de pas de temps

Figure 7.36: Pressions, porosités et évolution du pas de temps avec annulation globale pour un domaine à trois couches, dans un cas diphasique compressible et sur un maillage 20×20.

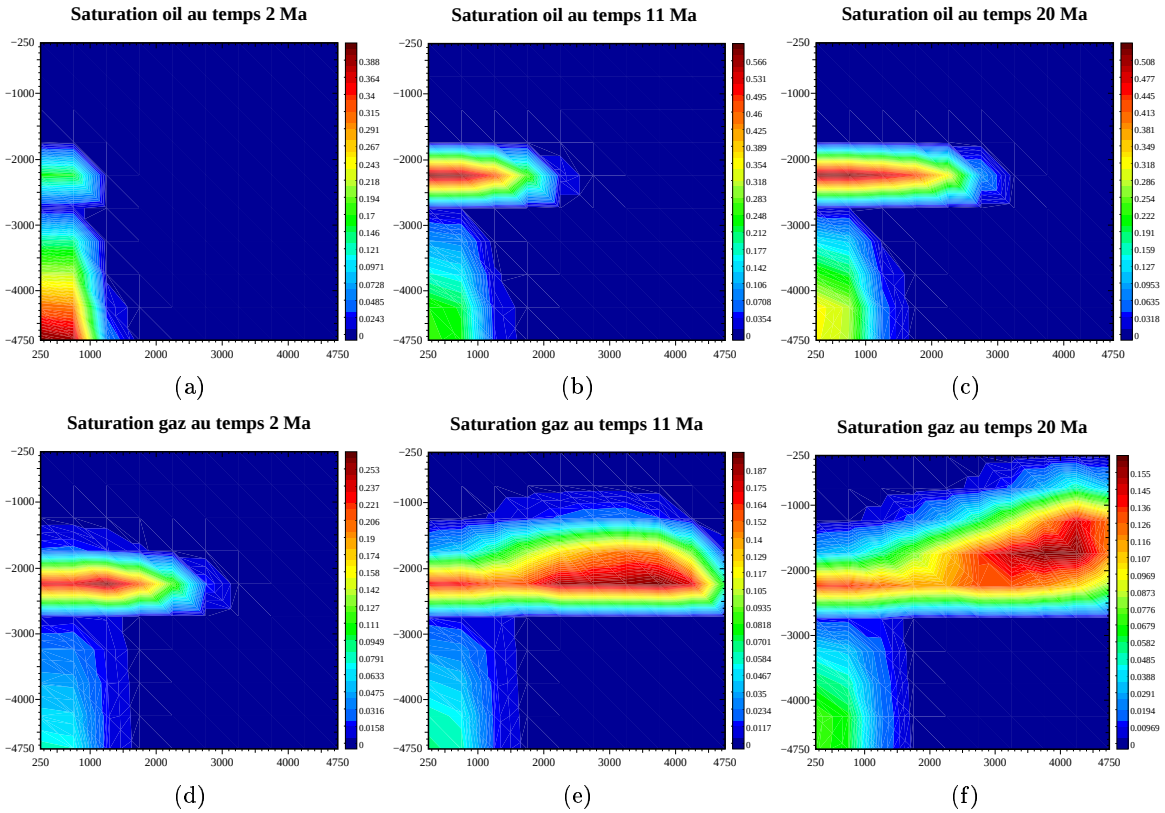


Figure 7.37: Saturations de la phase huile et de la phase gaz pour un domaine à trois couches, dans un cas diphasique compressible avec annulation globale du pas de temps et sur un maillage 20×20.

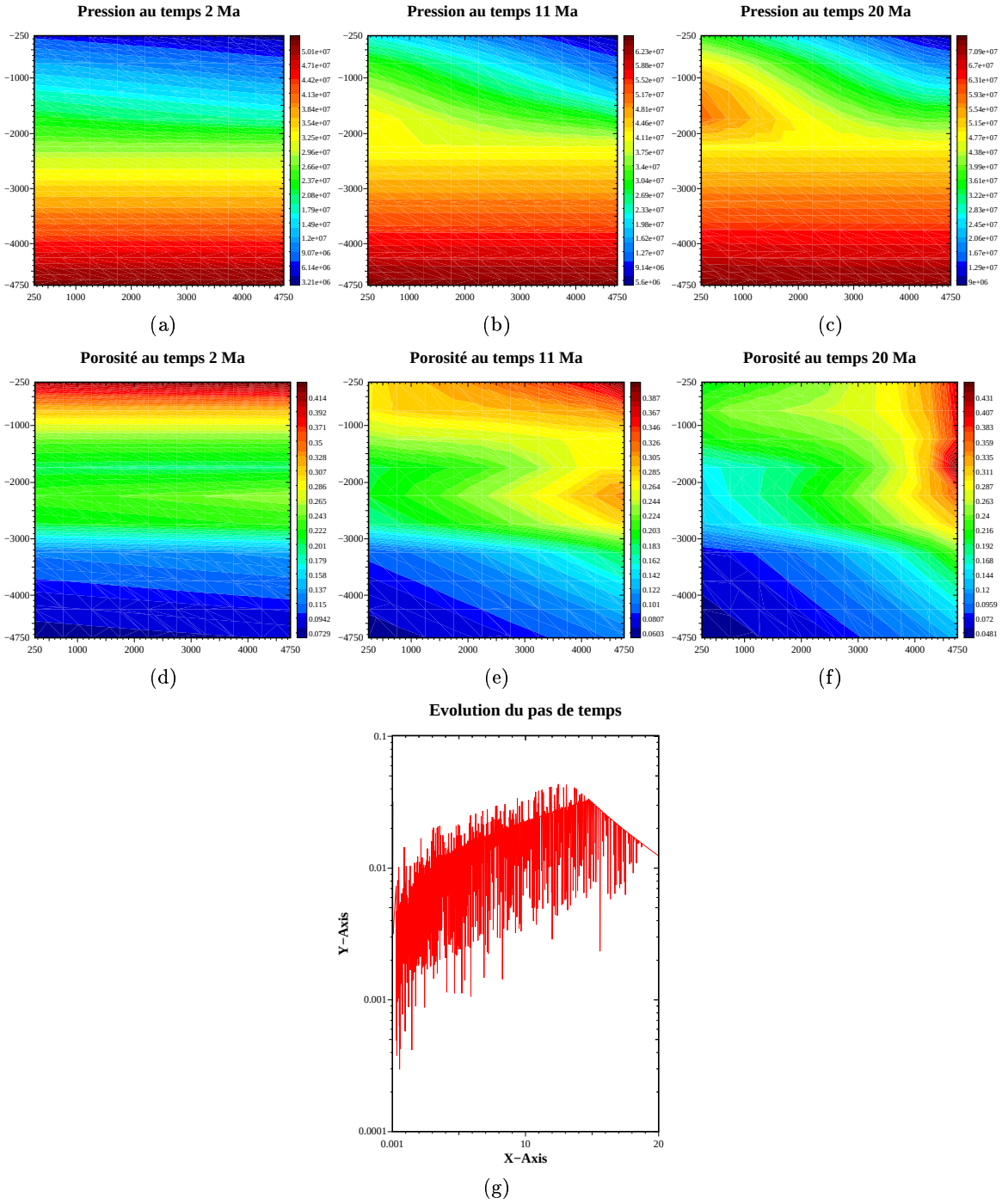


Figure 7.38: Pressions, porosités et évolution du pas de temps raffiné localement pour un domaine à trois couches, dans un cas diphasique compressible, sur un maillage 20×20 et un découpage en zone 5×5.

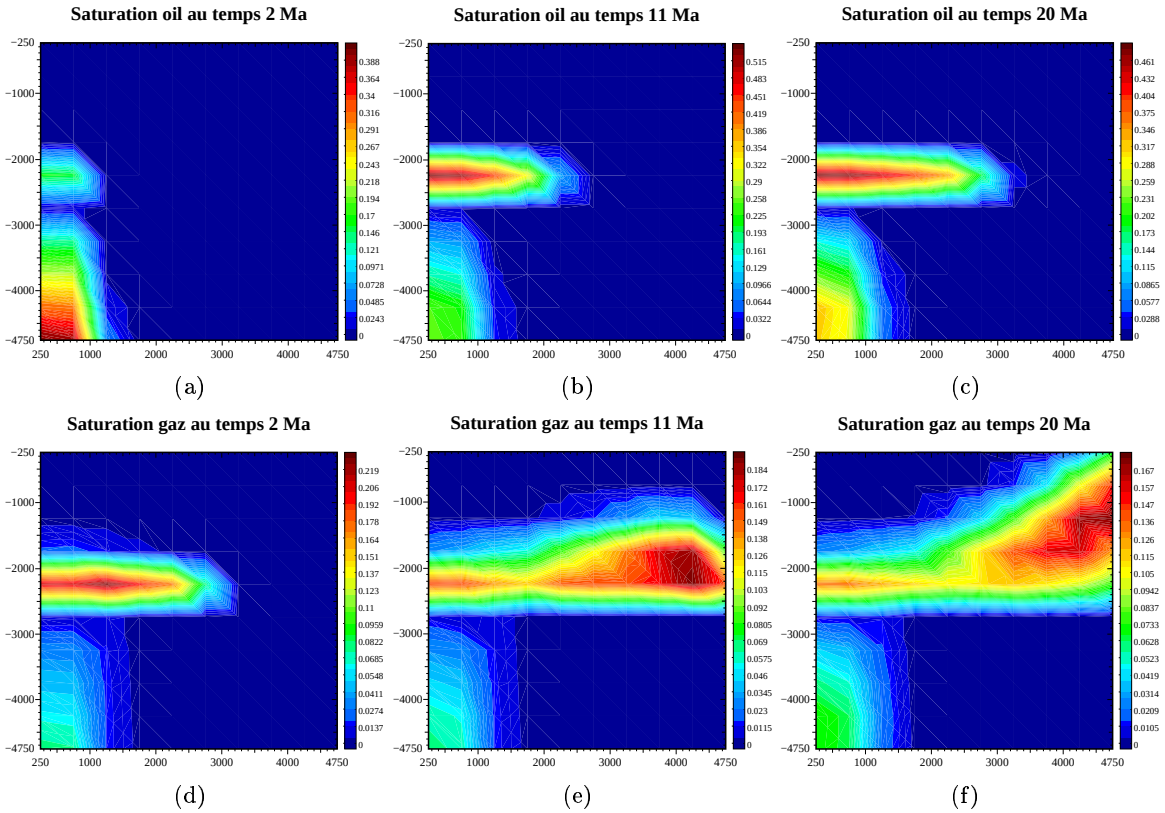


Figure 7.39: Saturations de la phase huile et de la phase gaz pour un domaine à trois couches, dans un cas diphasique compressible avec raffinement local du pas de temps, sur un maillage 20×20 et un découpage en zone 5×5.

Chapitre 8

Estimateurs *a posteriori* pour une méthode de volumes finis

8.1 Introduction

Lors de la gestion locale du pas de temps introduite au chapitre 7, des difficultés sont apparues au moment de la prise en compte de la zone à raffiner. Dans certains cas, la zone à raffiner s'avérait "trop vaste", ce qui augmentait le nombre de mailles et donc le coût de calcul, *a contrario*, dans d'autres cas, cette zone était mal définie et ne permettait donc pas la convergence de la méthode sur ce sous domaine. Le but a donc été de définir un critère moins empirique pour le choix et la délimitation de la ou des zones à raffiner. On s'est donc naturellement orienté vers les estimateurs *a posteriori*, outils performants dans les techniques de raffinement de maillage. En effet, le but des estimateurs *a posteriori* est d'encadrer l'erreur commise lors de la discrétisation avec des quantités que l'on appelle *indicateurs locaux d'erreur*. Grâce à ces estimateurs, on détermine les zones d'erreur importante que l'on raffine par la suite.
On distingue trois types d'estimation *a posteriori*:

1. Estimation par résidu. L'indicateur associé à cette estimation est le résidu local de l'équation considérée (ce résidu local de l'équation est l'équation considérée en remplaçant l'inconnue par son approximation). Ce type d'estimateur a été introduit par Babŭska et Rheinboldt [4, 5], pour les problèmes elliptiques linéaires résolus par une méthode d'éléments finis. L'estimation par résidu a été également développée dans le cadre de l'approximation par éléments finis mixtes des problèmes de Stokes et Navier-Stokes par Verfürth [57, 60], de l'approximation par éléments finis mixtes pour des problèmes elliptiques linéaires (formulation mixte duale) par Wohlmuth et Hoppe [65]. Pour les problèmes non linéaires approchés par des méthodes éléments finis, on cite les travaux de Baranger et El-Amri [10], Verfürth [59] et Medina *et al.* [46]. Enfin, les cas linéaires et non linéaires approchés par une méthode de Volumes

Finis Eléments Finis sont abordés dans Bergam [15], Bergam et Mghazli [13] et Afif *et al.* [2].

2. Estimation par la résolution de problèmes locaux. Cette estimation est obtenue en résolvant localement des problèmes plus simples que le problème initial. Les seconds membres de ces équations sont les résidus de l'équation principale et les estimateurs sont les normes appropriées de ces solutions. Ce type d'estimation a été introduit par Babŭska et Rheinboldt [4] et Bernardi *et al* [19], analysé et généralisé par divers auteurs notamment Bank et Weiser [7], Bank et Welfert [8, 9], Verfürth [60], Hoppe et Wohlmuth [39, 65]. Enfin, Verfürth [58] a montré, pour une équation linéaire elliptique, l'équivalence entre un estimateur obtenu par la méthode d'estimation du résidu et deux estimateurs obtenus par la méthode de résolution de problèmes locaux (l'un, avec l'équation de Poisson avec condition de Neumann sur le bord, l'autre avec également l'équation de Poisson, mais avec des conditions de Neumann et de Dirichlet).

3. Estimation hiérarchique. Cette estimation est obtenue en calculant le résidu de l'équation à l'aide d'éléments finis d'ordre plus élevé ou en considérant un maillage plus fin. Cette méthode a été introduite par Bank et Weiser [7] pour des équations elliptiques linéaires , généralisée dans Bank et Smith [6] au cas d'équations elliptiques non linéaires et étendue à la méthode des éléments finis mixtes par Achchab *et al.* [1], Wohlmuth et Hoppe [65].

Dans la suite de notre travail, on étudiera seulement la classe d'estimateurs *a posteriori* de type résiduel. On étudiera cette classe d'estimateurs pour une équation elliptique linéaire pour une méthode Volumes Finis (schéma 5 points ou 9 points) centrés sur les mailles basée sur une formulation mixte primale-duale.

8.2 Construction du maillage

On se donne un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ rectangulaire.
On a vu au paragraphe 4.2.1 la façon de construire les volumes de discrétisation qui se composent de rectangles sur le domaine Ω. Ces volumes constituent un maillage régulier que l'on note $\mathcal{P}_h$ (maillage associé à l'inconnue p_h). En prenant les médianes de chaque rectangle et en prenant le centre de chaque rectangle comme sommet du nouveau maillage, on obtient le maillage "dual" que l'on note $\mathcal{U}_h$ (ce maillage sera associé à l'inconnue u_h). Les nœuds du maillage $\mathcal{U}_h$ sont ainsi définis:

- loin du bord de Ω: les centres des volumes de $\mathcal{P}_h$,
- sur les bords de Ω: les centres des faces (ou arêtes) des volumes de $\mathcal{P}_h$ avec en plus les coins de Ω.

On appellera V les mailles de $\mathcal{P}_h$, $V^\star$ les mailles de $\mathcal{U}_h$.

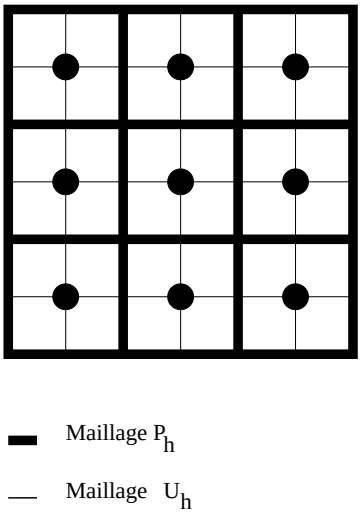


Figure 8.1: Maillage Volumes Finis centré sur les volumes

8.3 Estimateurs *a posteriori* pour une équation elliptique

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ un domaine rectangulaire.
On se propose d'établir des estimateurs d'erreur *a posteriori* pour des schémas Volumes Finis 5 points (VF5) et 9 points (VF9) dans le cadre d'un problème simple:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } u \text{ solution de :} \\ -\Delta u = f \quad \text{dans } \Omega, \\ u = 0 \quad \text{sur } \Gamma. \end{array} \right. \tag{8.1}$$

8.3.1 Discrétisation du problème

Pour résoudre le problème (8.1), on introduit une nouvelle inconnue $p = \nabla u$. Le problème (8.1) se réécrit alors de la façon suivante:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (p, u) \text{ solution de :} \\ p = \nabla u \text{ dans } \Omega \\ div\, p = -f \text{ dans } \Omega \\ u = 0 \quad \text{sur } \Gamma. \end{array} \right. \tag{8.2}$$

Pour la discrétisation, on introduit les espaces de dimension finie suivants:

$$W_h = \{p_h \in H(div, \Omega); \forall V \in \mathcal{P}_h, p_h|_V \in P_{1,0}(V) \times P_{0,1}(V)\}.$$

$$M_h = \{u_h \in H_0^1(\Omega); \forall V^\star \in \mathcal{U}_h, u_h|_{V^\star} \in Q_1(V^\star)\},$$

Les méthodes Volumes finis 5 points et 9 points peuvent s'interpréter comme la recherche de $p_h \in W_h$ vérifiant:

$$\forall V \in \mathcal{P}_h \quad div\, p_h = -\frac{1}{mes\, V}\int_V f\, dx.$$

Du fait que $p_h|_V \in P_{1,0}(V) \times P_{0,1}(V)$, p_h est entièrement déterminé par la seule connaissance des valeurs aux faces des flux $(p_h.\nu)_{\gamma_i} \quad i = 1, 2, 3, 4$, où ν est la normale le long des faces du maillage. En fonction du schéma utilisé pour le calcul des flux, on obtient des schémas Volumes Finis différents.
Dans le cas d'un maillage structuré comme celui que l'on considère en prenant pour l'évaluation du flux la quantité suivante

$$(p_h.\nu)_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{dx_i},$$

avec dx_i la distance entre les deux mailles (*cf.* la figure (8.2) pour les notations) et $\gamma_i = i + \frac{1}{2}, j$ l'interface passant par le milieu du segment $[u_{i,j}, u_{i+1,j}]$, on obtient le schéma Volumes Finis 5 points.
D'autre part, le schéma Volumes Finis 9 points s'obtient en prenant pour le calcul des flux la quantité ci-dessous

$$(p_h.\nu)_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{dx_i}\left(\frac{3}{4}u_{i+1,j} + \frac{1}{8}u_{i+1,j+1} + \frac{1}{8}u_{i+1,j-1} - (\frac{3}{4}u_{i,j} + \frac{1}{8}u_{i,j+1} + \frac{1}{8}u_{i,j-1})\right).$$

On obtient des relations similaires pour les trois autres faces.

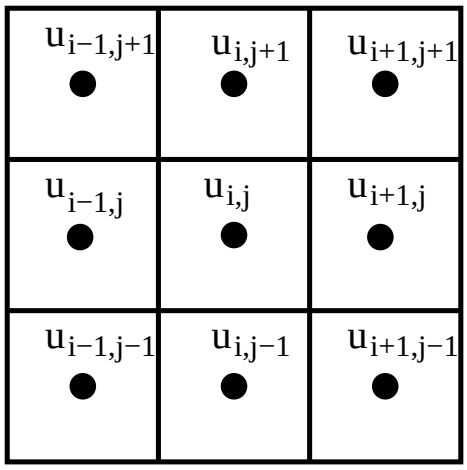


Figure 8.2: Numérotation des nœuds sur un maillage structuré

Pour l'étude théorique de cette approche Volumes Finis Eléments finis mixtes et sa généralisation à des maillages moins structurés ou à la méthode volumes finis centrés sur

les nœuds, on renvoie à Thomas et Trujillo [53]. On passe, dans le paragraphe suivant, à l'étude des estimateurs *a posteriori* pour la méthode par estimation du résidu.

8.3.2 Estimateurs *a posteriori*

Dans cette section, on va établir un estimateur global de l'erreur. Cet estimateur mesure exactement l'erreur commise dans le cas où la fonction f est constante sur chaque volume V de $\mathcal{P}_h$. Avant d'énoncer le résultat, on rappelle les notations qui seront utilisées tout au long de ce chapitre.

Notation

On note:

$$\forall v \in H^1(\Omega), \qquad |v|_{1,\Omega}^2 = \int_\Omega |\nabla v|^2 \, dx,$$

$$||v||_{0,\Omega}^2 = \int_\Omega |v|^2 \, dx,$$

$$||v||_{1,\Omega}^2 = ||v||_{0,\Omega}^2 + |v|_{1,\Omega}^2.$$

$$\forall q \in H(div, \Omega) \; ||q||_{H(div,\Omega)}^2 = \int_\Omega |q|^2 \, dx + \int_\Omega |div \, q|^2 \, dx.$$

Ces rappels étant faits, on énonce le théorème suivant:

Théorème 8.1. *Supposons que f soit constante sur chaque volume V de $\mathcal{P}_h$. Soit (p, u) la solution du problème continu* (8.2) *et soit (p_h, u_h) la solution du problème discrétisé par les schémas* 5 *points ou* 9 *points décrits ci-dessus. On a*

$$||p - p_h||_{0,\Omega}^2 + |u - u_h|_{1,\Omega}^2 = ||p - p_h||_{H(div,\Omega)}^2 + |u - u_h|_{1,\Omega}^2 = ||p_h - \nabla \, u_h||_{0,\Omega}^2.$$

Preuve.
On a

$$\begin{aligned} ||p_h - \nabla u_h||_{0,\Omega}^2 &= ||p_h - p + \nabla u - \nabla u_h||_{0,\Omega}^2 \\ &= ||p - p_h||_{0,\Omega}^2 + |u - u_h|_{1,\Omega}^2 + 2 \int_\Omega (p - p_h).(\nabla(u - u_h)) \, dx. \end{aligned}$$

Une intégration par parties nous donne

$$||p_h - \nabla u_h||_{0,\Omega}^2 = ||p - p_h||_{0,\Omega}^2 + |u - u_h|_{1,\Omega}^2 - 2 \int_\Omega div(p - p_h).(u - u_h) \, dx.$$

De plus, par hypothèse, comme la fonction f est supposée être constante sur tout volume V de $\mathcal{P}_h$, on a

$$f_h = \frac{1}{mes \, V} \int_V f \, dx = f.$$

D'où

$$div\, p = -f = div\, p_h.$$

■

On considère maintenant le cas plus général où f est une fonction quelconque de $L^2(\Omega)$. On note f_h la projection $L^2(\Omega)$ de f dans l'ensemble $V_h = \{v_h \in L^2(\Omega); \forall V \in \mathcal{P}_h\ v_h|_V \in P_0(V)\}$. On a donc $\forall V \in \mathcal{P}_h \quad f_h|_V = \dfrac{1}{mes\, V}\displaystyle\int_V f\, dx$. On obtient le théorème suivant:

Théorème 8.2. *Soit (p, u) la solution du problème (8.2) et soit (p_h, u_h) la solution du problème discrétisé par un schéma 5 points ou 9 points. On obtient alors les majorations suivantes*

- $||p_h - \nabla u_h||^2_{0,\Omega} \leq \left\{||p_h - p||^2_{H(div,\Omega)} + ||u - u_h||^2_{1,\Omega}\right\}.$
- $||p_h - \nabla u_h||^2_{0,\Omega} \leq c\left\{||p_h - p||^2_{0,\Omega} + |u - u_h|^2_{1,\Omega} + h^2||f - f_h||^2_{0,\Omega}\right\}.$
- $||p_h - p||^2_{0,\Omega} + |u - u_h|^2_{1,\Omega} \leq c\ \left\{||p_h - \nabla u_h||^2_{0,\Omega} + h^2\ ||f - f_h||^2_{0,\Omega}\right\}.$

où c est une constante dépendant seulement du domaine Ω.

Preuve.
On a, comme pour la démonstration précédente

$$||p_h - \nabla u_h||^2_{0,\Omega} = ||p - p_h||^2_{0,\Omega} + |u - u_h|^2_{1,\Omega} - 2\int_\Omega div(p - p_h).(u - u_h)\, dx.$$

Comme f n'est plus constante par volume, la quantité $div(p - p_h) = (f - f_h) \neq 0$. On obtient alors la majoration suivante, en utilisant Cauchy-Schwarz,

$$\begin{aligned} ||p_h - \nabla u_h||^2_{0,\Omega} &\leq ||p - p_h||^2_{0,\Omega} + |u - u_h|^2_{1,\Omega} + 2||div(p - p_h)||_{0,\Omega}||u - u_h||_{0,\Omega} \\ &\leq ||p - p_h||^2_{H(div,\Omega)} + ||u - u_h||^2_{1,\Omega}. \end{aligned}$$

La démonstration de la deuxième majoration a une approche similaire à celle de la première. On a également

$$||p_h - \nabla u_h||^2_{0,\Omega} = ||p - p_h||^2_{0,\Omega} + |u - u_h|^2_{1,\Omega} - 2\int_\Omega div(p - p_h)(u - u_h)\, dx. \tag{8.3}$$

La différence vient du traitement de $\int_\Omega div(p - p_h).(u - u_h)\, dx$.
On a que $div\, p = -f$ et $div\, p_h = -f_h$, avec f_h la projection $L^2(\Omega)$ de f sur V_h. Cette projection s'écrit

$$\forall\, v_h \in V_h \int_\Omega (f - f_h)v_h\, dx = 0,$$

On en déduit donc que

$$\forall v \in H_0^1(\Omega) \qquad \int_\Omega div(p - p_h)\, v\, dx = \int_\Omega (f_h - f)(v - v_h)\, dx.$$

En prenant $v = u - u_h$ et v_h la projection $L^2(\Omega)$ de v sur V_h, puis en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on a

$$\int_\Omega div(p - p_h)(u - u_h)\, dx \leq c\, h\, ||f - f_h||_{0,\Omega}\, |u - u_h|_{1,\Omega}.$$

En reportant cette inégalité dans (8.3), on obtient la majoration annoncée.
Etablissons la troisième inégalité.
On commence par introduire la solution $\tilde{u}$ du problème suivant

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\Delta \tilde{u} = f_h & \text{dans } \Omega, \\ \tilde{u} = 0 & \text{sur } \Gamma. \end{array} \right. \tag{8.4}$$

et on pose $\tilde{p} = \nabla \tilde{u}$.
On a de façon évidente que $||p - \tilde{p}||_{0,\Omega} = |u - \tilde{u}|_{1,\Omega}$. On va chercher à majorer $|u - \tilde{u}|_{1,\Omega}$.
On a, pour tout $v \in H_0^1(\Omega)$,

$$\int_\Omega \nabla(u - \tilde{u}).\nabla v\, dx = \int_\Omega (f - f_h) v\, dx.$$

De plus, comme f_h est la projection $L^2(\Omega)$ de f sur V_h, on a

$$\forall\, v_h \in V_h \ \int_\Omega (f - f_h) v_h\, dx = 0,$$

d'où,

$$\int_\Omega \nabla(u - \tilde{u}).\nabla v\, dx = \int_\Omega (f - f_h)(v - v_h)\, dx.$$

En prenant $v = u - \tilde{u}$, en prenant pour v_h la projection $L^2(\Omega)$ de v sur V_h, puis en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on obtient

$$|u - \tilde{u}|_{1,\Omega}^2 \leq ||f - f_h||_{0,\Omega}\, ||v - v_h||_{0,\Omega} \leq c\, h\, ||f - f_h||_{0,\Omega}\, |u - \tilde{u}|_{1,\Omega},$$

où c est une constante indépendante de $u, \tilde{u}, f, f_h$.
En outre, en appliquant le théorème (8.1) au problème annexe (8.4), on obtient

$$||\tilde{p} - p_h||_{0,\Omega}^2 + |\tilde{u} - u_h|_{1,\Omega}^2 = ||p_h - \nabla\, u_h||_{0,\Omega}^2.$$

On obtient alors, en utilisant l'inégalité triangulaire,

$$\begin{aligned} ||p - p_h||_{0,\Omega}^2 + |u - u_h|_{1,\Omega}^2 &\leq 2\left(||p - \tilde{p}||_{0,\Omega}^2 + ||\tilde{p} - p_h||_{0,\Omega}^2 + |u - \tilde{u}|_{1,\Omega}^2 + |\tilde{u} - u_h|_{1,\Omega}^2\right) \\ &\leq 2\left(||p - \tilde{p}||_{0,\Omega}^2 + |u - \tilde{u}|_{1,\Omega}^2 + ||p_h - \nabla\, u_h||_{0,\Omega}^2\right) \\ &\leq c\left(h^2\, ||f - f_h||_{0,\Omega}^2 + ||p_h - \nabla\, u_h||_{0,\Omega}^2\right). \end{aligned}$$

On obtient bien la troisième majoration. ■

Remarque 21. ☞ *La quantité* $||p_h - \nabla\, u_h||_{0,\Omega}$ *joue ici le rôle du terme* $||[\nu_\delta.\nabla u_h]_\delta||_{0,\delta}$ *qui mesure le saut aux interfaces de chaque élément de la dérivée normale de l'approximation dans la méthode Eléments Finis conforme classique (cf. Verfürth [60] par exemple) avec* $||\varphi||^2_{0,\Gamma} = \displaystyle\int_\Gamma |\varphi|^2 d\sigma$.

☞ *L'extension des théorèmes* (8.1) *et* (8.2) *au cas de* $-div(K\,\nabla u) = f$ *avec* K *tenseur symétrique défini positif et en posant* $p = K\,\nabla u$, *ne comporte aucune difficulté majeure. Il suffit simplement de considérer des normes pondérées définies comme suit:*

On introduit la matrice $K^{\frac{1}{2}}$ *telle que* $K = K^{\frac{1}{2}}\,K^{\frac{1}{2}}$.

Lorsque f *est constante pour chaque volume* $V \in \mathcal{P}_h$, *le résultat est le suivant:*

$$\begin{aligned} ||K^{-\frac{1}{2}}(p_h - K\,\nabla\, u_h)||^2_{0,\Omega} &= ||K^{-\frac{1}{2}}(p - p_h)||^2_{H(div,\Omega)} + ||K^{\frac{1}{2}}\nabla(u - u_h)||^2_{0,\Omega} \\ &= ||K^{-\frac{1}{2}}(p - p_h)||^2_{0,\Omega} + ||K^{\frac{1}{2}}\nabla(u - u_h)||^2_{0,\Omega}. \end{aligned}$$

Dans le cas où f *est quelconque et appartient à* $L^2(\Omega)$, *le résultat est le suivant:*

- $||K^{-\frac{1}{2}}(p_h - K\,\nabla u_h)||^2_{0,\Omega} \leq c(K)\left\{||p - p_h||^2_{H(div,\Omega)} + ||u - u_h||^2_{1,\Omega}\right\}$.
- $||K^{-\frac{1}{2}}(p_h - K\,\nabla u_h)||^2_{0,\Omega} \leq c(K)\left\{||p_h - p||^2_{0,\Omega} + |u - u_h|^2_{1,\Omega} + h^2||f - f_h||^2_{0,\Omega}\right\}$.
- $||p_h - p||^2_{0,\Omega} + |u - u_h|^2_{1,\Omega} \leq c(K)\left\{||K^{-\frac{1}{2}}(p_h - K\,\nabla u_h)||^2_{0,\Omega} + h^2\,||f - f_h||^2_{0,\Omega}\right\}$.

8.3.3 Tests numériques

Le domaine de simulation pour les tests numériques est le carré unité $[0,1] \times [0,1]$. La fonction servant de référence pour les simulations est la suivante:

$$u(x,y) = x(1-x) + y(1-y).$$

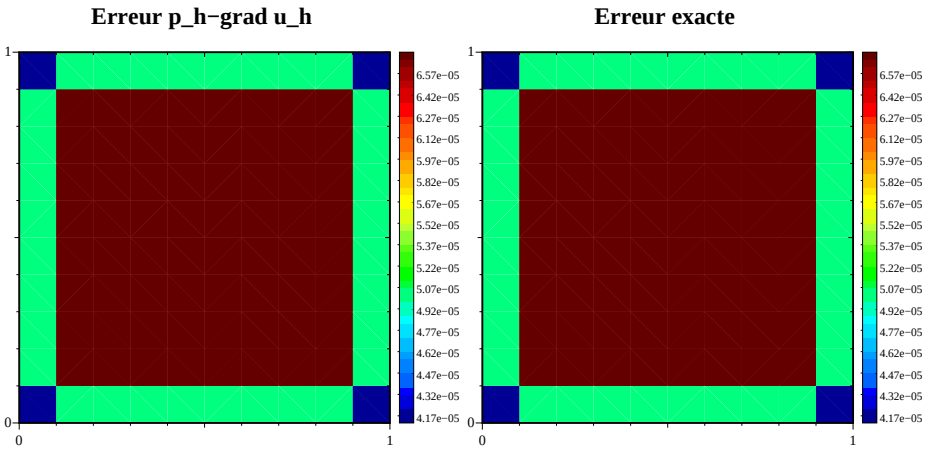
Les résultats numériques confirment les résultats théoriques obtenus précédemment. L'erreur globale $||p_h - p||^2_{H(div,\Omega)} + |u - u_h|^2_{1,\Omega}$ est obtenue de façon exacte par l'estimateur $||p_h - \nabla\, u_h||_{0,\Omega}$ dans le cas où la fonction f est constante sur chaque volume de discrétisation V *i.e.* $f = f_h$. Ce qu'il est intéressant de vérifier est que l'estimateur peut également être utilisé comme estimateur local et fournir ainsi un critère pour la mise en œuvre d'une méthode adaptative de raffinement de maillage. On présente sur les graphiques (8.3) les cartes d'erreurs locales exactes et estimées. On peut constater qu'elles sont semblables. L'estimateur donne, dans ce cas précis, une bonne répartition de l'erreur spatiale.
On s'est également intéressé au cas où la fonction f n'est pas constante par volume. On a pris comme solution de référence, la fonction ci-dessous

$$u(x,y) = sin(\pi\,x)sin(\pi\,y).$$

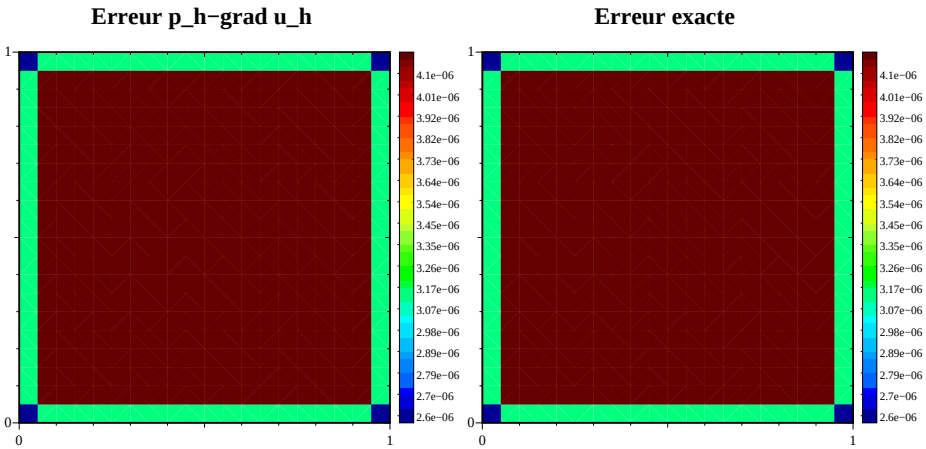
On présente sur le tableau (8.1) les erreurs données par l'estimateur $||p_h - \nabla u_h||^2_{0,\Omega}$ et la norme de l'erreur exacte globale $||p_h - p||^2_{H(div,\Omega)} + |u - u_h|^2_{1,\Omega}$, pour différents maillages. On constate que lorsqu'on divise le maillage par 4, l'erreur est divisée par 4. On constate également qu'elles sont quasiment identiques, ce qui prouve que l'erreur $h^2||f - f_h||^2_{0,\Omega}$ est ici négligeable. On présente sur les graphiques (8.4) la répartition locale des erreurs. Dans le cas étudié ici, on constate que les répartitions des erreurs exactes et estimées sont identiques.
Dans les deux cas étudiés, on constate que l'estimateur $||p_h - \nabla u_h||_{0,\Omega}$ approche correctement l'erreur globale et donne également une bonne répartition des cartes d'erreurs locales.

Maillage	erreur $\|\|p_h - \nabla u_h\|\|^2_{0,\Omega}$	erreur exacte $\|\|p_h - p\|\|^2_{H(div,\Omega)} + \|u - u_h\|^2_{1,\Omega}$
10×10	0.0783844	0.0816978
40×40	$5,06232\,10^{-3}$	$5,07547\,10^{-3}$
100×100	$8,11459\,10^{-4}$	$8,11796\,10^{-4}$

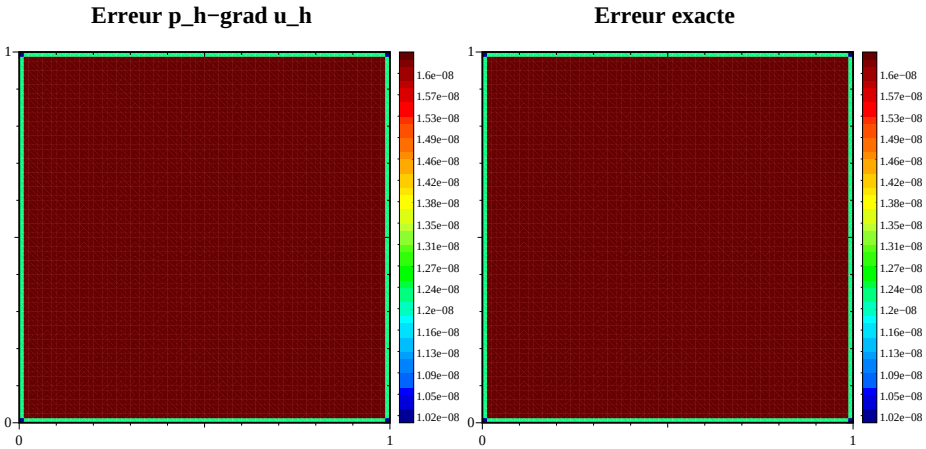
Table 8.1: tableau d'erreur pour différents maillages



(a) maillage 10×10 (b) maillage 10×10

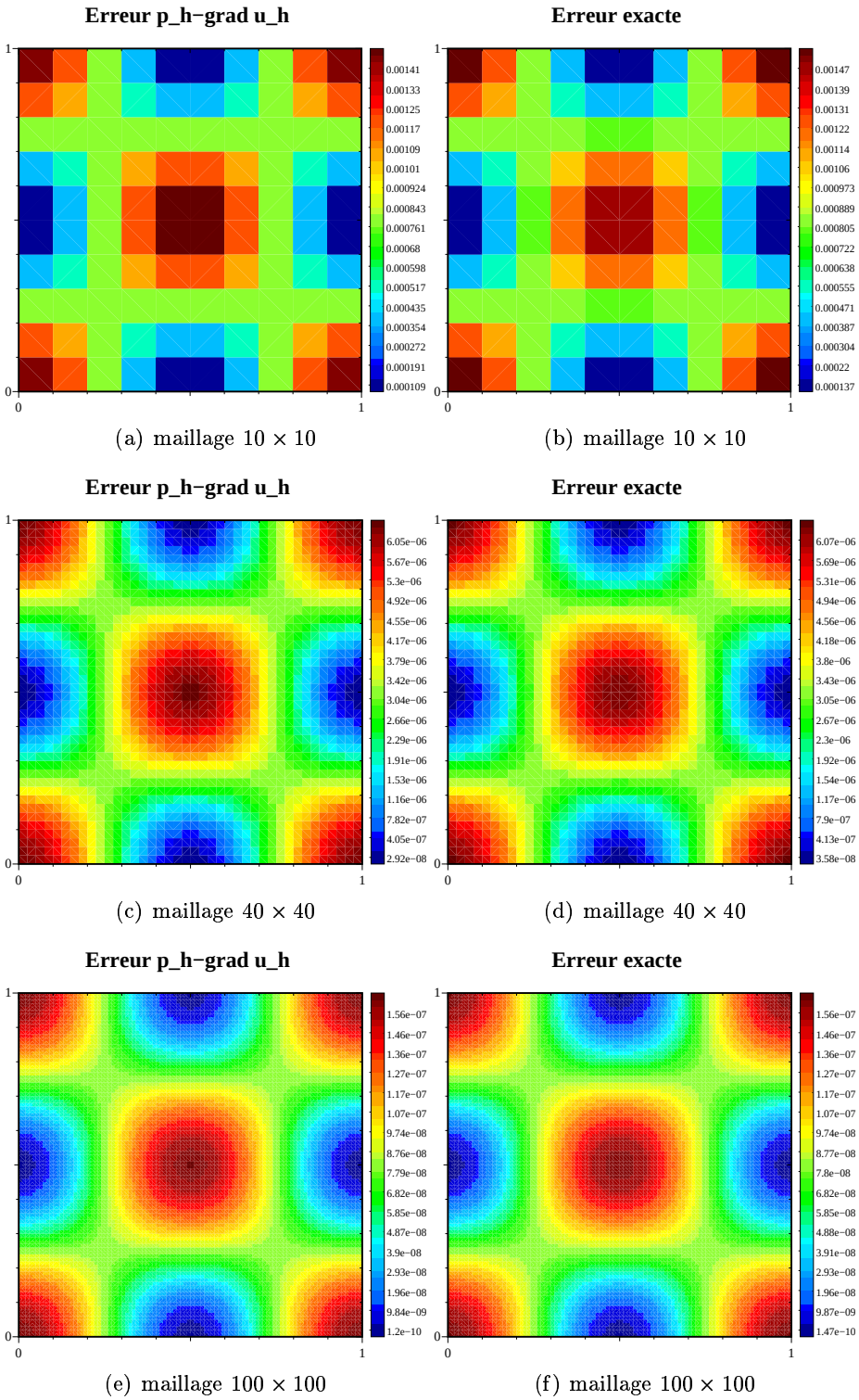


(c) maillage 20×20 (d) maillage 20×20



(e) maillage 80×80 (f) maillage 80×80

Figure 8.3: Répartition de l'erreur estimée et de l'erreur exacte pour 3 maillages différents



(a) maillage 10×10 (b) maillage 10×10

(c) maillage 40×40 (d) maillage 40×40

(e) maillage 100×100 (f) maillage 100×100

Figure 8.4: Répartition de l'erreur estimée et de l'erreur exacte pour 3 maillages différents

8.4 Estimateurs *a posteriori* pour une équation parabolique

Soit $\Omega \in \mathbb{R}^2$ un domaine rectangulaire. Soit T un réel strictement positif fixé. On considère l'intervalle de temps $[0,T]$. Le problème qu'on se propose d'étudier est l'équation de la chaleur qui se formule par

$$\left\{\begin{array}{l} \text{Trouver } u \text{ tel que :} \\ \dfrac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = f \quad \text{dans }]0,T[\times\Omega, \\ u = 0 \quad \text{sur }]0,T[\times\Gamma, \\ u(0,.) = u_0(.) \quad \text{dans } \Omega. \end{array}\right. \tag{8.5}$$

où $f \in L^2(0,T;L^2(\Omega))$. Le problème (8.5) admet une unique solution u telle que $u \in \mathcal{C}^0(0,T;L^2(\Omega)) \cap L^2(0,T;H_0^1(\Omega))$ (*cf.* Lions et Magenes ([42], *chapitre 3 §4*)).

8.4.1 Discrétisation du problème

On introduit tout d'abord une partition de l'intervalle de temps $[0,T]$ en sous-intervalles $I_n = (t_{n-1}, t_n)$ pour $1 \leq n \leq N$ avec $0 = t_0 < t_1 < \ldots < t_N = T$. On note $\tau_n = t_n - t_{n-1}$ le pas de discrétisation en temps tel que $\displaystyle\sum_{n=1}^{N} \tau_n = T$. On introduit le paramètre σ_τ défini par:

$$\sigma_\tau = \max_{2\leq n\leq N} \frac{\tau_n}{\tau_{n-1}}.$$

Pour toute fonction en escalier $v \in L^2(0,T;H_0^1(\Omega))$, constante en temps sur chaque intervalle I_n $1 \leq n \leq N$, on définit la fonction v_τ de $\mathcal{C}^0([0,T],H_0^1(\Omega))$ linéaire en temps sur chaque intervalle I_n $1 \leq n \leq N$ de la façon suivante:

$$v_\tau(t) = \frac{t - t_{n-1}}{\tau_n}\, v^n + \frac{t_n - t}{\tau_n}\, v^{n-1}.$$

où v^n est la restriction de v à I_n $1 \leq n \leq N$.
On discrétise en temps le problème (8.5) par une méthode d'Euler implicite, de manière classique, on obtient le problème semi-discrétisé suivant:
pour $1 \leq n \leq N$,

$$\left\{\begin{array}{l} \dfrac{u^n - u^{n-1}}{\tau_n} - \Delta\, u^n = f^n \quad \text{dans } \Omega, \\ u^n = 0 \quad \text{sur } \Gamma, \\ u^0 = u_0 \quad \text{dans } \Omega. \end{array}\right. \tag{8.6}$$

Pour ce qui concerne la discrétisation, on reprend le maillage et les notations du paragraphe 8.2. On va chercher deux fonctions en escalier par rapport au temps: $u_h \in L^2(0,T;M_h)$ et $p_h \in L^2(0,T;W_h)$ telles que u_h^n et p_h^n représentent la restriction à I_n de u_h et p_h. Comme

dans le cas elliptique, p_h est ici une approximation de $p = \nabla u$. Une méthode de Volumes Finis pour le problème ci-dessus peut être obtenue de la manière suivante:
pour $1 \leq n \leq N$, $\forall V \in \mathcal{P}_h$,

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{1}{mes\, V} \displaystyle\int_V (u_h^n - u_h^{n-1})\, dV - \tau_n\, div\, p_h^n = \tau_n\, f_h^n, \\ u_h^0 = u_0 \quad \text{dans } V. \end{array} \right. \tag{8.7}$$

avec $f_h^n|_V = \dfrac{1}{mes\, V} \displaystyle\int_V f^n\, dx$.
On rappelle que $u_h^n \in M_h = \{u_h^n \in H_0^1(\Omega); \forall V^\star \in \mathcal{U}_h,\ u_h^n|_{V^\star} \in Q_1(V^\star)\}$. On observe que l'on obtient un schéma 9 points, et ceci indépendamment du schéma retenu pour discrétiser le terme $div\, p_h^n$ (5 ou 9 points en espace). Dans les cas non linéaires, ce schéma n'est pas très stable et il est usuel d'utiliser une technique de "mass lumping" (ou condensation de la masse) que l'on décrit ci-dessous et qui, du reste, facilite la mise en œuvre.
On introduit l'opérateur d'interpolation $\Pi_{0,h}$ qui associe à une fonction $u_h^n \in C^0(\overline{\Omega})$ la fonction $\Pi_{0,h}(u_h^n)$ constante sur chaque élément V du maillage $\mathcal{P}_h$ et égale à la valeur de u_h^n au centre de cette maille. Avec ce nouvel opérateur, le schéma 9 points induit par la discrétisation temporelle disparaît. Le problème (8.7) se simplifie alors en
pour $1 \leq n \leq N$, $\forall V \in \mathcal{P}_n$,

$$\left\{ \begin{array}{l} \Pi_{0,h}(u_h^n - u_h^{n-1}) - \tau_n\, div\, p_h^n = \tau_n\, f_h^n, \\ u_h^0 = u_0 \quad \text{dans } V. \end{array} \right. \tag{8.8}$$

Cependant, dans la suite, on établira des estimateurs *a posteriori* pour les deux problèmes (8.7) et (8.8).

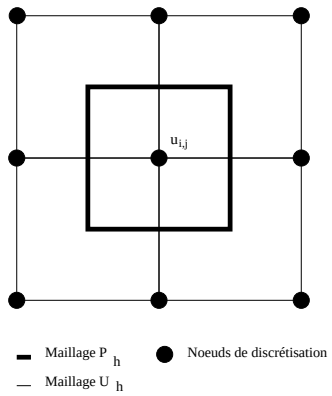


Figure 8.5: Représentation et notations de $V \cap V^\star$

8.4.2 Tours d'horizon et rappels

On trouve dans la littérature concernant les estimateurs *a posteriori* pour les problèmes paraboliques trois types de résultats: d'une part les estimateurs pour des équations semi-discrétisées, d'autre part des estimateurs dans le cas de discrétisation totale mais à un temps fixé, enfin les estimateurs prenant totalement en compte l'aspect temps et espace.

Dans Johnson *et al.* [40], les auteurs ont établi une estimation *a posteriori* en temps pour un problème parabolique linéaire **semi-discrétisé** pour une méthode d'Euler implicite. Nochetto *et al.* [47] ont obtenu des estimations *a posteriori* en temps, mais dans le cas de problème parabolique non linéaire semi-discrétisé par une méthode d'Euler implicite.
Dans Bieterman et Babŭska [20, 21], les auteurs ont obtenu une classe d'estimateurs en espace **pour un temps** t_n dans le cas d'une discrétisation éléments finis pour une équation parabolique à une dimension. Bernardi et Métivet [18] obtiennent également une classe d'estimateurs en espace pour une méthode éléments finis, en deux ou trois dimensions, pour l'équation de la chaleur discrétisée par une méthode d'Euler implicite. Enfin, on signale les travaux de Bergam *et al.* [11] qui présentent également des classes d'estimateurs en espace pour un temps donné pour une méthode éléments finis avec joints.
Des estimateurs **en temps et espace** pour des équations paraboliques linéaires et non linéaires sont donnés dans Eriksson et Johnson [26, 27], pour une méthode de Galerkin. Verfürth [61, 62, 63] étudie ces estimateurs pour une méthode éléments finis pour des équations paraboliques non linéaires. Bergam *et al.* [12] présentent des estimateurs en temps et en espace pour une méthode éléments finis sur des équations paraboliques linéaires et non linéaires. Contrairement aux travaux cités précédemment, ces estimateurs ont été obtenus en étudiant d'une par la partie temps ($||u - u^n||$, pour une norme en adéquation avec le problème) d'autre part la partie espace ($||u^n - u_h^n||$).
Enfin, Bergam *et al.* [13, 14, 15] établissent, sur la même méthodologie que dans [12], des estimateurs en espace et en temps pour une méthode volumes finis éléments finis centrés sur les nœuds, pour des équations paraboliques linéaires et non linéaires.

Nous développons des estimateurs *a posteriori* en temps et en espace pour une méthode volumes finis (5 points ou 9 points) basée sur une formulation mixte primale-duale. La méthode utilisée s'inspire de celles développées dans les articles de Bergam *et al.* [12, 14, 15, 16] et dans un deuxième temps, sur les méthodes développées par Eriksson et Johnson [26, 27].
Nous utilisons dans l'établissement de nos majorations d'erreurs *a posteriori* des outils comme l'opérateur de Clément et les fonctions bulles associées aux éléments du maillage. Il n'est donc pas inutile de rappeler les principes et les résultats auxquels nous ferons appel par la suite.

Notations

On introduit les normes suivantes:

- $\forall\, v \in \mathcal{C}^0(0,T;H_0^1(\Omega))$, $\forall\, p \in \mathcal{C}^0(0,T;(L^2(\Omega))^2)$, $\forall\, t \in [0,T]$,
$$|||(v,p)(t)|||^2 = ||v(t)||_{0,\Omega}^2 + \int_0^t \{|v(s)|_{1,\Omega}^2 + ||p(s)||_{0,\Omega}^2\}\, ds$$
- $\forall\, v \in L^2(0,T;H_0^1(\Omega))$, $\forall\, p \in L^2(0,T,(L^2(\Omega))^2)$ v,p fonctions étagées constantes en temps sur tout intervalle $(I_m)_{1\leq m\leq N}$, on note
$$||v^m||^2 = ||v^m||_{0,\Omega}^2 + \tau_m |v^m|_{1,\Omega}^2,$$
$$||(v^m,p^m)||^2 = ||v^m||_{0,\Omega}^2 + \tau_m |v^m|_{1,\Omega}^2 + \tau_m ||p^m||_{0,\Omega}^2.$$
où $v^m = v|_{I_m}$, $p^m = p|_{I_m}$
- et $\forall\, n = 1,\ldots,N$, $\quad ||(v,p)||_n^2 = ||v^n||_{0,\Omega}^2 + \sum_{m=1}^{n} \tau_m \{|v^m|_{1,\Omega}^2 + ||p^m||_{0,\Omega}^2\}$,

On note également $h = \sup_{V\in\mathcal{P}_h} h_V$, h_V étant le diamètre de V. En particulier, dans le cas d'un maillage uniforme (ce qui est notre cas dans nos exemples numériques) on a $h = h_V$.

Propriétés et estimations

On définit l'interpolé de Clément P_h de $H^1(\Omega)$ à valeur dans M_h (*cf.* [29]).
Ce choix d'interpolé tient au fait qu'il s'applique à des fonctions non continues (dans notre cas, la fonction est $H^1(\Omega)$) contrairement aux opérateurs d'interpolation classiques qui nécessitent des fonctions continues.
On a alors le résultat suivant:

Lemme 8.3. *Pour $v \in H^1(\Omega)$ il existe une constante c telle que:*

$$\begin{array}{rcl} ||v - P_h v||_{0,\Omega} & \leq & c\, h\, |v|_{1,\Omega}, \\ |v - P_h v|_{1,\Omega} & \leq & c\, |v|_{1,\Omega}. \end{array}$$

Pour pouvoir minorer l'erreur par l'estimateur, on utilise les techniques développées par Verfürth (*cf.* [60] par exemple) basées sur l'utilisation de fonctions bulles. Pour cela, on définit pour chaque volume de discrétisation V (qui est, dans notre cas, un rectangle), la fonction bulle, notée Ψ_V. Cette fonction est polynômiale et construite comme le produit des fonctions barycentriques de $Q_1(V)$ associées au volume V. Ψ_V vérifie alors les propriétés suivantes:

$$\begin{array}{l} supp(\Psi_V) \subset V, \\ \Psi_V|_{\partial V} = 0, \\ \Psi_V \in H_0^1(\Omega). \end{array}$$

$\forall V \in \mathcal{P}_h$, on considère E_V un ensemble quelconque de dimension finie tel que $E_V \subset L^\infty(V)$. En utilisant les techniques de passage à l'élément de référence, on obtient alors le lemme suivant (*cf.* Verfürth [59]):

Lemme 8.4. *Il existe deux constantes α_1, α_2 indépendantes de h_V telles que, pour toute fonction $w \in E_V$, on a:*

i) $\alpha_1 \, ||w||_{0,V} \leq \sup\limits_{v \in E_V} \dfrac{\int_V w \, \Psi_V \, v \, dx}{||v||_{0,V}} \leq ||w||_{0,V}$,

ii) $||\Psi_K \, w||_{0,V} \leq ||w||_{0,V} \leq \alpha_2 \, ||\Psi_V^{\frac{1}{2}} w||_{0,V}$.

On rappelle également la propriété de l'inégalité inverse démontrée dans Ciarlet [28].

Lemme 8.5. *Soit $\mathcal{T}_h$ une famille de triangulation régulière, il existe une constante c telle que, pour toute fonction v_h polynômiale par morceaux, on ait:*

$$\forall V \in \mathcal{T}_h \quad |v_h|_{1,V} \leq \frac{c}{h_V} \, ||v_h||_{0,V}.$$

On utilise également une estimation de la valeur moyenne d'une fonction. Pour toute fonction $w_h \in M_h$, on note $\overline{w}_h$ la fonction constante par volume V définie par

$$\overline{w}_h = \frac{1}{mes \, V} \int_V w_h \, dx.$$

$\overline{w}_h$ est donc la projection $L^2(\Omega)$ de w_h sur V_h.
La valeur moyenne $\overline{w}_h$ vérifie le lemme suivant:

Lemme 8.6. *Soit $w_h \in M_h$, et $\overline{w}_h$ sa valeur moyenne dans le volume $V \in \mathcal{P}_h$, on a:*

$$||w_h - \overline{w}_h||_{0,V} \leq h_V \, |w_h|_{1,V}.$$

Enfin, on présente une propriété d'équivalence entre les normes $|||(\cdot,\cdot)|||$ et $||(\cdot,\cdot)||_n$.

Lemme 8.7. *Pour toutes fonctions $v \in L^2(0,T; H_0^1(\Omega))$, $p \in L^2(0,T; (L^2(\Omega))^2)$ étagées, constantes sur chaque intervalle $(I_m)_{1 \leq m \leq N}$, on a*

$$\frac{1}{4} \, ||(v,p)||_n^2 \leq |||(v_\tau, p_\tau)(t_n)|||^2 \leq \frac{1}{2} \left\{ (1+\sigma_\tau) ||(v,p)||_n^2 + \tau_1 (|v^0|_{1,\Omega}^2 + ||p^0||_{0,\Omega}) \right\}.$$

Preuve.

Par définition des normes $||(v,p)||_n$ et $|||(v_\tau, p_\tau)(t_n)|||$, il suffit de comparer les quatre quantités suivantes:

$$A_{1m} = \int_{t_{m-1}}^{t_m} |v_\tau(t)|_{1,\Omega}^2 \, dt \qquad B_{1m} = \tau_m |v^m|_{1,\Omega}^2,$$

$$A_{2m} = \int_{t_{m-1}}^{t_m} ||p_\tau(t)||_{0,\Omega}^2 \, dt \quad B_{2m} = \tau_m ||p^m||_{0,\Omega}^2.$$

On étudie séparément les quantités A_{1m} et A_{2m} puisqu'il suffit de les sommer pour obtenir la norme.
Par définition de v_τ, on écrit

$$\begin{aligned} A_{1m} = \int_{t_{m-1}}^{t_m} |v_\tau(t)|_{1,\Omega}^2\, dt &= \int_{t_{m-1}}^{t_m} ||\frac{t_m - t}{\tau_m}\nabla v^{m-1} + \frac{t - t_{m-1}}{\tau_m}\nabla v^m||_{0,\Omega}^2\, dt, \\ &= \frac{\tau_m}{3}\left(||\nabla v^m||_{0,\Omega}^2 + ||\nabla v^{m-1}||_{0,\Omega}^2 + \int_\Omega \nabla v^m \cdot \nabla v^{m-1}\, dx\right). \end{aligned} \tag{8.9}$$

En utilisant l'inégalité $ab \geq -\frac{1}{4}a^2 - b^2$, on obtient

$$A_{1m} \geq \frac{\tau_m}{3}\left(|v^m|_{1,\Omega}^2 + |v^{m-1}|_{1,\Omega}^2 - \frac{1}{4}|v^m|_{1,\Omega}^2 - |v^{m-1}|_{1,\Omega}^2\right) = \frac{1}{4}\, B_{1m}.$$

On obtient la minoration du terme cherché en sommant sur m.
En reprenant (8.9) et en utilisant l'inégalité $ab \leq \frac{1}{2}(a^2 + b^2)$, on a

$$A_{1m} \leq \frac{\tau_m}{2}(|v^m|_{1,\Omega}^2 + |v^{m-1}|_{1,\Omega}^2).$$

En utilisant le fait que $\tau_m \leq \sigma_\tau\, \tau_{m-1}$, pour $m > 1$ on a

$$A_{1m} \leq \frac{\tau_m}{2}|v^m|_{1,\Omega}^2 + \frac{\tau_{m-1}}{2}\sigma_\tau\, |v^{m-1}|_{1,\Omega}^2 \tag{8.10}$$

Pour $m = 1$, on a la majoration suivante:

$$A_{1m} \leq \frac{\tau_1}{2}|v^1|_{1,\Omega}^2 + \frac{\tau_1}{2}\sigma_\tau\, |v^0|_{1,\Omega}^2 \tag{8.11}$$

En sommant sur $m = 2, \ldots, n$ l'inégalité (8.10) et en lui ajoutant l'inégalité (8.11), on obtient le résultat suivant

$$\sum_{m=1}^{n} A_{1m} \leq \frac{1}{2}\left((1 + \sigma_T)\, B_{1m} + \tau_1\, |v^0|_{1,\Omega}^2\right).$$

En reprenant la même démarche pour la quantité A_{2m}, on obtient les mêmes encadrements de A_{2m} par B_{2m} ce qui permet, en les ajoutant, de terminer la preuve. ■

Les estimateurs obtenus sont décomposés en deux parties. En effet, en considérant la solution u du problème continu (8.5), $u_{h\tau}$,u_τ, en posant $p = \nabla u$, $p_\tau = \nabla u_\tau$, en considérant p_h^m une approximation de ∇u_h^m et en posant $p_{h\tau} = \dfrac{t - t_{m-1}}{\tau_m}p_h^m + \dfrac{t_m - t}{\tau_m}p_h^{m-1}$, on obtient, par inégalité triangulaire

$$|||((u,p)(t_n) - (u_{h\tau}, p_{h\tau}))(t_n)||| \leq |||((u,p) - (u_\tau, p_\tau))(t_n)||| + |||((u_\tau, p_\tau) - (u_{h\tau}, p_{h\tau}))(t_n)|||.$$

On majore et minore alors chacune des erreurs $|||((u,p)-(u_\tau,p_\tau))(t_n)|||$ et $|||((u_\tau,p_\tau)-(u_{h\tau},p_{h\tau}))(t_n)|||$. On obtient ainsi des estimateurs "optimaux" au sens de Bernardi *et al.* [19].
On commence donc par l'estimation du terme $|||((u,p)-(u_\tau,p_\tau))(t_n)|||$. Puisque ce terme est indépendant de la méthode de discrétisation en espace utilisée, on se contente de donner rapidement les étapes de cette étude. Pour plus de détails, le lecteur pourra se référer à Bergam *et al.*[12, 15].

8.4.3 Estimateur η_n pour le problème semi-discrétisé

Borne supérieure

Pour chaque n, $1 \leq n \leq N$, l'estimateur η_n est le suivant:

$$\eta_n = (\frac{\tau_n}{3})^{\frac{1}{2}}(|u_h^n - u_h^{n-1}|_{1,\Omega} + ||p_h^n - p_h^{n-1}||_{0,\Omega}).$$

Soit π_τ l'opérateur d'interpolation des fonctions de $\mathcal{C}^0([0,T])$, dans l'espace des fonctions $L^2([0,T])$, constantes par morceaux. Plus précisemment on a:
pour toute fonction $v \in \mathcal{C}^0([0,T])$, $\pi_\tau v$ est constante sur tout intervalle $[t_{n-1}, t_n]$, $1 \leq n \leq N$ et égale à $v(t_n)$. L'opérateur π_τ vérifie le lemme suivant:

Lemme 8.8. *Si la fonction v admet une dérivée continue dans $[0,T]$, alors les estimations suivantes sont satisfaites*

$$\begin{aligned} ||v - \pi_\tau v||_{L^2([0,T])} &\leq c\,(\max_{1\leq m\leq N} \tau_m)\,||v'||_{L^2([0,T])}, \\ \sup_{0\leq s\leq t_n} |(v - \pi_\tau v)(s)| &\leq c\,(\max_{1\leq m\leq N} \tau_m) \sup_{0\leq s\leq t_n} |v'(s)|. \end{aligned}$$

L'estimation de $|||((u,p) - (u_\tau, p_\tau))(t_n)|||$ est donnée par la proposition suivante:

Proposition 8.9. *Supposons que la donnée f soit dans $\mathcal{C}^0(0,T;L^2(\Omega))$ et que la fonction u_0 soit dans $H_0^1(\Omega)$. Alors, il existe une constante positive c, telle que*

$$\begin{aligned} |||((u,p) - (u_\tau,p_\tau))(t_n)||| \leq c\Bigg(&(1+\sigma_\tau^{\frac{1}{2}})|||((u_\tau,p_\tau) - (u_{h\tau},p_{h\tau}))(t_n)||| \\ &+(\sum_{m=1}^{n} \eta_m^2)^{\frac{1}{2}} + ||f - \pi_\tau f||_{L^2(0,t_n;L^2(\Omega))}\Bigg). \end{aligned}$$

Preuve.

Soit $v \in H_0^1(\Omega)$. En utilisant la définition de u_τ, la formulation semi-discrète (8.6) s'écrit

$$\int_\Omega \frac{\partial u_\tau}{\partial t} v\,dx + \int_\Omega \nabla u^m \nabla v\,dx = \int_\Omega f^m\,v\,dx.$$

En introduisant convenablement u_τ, on obtient

$$\int_\Omega \frac{\partial u_\tau}{\partial t} v\,dx + \int_\Omega \nabla u_\tau \nabla v\,dx = \int_\Omega f^m\,v\,dx + \int_\Omega \nabla(u_\tau - u^m)\nabla v\,dx. \tag{8.12}$$

En soustrayant (8.12) au problème continu (8.5), on obtient

$$\int_\Omega \frac{\partial(u - u_\tau)}{\partial t} v\,dx + \int_\Omega \nabla(u - u_\tau)\nabla v\,dx = \int_\Omega (f - f^m)\,v\,dx + \int_\Omega \nabla(u_\tau - u^m)\nabla v\,dx. \tag{8.13}$$

Par définition de p et p_τ, on a

$$\int_\Omega \frac{\partial(u-u_\tau)}{\partial t} v\,dx + \frac{1}{2}\int_\Omega \nabla(u-u_\tau)\nabla v\,dx + \frac{1}{2}\int_\Omega (p-p_\tau).\nabla v\,dx$$
$$= \int_\Omega (f-f^m)\,v\,dx + \int_\Omega \nabla(u_\tau - u^m)\nabla v\,dx.$$

En prenant $v = u - u_\tau$, en intégrant sur I_m et en sommant sur m et en remarquant que $(u-u_0)(t_0) = 0$, on aboutit à l'égalité,

$$\frac{1}{2}|||((u,p)-(u_\tau,p_\tau))(t_n)|||^2 = \sum_{m=1}^{n}\Bigg(\int_{t_{m-1}}^{t_m}\int_\Omega (f-f^m)(u-u_\tau)\,dx\,dt$$
$$+ \int_{t_{m-1}}^{t_m}\int_\Omega \nabla(u_\tau-u^m)\nabla(u-u_\tau)\,dx\,dt\Bigg).$$

On réécrit cette dernière égalité sous la forme:

$$\frac{1}{2}|||((u,p)-(u_\tau,p_\tau))(t_n)|||^2 = \sum_{m=1}^{n}\Bigg(\int_{t_{m-1}}^{t_m}\int_\Omega (f-f^m)(u-u_\tau)\,dx\,dt$$
$$+ \frac{1}{2}\int_{t_{m-1}}^{t_m}\int_\Omega \nabla(u_\tau-u^m)\nabla(u-u_\tau)\,dx\,dt$$
$$+ \frac{1}{2}\int_{t_{m-1}}^{t_m}\int_\Omega (p_\tau-p^m)\nabla(u-u_\tau)\,dx\,dt\Bigg).$$

On étudie maintenant chacun des termes séparément.
On a par Cauchy-Schwarz, l'inégalité de Poincaré et la définition de π_τ

$$\int_{t_{m-1}}^{t_m}\int_\Omega (f-f^m)(u-u_\tau)\,dx\,dt \le c\left(\int_{t_{m-1}}^{t_m} ||f-\pi_\tau f||_{0,\Omega}^2\right)^{\frac{1}{2}}\left(\int_{t_{m-1}}^{t_m} |u-u_\tau|_{1,\Omega}^2\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Par sommation sur m, il vient

$$\sum_{m=1}^{n}\int_{t_{m-1}}^{t_m}\int_\Omega (f-f^m)(u-u_\tau)\,dx\,dt \le c\,||f-\pi_\tau f||_{L^2(0,t_n;L^2(\Omega))}|||(u,p)-(u_\tau,p_\tau)(t_n)|||. \tag{8.14}$$

De même,

$$\int_{t_{m-1}}^{t_m}\int_\Omega \nabla(u_\tau-u^m)\nabla(u-u_\tau)\,dx\,dt \le \left(\int_{t_{m-1}}^{t_m} |u_\tau-u^m|_{1,\Omega}^2\,dt\right)^{\frac{1}{2}}\left(\int_{t_{m-1}}^{t_m} |u-u_\tau|_{1,\Omega}^2\,dt\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Puisque l'on a $u_\tau = \dfrac{t - t_{m-1}}{\tau_m} u^m + \dfrac{t_m - t}{\tau_m} u^{m-1}$, on obtient

$$\left(\int_{t_{m-1}}^{t_m} |u_\tau - u^m|_{1,\Omega}^2 \, dt \right)^{\frac{1}{2}} = (\frac{\tau_m}{3})^{\frac{1}{2}} |u^m - u^{m-1}|_{1,\Omega}.$$

Finalement, on a la majoration suivante

$$\begin{aligned}
&\sum_{m=1}^{n} \int_{t_{m-1}}^{t_m} \int_\Omega \nabla(u_\tau - u^m) \nabla(u - u_\tau) \, dx \, dt \\
&\qquad \leq \sum_{m=1}^{n} (\frac{\tau_m}{3})^{\frac{1}{2}} |u^m - u_h^m|_{1,\Omega} \left(\int_{t_{m-1}}^{t_m} |u - u_\tau|_{1,\Omega}^2 \, dt \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\qquad\quad + \sum_{m=1}^{n} (\frac{\tau_m}{3})^{\frac{1}{2}} |u_h^m - u_h^{m-1}|_{1,\Omega} \left(\int_{t_{m-1}}^{t_m} |u - u_\tau|_{1,\Omega}^2 \, dt \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\qquad\quad + \sum_{m=1}^{n} (\frac{\tau_m}{3})^{\frac{1}{2}} |u^{m-1} - u_h^{m-1}|_{1,\Omega} \left(\int_{t_{m-1}}^{t_m} |u - u_\tau|_{1,\Omega}^2 \, dt \right)^{\frac{1}{2}}.
\end{aligned}$$

De même on obtient pour $\displaystyle\int_{t_{m-1}}^{t_m} \int_\Omega (p_\tau - p^m) \nabla(u - u_\tau) \, dx \, dt$ la majoration suivante:

$$\begin{aligned}
&\sum_{m=1}^{n} \int_{t_{m-1}}^{t_m} \int_\Omega (p_\tau - p^m) \nabla(u - u_\tau) \, dx \, dt \\
&\qquad \leq \sum_{m=1}^{n} (\frac{\tau_m}{3})^{\frac{1}{2}} ||p^m - p_h^m||_{0,\Omega} \left(\int_{t_{m-1}}^{t_m} |u - u_\tau|_{1,\Omega}^2 \, dt \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\qquad\quad + \sum_{m=1}^{n} (\frac{\tau_m}{3})^{\frac{1}{2}} ||p_h^m - p_h^{m-1}||_{0,\Omega} \left(\int_{t_{m-1}}^{t_m} |u - u_\tau|_{1,\Omega}^2 \, dt \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\qquad\quad + \sum_{m=1}^{n} (\frac{\tau_m}{3})^{\frac{1}{2}} ||p^{m-1} - p_h^{m-1}||_{0,\Omega} \left(\int_{t_{m-1}}^{t_m} |u - u_\tau|_{1,\Omega}^2 \, dt \right)^{\frac{1}{2}}.
\end{aligned}$$

En regroupant les deux dernières majorations, on obtient:

$$\sum_{m=1}^{n}\int_{t_{m-1}}^{t_m}\int_\Omega \nabla(u_\tau - u^m)\nabla(u-u_\tau)\,dx\,dt + \int_{t_{m-1}}^{t_m}\int_\Omega (p_\tau - p^m)\nabla(u-u_\tau)\,dx\,dt$$
$$\leq \sum_{m=1}^{n}(\frac{\tau_m}{3})^{\frac{1}{2}}\left(|u^m - u_h^m|_{1,\Omega} + ||p^m - p_h^m||_{0,\Omega}\right)\left(\int_{t_{m-1}}^{t_m}|u-u_\tau|_{1,\Omega}^2\,dt\right)^{\frac{1}{2}}$$
$$+\sum_{m=1}^{n}\eta_m\left(\int_{t_{m-1}}^{t_m}|u-u_\tau|_{1,\Omega}^2\,dt\right)^{\frac{1}{2}}$$
$$+\sum_{m=1}^{n}(\frac{\tau_m}{3})^{\frac{1}{2}}\left(|u^{m-1} - u_h^{m-1}|_{1,\Omega} + ||p^{m-1} - p_h^{m-1}||_{0,\Omega}\right)\left(\int_{t_{m-1}}^{t_m}|u-u_\tau|_{1,\Omega}^2\,dt\right)^{\frac{1}{2}}.$$

En utilisant le fait que $\tau_m \leq \sigma_\tau \tau_{m-1}$, on trouve la majoration suivante

$$\sum_{m=1}^{n}\int_{t_{m-1}}^{t_m}\int_\Omega \nabla(u_\tau - u^m)\nabla(u-u_\tau)\,dx\,dt + \int_{t_{m-1}}^{t_m}\int_\Omega (p_\tau - p^m)\nabla(u-u_\tau)\,dx\,dt$$
$$\leq c\left\{|||((u_\tau,p_\tau)-(u_{h\tau},p_{h\tau}))(t_n)||| + \left(\sum_{m=1}^{n}\eta_m^2\right)^{\frac{1}{2}}\right. \tag{8.15}$$
$$\left.+\sqrt{\sigma_\tau}\,|||((u_\tau,p_\tau)-(u_{h\tau},p_{h\tau}))(t_n)|||\right\}|||((u,p)-(u_\tau,p_\tau))(t_n)|||.$$

En regroupant (8.14) et (8.15), on obtient la majoration voulue. ■

Borne inférieure

On a la proposition suivante:

Proposition 8.10. *Pour tout n, $1 \leq n \leq N$, on a*

$$\eta_n \leq c\Big(||(u^n,p^n)-(u_h^n,p_h^n)|| + \sigma_\tau^{\frac{1}{2}}||(u^{n-1},p^{n-1})-(u_h^{n-1},p_h^{n-1})||$$
$$+||\nabla(u-u_\tau)||_{L^2(t_{n-1},t_n;L^2(\Omega))}$$
$$+||\frac{\partial(u-u_\tau)}{\partial t}||_{L^2(t_{n-1},t_n;H^{-1}(\Omega))}$$
$$+||f-\pi_\tau f||_{L^2(t_{n-1},t_n;L^2(\Omega))}\Big).$$

Preuve.
En introduisant convenablement u^n, u^{n-1}, p^n et p^{n-1} dans l'estimateur η_n et en utilisant

l'inégalité triangulaire, on a

$$\begin{aligned}\eta_n \leq & (\frac{\tau_n}{3})^{\frac{1}{2}}|u^n - u^{n-1}|_{1,\Omega} + (\frac{\tau_n}{3})^{\frac{1}{2}}|u^n - u_h^n|_{1,\Omega} + (\frac{\tau_n}{3})^{\frac{1}{2}}|u^{n-1} - u_h^{n-1}|_{1,\Omega} \\ & + \frac{\tau_n}{3})^{\frac{1}{2}}||p^n - p^{n-1}||_{0,\Omega} + \frac{\tau_n}{3})^{\frac{1}{2}}||p^n - p_h^n||_{0,\Omega} + \frac{\tau_n}{3})^{\frac{1}{2}}||p^{n-1} - p_h^{n-1}||_{0,\Omega} \\ \leq & 2\Bigg(\sqrt{\frac{1}{3}}||(u^n, p^n) - (u_h^n, p_h^n)|| + \sqrt{\frac{\sigma_\tau}{3}}||(u^{n-1}, p^{n-1}) - (u_h^{n-1}, p_h^{n-1})|| \\ & + (\frac{\tau_n}{3})^{\frac{1}{2}}|u^n - u^{n-1}|_{1,\Omega}\Bigg).\end{aligned}$$

Il reste donc le terme $(\frac{\tau_n}{3})^{\frac{1}{2}}|u^n - u^{n-1}|_{1,\Omega}$ à évaluer. Pour cela, on prend $v = u^n - u^{n-1}$ dans (8.13) et on intègre entre t_{n-1} et t_n.
En remarquant que $-\int_{t_{n-1}}^{t_n}\int_\Omega \nabla(u_\tau - u^n)\nabla(u^n - u^{n-1})\,dx\,dt = \frac{\tau_n}{2}|u^n - u^{n-1}|_{1,\Omega}^2$, on obtient

$$\begin{aligned}\frac{\tau_n}{2}|u^n - u^{n-1}|_{1,\Omega}^2 = & \int_{t_{n-1}}^{t_n}\int_\Omega \frac{\partial(u - u_\tau)}{\partial t}(u^n - u^{n-1})\,dx\,dt \\ & + \int_{t_{n-1}}^{t_n}\int_\Omega \nabla(u - u_\tau)\nabla(u^n - u^{n-1})\,dx\,dt \\ & - \int_{t_{n-1}}^{t_n}\int_\Omega (f - f^m)\,(u^n - u^{n-1})\,dx\,dt\end{aligned}$$

En utilisant Cauchy-Schwarz et Poincaré, on obtient la majoration suivante

$$\begin{aligned}\frac{\tau_n}{2}|u^n - u^{n-1}|_{1,\Omega}^2 \leq c\Big\{&||\frac{\partial(u - u_\tau)}{\partial t}||_{L^2(t_{n-1},t_n;L^2(\Omega))} + ||f - \pi_\tau f||_{L^2(t_{n-1},t_n;L^2(\Omega))} \\ & + ||\nabla(u - u_\tau)||_{L^2(t_{n-1},t_n;L^2(\Omega))}\Big\}\tau_n\,|u^n - u^{n-1}|_{1,\Omega}.\end{aligned}$$

■

8.4.4 Estimateur $\eta_{n,V}$ pour le schéma sans concentration de masse

Considérons l'estimateur suivant:

$$\eta_{n,V} = h_V||\frac{u_h^{n-1} - u_h^n}{\tau_n} + f_h^n + divp_h^n||_{0,V} + ||p_h^n - \nabla u_h^n||_{0,V},$$

On va montrer que l'on peut obtenir un encadrement de l'erreur $|||((u_\tau, p_\tau) - (u_{h\tau}, p_{h\tau})(t_n)|||$ en fonction de $\eta_{n,V}$.

Borne supérieure

On a la proposition suivante:

Proposition 8.11. *Si la fonction f est dans $\mathcal{C}^0(0,T;L^2(\Omega))$,si la fonction u_0 est dans $H^1(\Omega)$ telle que $u_h^0 \equiv u_0$, alors, à chaque instant t_n, $1 \leq n \leq N$, on a l'estimation suivante:*

$$|||((u_\tau, p_\tau) - (u_{h\tau}, p_{h\tau}))(t_n)||| \leq c \left(\sum_{m=1}^{n} \tau_m \sum_{V \in \mathcal{P}_h} (h_V^2 ||f^m - f_h^m||_{0,V}^2 + \eta_{m,V}^2) \right)^{\frac{1}{2}}$$

Preuve.
Soient m donné fixé et $v \in H_0^1(\Omega)$. En utilisant les formulations du problème semi-discrétisé (problème (8.6)) et du problème discrétisé (problème (8.7)), on a

$$\begin{aligned}
\int_\Omega (u^m - u_h^m)\, v\, dx + \tau_m \int_\Omega \nabla(u^m - u_h^m).\nabla v\, dx = \\
\int_\Omega (u^m - u_h^m)\, v\, dx + \tau_m \int_\Omega \nabla(u^m - u_h^m).\nabla v\, dx \\
+\tau_m \int_\Omega div\, p^m\, v\, dx + \tau_m \int_\Omega f^m\, v\, dx - \int_\Omega (u^m - u^{m-1})\, v\, dx \\
-\tau_m \int_\Omega div\, p_h^m\, v_h\, dx - \tau_m \int_\Omega f_h^m\, v_h\, dx + \int_\Omega (u_h^m - u_h^{m-1})\, v_h\, dx,
\end{aligned}$$

où v_h est une fonction constante par volume V.
On obtient ensuite l'égalité suivante:

$$\begin{aligned}
\int_\Omega (u^m - u_h^m)\, v\, dx + \tau_m \int_\Omega \nabla(u^m - u_h^m).\nabla v\, dx = \\
\int_\Omega (u^{m-1} - u_h^{m-1})\, v\, dx + \tau_m \int_\Omega \nabla(u^m - u_h^m).\nabla v\, dx \\
+\tau_m \int_\Omega div(p^m - p_h^m)\, v\, dx + \tau_m \int_\Omega (f^m - f_h^m)\, v\, dx \\
+ \int_\Omega \left(u_h^m - u_h^{m-1} - \tau_m\, div\, p_h^m - \tau_m\, f_h^m\right)(v_h - v)\, dx.
\end{aligned}$$

En intégrant par parties le terme $\tau_m \int_\Omega div(p^m - p_h^m)\, v\, dx$, on obtient

$$\tau_m \int_\Omega div(p^m - p_h^m)\, v\, dx = -\tau_m \int_\Omega (p^m - p_h^m).\nabla v\, dx \text{ puisque } v \in H_0^1(\Omega).$$

De plus, à l'aide de la relation $p^m = \nabla u^m$, on a

$$\tau_m \int_\Omega div(p^m - p_h^m)\, v\, dx = -\tau_m \int_\Omega (\nabla u^m - p_h^m).\nabla v\, dx.$$

En reportant cette dernière relation dans l'expression précédente, on obtient le résultat final suivant:

$$\begin{aligned}\int_\Omega (u^m - u_h^m)\, v\, dx + \tau_m \int_\Omega \nabla(u^m - u_h^m).\nabla v\, dx &= \int_\Omega (u^{m-1} - u_h^{m-1})\, v\, dx \\ &+\tau_m \int_\Omega (p_h^m - \nabla u_h^m).\nabla v\, dx + \tau_m \int_\Omega (f^m - f_h^m)\, v\, dx \\ &+ \int_\Omega \left(\tau_m\, div\, p_h^m + \tau_m\, f_h^m - (u_h^m - u_h^{m-1})\right)(v - v_h)\, dx.\end{aligned} \tag{8.16}$$

Comme cette relation est vraie pour tout $v \in H_0^1(\Omega)$, on prend en particulier $v = u^m - u_h^m$. De plus, on introduit $\tilde{v}_h$ l'interpolé de Clément de v sur le volume V et on choisit v_h comme étant la valeur moyenne de $\tilde{v}_h$ sur le volume V. Avec tous ces choix, pour tout m, on obtient la relation suivante:

$$\begin{aligned}||u^m - u_h^m||_{0,\Omega}^2 + \tau_m |u^m - u_h^m|_{1,\Omega}^2 &= \int_\Omega (u^{m-1} - u_h^{m-1})\,(u^m - u_h^m)\, dx \\ &+ \tau_m \int_\Omega (p_h^m - \nabla u_h^m).\nabla(u^m - u_h^m)\, dx + \tau_m \int_\Omega (f^m - f_h^m)\,(v - \tilde{v}_h)\, dx \\ &+ \tau_m \int_\Omega (f^m - f_h^m)\,(\tilde{v}_h)\, dx + \int_\Omega \left(\tau_m\, div\, p_h^m + \tau_m\, f_h^m - (u_h^m - u_h^{m-1})\right)(v - \tilde{v}_h)\, dx. \\ &+ \int_\Omega \left(\tau_m\, div\, p_h^m + \tau_m\, f_h^m - (u_h^m - u_h^{m-1})\right)(\tilde{v}_h - v_h)\, dx.\end{aligned}$$

De plus, comme f_h^m est la projection $L^2(\Omega)$ de f^m sur l'espace V_h des fonctions constantes par volume, on a

$$\forall\, w_h \in V_h, \quad \int_\Omega (f^m - f_h^m)\, w_h\, dx = 0.$$

En particulier, en prenant dans cette relation $w_h = v_h$, la relation précédente devient:

$$\begin{aligned}||u^m - u_h^m||^2 = \int_\Omega (u^{m-1} - u_h^{m-1})\,(u^m - u_h^m)\, dx &+ \tau_m \int_\Omega (f^m - f_h^m)\,(v - \tilde{v}_h)\, dx \\ &+ \tau_m \int_\Omega (p_h^m - \nabla u_h^m).\nabla(u^m - u_h^m)\, dx + \tau_m \int_\Omega (f^m - f_h^m)\,(\tilde{v}_h - v_h)\, dx \\ &+ \tau_m \int_\Omega \left(div p_h^m + f_h^m - \frac{u_h^m - u_h^{m-1}}{\tau_m}\right)(v - \tilde{v}_h)\, dx. \\ &+ \tau_m \int_\Omega \left(div p_h^m + f_h^m - \frac{u_h^m - u_h^{m-1}}{\tau_m}\right)(\tilde{v}_h - v_h)\, dx.\end{aligned}$$

En utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, les propriétés de l'opérateur de Clément, celles

pour la valeur moyenne et l'inégalité de Poincaré, on aboutit à:

$$||u^m - u_h^m||^2 \leq ||u^{m-1} - u_h^{m-1}||_{0,\Omega}\, ||u^m - u_h^m||_{0,\Omega} + c\,\tau_m\, |u^m - u_h^m|_{1,\Omega} \Big(||p_h^m - \nabla u_h^m||_{0,\Omega}$$
$$+ (\sum_{V\in\mathcal{P}_h} h_V^2\, ||f^m - f_h^m||_{0,V}^2)^{\frac{1}{2}} + (\sum_{V\in\mathcal{P}_h} h_V^2\, ||divp_h^m + f_h^m - \frac{u_h^m - u_h^{m-1}}{\tau_m}||_{0,V}^2)^{\frac{1}{2}} \Big)$$

En utilisant de nouveau Cauchy-Schwarz on obtient alors,

$$||u^m - u_h^m||^2 \leq \Big(||u^{m-1} - u_h^{m-1}||_{0,\Omega}^2 + c\,\tau_m \Big(||p_h^m - \nabla u_h^m||_{0,\Omega} + (\sum_{V\in\mathcal{P}_h} h_V^2\, ||f^m - f_h^m||_{0,V}^2)^{\frac{1}{2}}$$
$$+ (\sum_{V\in\mathcal{P}_h} h_V^2\, ||divp_h^m + f_h^m - \frac{u_h^m - u_h^{m-1}}{\tau_m}||_{0,\Omega}^2)^{\frac{1}{2}} \Big)^2 \Big)^{\frac{1}{2}} ||u^m - u_h^m||.$$

La relation finale s'écrit alors, pour tout m,

$$||u^m - u_h^m||^2 \leq ||u^{m-1} - u_h^{m-1}||_{0,\Omega}^2 + c\,\tau_m \Big(||p_h^m - \nabla u_h^m||_{0,\Omega}^2 + \sum_{V\in\mathcal{P}_h} h_V^2\, ||f^m - f_h^m||_{0,V}^2$$
$$+ \sum_{V\in\mathcal{P}_h} h_V^2\, ||divp_h^m + f_h^m - \frac{u_h^m - u_h^{m-1}}{\tau_m}||_{0,V}^2 \Big).$$

Comme cette relation est vraie pour tout m, il suffit de sommer sur m de 1 à n, en supposant que $u_h^0 \equiv u_0$, pour obtenir

$$||u^n - u_h^n||_{0,\Omega}^2 + \sum_{m=1}^{n} \tau_m |u^m - u_h^m|_{1,\Omega}^2 \leq c \sum_{m=1}^{n} \tau_m \sum_{V\in\mathcal{P}_h} (h_V^2 ||f^m - f_h^m||_{0,V}^2 + \eta_{m,V}^2).$$

Il reste à étudier le terme $\sum_{m=1}^{n} \tau_m ||p^m - p_h^m||_{0,\Omega}^2$.
En utilisant l'inégalité triangulaire, on aboutit à

$$\tau_m ||p^m - p_h^m||_{0,\Omega}^2 \leq \tau_m |u^m - u_h^m|_{1,\Omega}^2 + \tau_m ||p_h^m - \nabla u_h^m||_{0,\Omega}^2.$$

En sommant sur m, en utilisant ce qui précède et le fait que
$\sum_{m=1}^{n} \tau_m\, ||p_h^m - \nabla u_h^m||_{0,\Omega}^2 \leq \sum_{m=1}^{n} \tau_m\, \eta_{m,V}^2$, puis en ajoutant les deux dernières inégalités obtenues et en utilisant l'équivalence entre les normes $||(\cdot,\cdot)||_n$ et $|||(\cdot,\cdot)|||$, on termine la preuve. ■

Borne inférieure

Proposition 8.12. *On suppose que la fonction f est dans $\mathcal{C}^0(0,T;L^2(\Omega))$, que la fonction u_0 est dans $H_0^1(\Omega)$. Pour chaque indicateur $\eta_{n,V}$ on a l'estimation locale suivante:*

$$\eta_{n,V} \leq c\Big(h_V\,||\frac{(u^n-u_h^n)-(u^{n-1}-u_h^{n-1})}{\tau_n}||_{0,V}+||p^n-p_h^n||_{0,V}$$
$$+\,|u^n-u_h^n|_{1,V}+h_V\,||f^n-f_h^n||_{0,V}\Big).$$

Preuve.
La démonstration s'effectue en deux temps.
On commence par majorer $||\frac{u_h^{n-1}-u_h^n}{\tau_n}+f_h^n+divp_h^n||_{0,V}$ localement en utilisant la fonction bulle Ψ_V introduite selon l'idée de Verfürth [59], pour se ramener à une quantité définie localement, puis dans un deuxième temps, on majore $||p_h^n-\nabla u_h^n||_{0,V}$.

Majoration de $||\frac{u_h^{n-1}-u_h^n}{\tau_n}+f_h^n+divp_h^n||_{0,V}$.

On prend $v_h=0$ et $v=(f_h^n+div\,p_h^n-(\frac{u_h^n-u_h^{n-1}}{\tau_n}))\Psi_V$ dans (8.16). On obtient alors, après multiplication par τ_n^{-1}, l'expression:

$$\int_V \frac{u^n-u_h^n}{\tau_n}\,v\,dx+\int_V \nabla(u^n-u_h^n).\nabla v\,dx=\int_V \frac{u^{n-1}-u_h^{n-1}}{\tau_n}\,v\,dx+\int_V (p_h^n-\nabla u_h^n).\nabla v\,dx$$
$$+\int_V (f^n-f_h^n)\,v\,dx+||(f_h^n+div\,p_h^n-\frac{u_h^n-u_h^{n-1}}{\tau_n})\Psi_V^{\frac{1}{2}}||_{0,V}^2.$$

En utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on a

$$||(f_h^n+div\,p_h^n-\frac{u_h^n-u_h^{n-1}}{\tau_n})\Psi_V^{\frac{1}{2}}||_{0,V}^2\leq||\frac{(u^n-u_h^n)-(u^{n-1}-u_h^{n-1})}{\tau_n}||_{0,V}||v||_{0,V}$$
$$+\,||p_h^n-\nabla u_h^n||_{0,V}|v|_{1,V}+||f^n-f_h^n||_{0,V}||v||_{0,V}+|u^n-u_h^n|_{1,V}|v|_{1,V}.$$

De plus, d'après les propriétés du lemme (8.4), on a

$$||(f_h^n+div\,p_h^n-\frac{u_h^n-u_h^{n-1}}{\tau_n})\Psi_V||_{0,V}\quad\leq c\,||f_h^n+div\,p_h^n-\frac{u_h^n-u_h^{n-1}}{\tau_n}||_{0,V},$$
$$c\,||f_h^n+div\,p_h^n-\frac{u_h^n-u_h^{n-1}}{\tau_n}||_{0,V}\qquad\leq||(f_h^n+div\,p_h^n-\frac{u_h^n-u_h^{n-1}}{\tau_n})\Psi_V^{\frac{1}{2}}||_{0,V}.$$

En utilisant, en outre, l'inégalité inverse $||\nabla v||_{0,V}\leq c\,h_V^{-1}||v||_{0,V}$, on arrive à la majoration suivante de la première partie de l'estimateur:

$$h_v \, ||f_h^n + div\, p_h^n - \frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{\tau_n}||_{0,V} \leq c \left(h_V \, ||\frac{(u^n - u_h^n) - (u^{n-1} - u_h^{n-1})}{\tau_n}||_{0,V} \right.$$
$$\left. + ||p_h^n - \nabla u_h^n||_{0,V} + h_V \, ||f^n - f_h^n||_{0,V} + |u^n - u_h^n|_{1,V} \right).$$

Majoration de $||p_h^n - \nabla u_h^n||_{0,V}$.
Cet estimateur est simple à obtenir puisqu'il suffit d'utiliser la relation $p^n = \nabla u^n$ et l'inégalité triangulaire pour obtenir le résultat suivant:

$$||p_h^n - \nabla u_h^n||_{0,V} \leq ||p^n - p_h^n||_{0,V} + |u^n - u_h^n|_{1,V}.$$

En sommant cette dernière inégalité avec celle obtenue précédemment, on obtient le résultat désiré. ■

On présente maintenant les bornes supérieure et inférieure pour les estimateurs en espace du problème (8.8) c'est à dire dans le cas où on utilise une technique de condensation de la masse (ou "mass lumping") dans la prise en compte de la dérivée en temps.

8.4.5 Estimateur $\eta_{n,V}$ pour le problème initial

On se donne l'estimateur suivant:

$$\eta_{n,V} = ||\frac{\Pi_{0,h}(u_h^n - u_h^{n-1}) - (u_h^n - u_h^{n-1})}{\tau_n}||_{0,V} + ||p_h^n - \nabla u_h^n||_{0,V}.$$

Borne supérieure

On a la proposition suivante:

Proposition 8.13. *Si la fonction f est dans $\mathcal{C}^0(0,T;L^2(\Omega))$ et si la fonction u_0 est dans $H^1(\Omega)$ avec $u_h^0 \equiv u_0$, alors, à chaque instant t_n, $1 \leq n \leq N$, on a l'estimation suivante:*

$$|||((u_\tau, p_\tau) - (u_{h\tau}, p_{h\tau}))(t_n)||| \leq c\Big(\sum_{m=1}^{n} \tau_m \sum_{V\in\mathcal{P}_h} (h^2||f^m - f_h^m||_{0,V}^2 + \eta_{m,V}^2)\Big)^{\frac{1}{2}}.$$

Preuve.
Soient $m \in \mathbb{N}^*$ fixé et $v \in H_0^1(\Omega)$. Comme précédemment, en utilisant les formulations du problème semi-descrétisé (8.6) et du problème discrétisé (8.8), on a

$$\begin{aligned}
\int_\Omega (u^m - u_h^m)\, v\, dx + \tau_m \int_\Omega \nabla(u^m - u_h^m).\nabla v\, dx = \\
&\int_\Omega (u^m - u_h^m)\, v\, dx + \tau_m \int_\Omega \nabla(u^m - u_h^m).\nabla v\, dx \\
&+\tau_m \int_\Omega div\, p^m\, v\, dx + \tau_m \int_\Omega f^m\, v\, dx - \int_\Omega (u^m - u^{m-1})\, v\, dx \\
&-\tau_m \int_\Omega div\, p_h^m\, v_h\, dx - \tau_m \int_\Omega f_h^m\, v_h\, dx + \int_\Omega \big(\Pi_{0,h}(u_h^m - u_h^{m-1})\big)\, v_h\, dx,
\end{aligned}$$

où v_h est une fonction constante par volume V.
En ajoutant les termes adéquats, on obtient:

$$\begin{aligned}
\int_\Omega (u^m - u_h^m)\, v\, dx + \tau_m \int_\Omega \nabla(u^m - u_h^m).\nabla v\, dx = \\
&\int_\Omega (u^{m-1} - u_h^m)\, v\, dx + \tau_m \int_\Omega \nabla(u^m - u_h^m).\nabla v\, dx \\
&+\tau_m \int_\Omega div(p^m - p_h^m)\, v\, dx + \tau_m \int_\Omega (f^m - f_h^m)\, v\, dx \\
&+ \int_\Omega \big(\Pi_{0,h}(u_h^m - u_h^{m-1}) - \tau_m\, div\, p_h^m - \tau_m\, f_h^m\big)\, (v_h - v)\, dx \\
&+ \int_\Omega \Pi_{0,h}(u_h^m - u_h^{m-1})\, v\, dx.
\end{aligned}$$

Or, d'après (8.8), on a

$$\Pi_{0,h}(u_h^m - u_h^{m-1}) - \tau_m \, div p_h^m - \tau_m \, f_h^m = 0.$$

De plus, en reprenant l'argumentation précédente pour $\int_\Omega div(p^m - p_h^m)\, v\, dx$, on obtient la relation finale suivante:

$$\begin{aligned}\int_\Omega (u^m - u_h^m)\, v\, dx + \tau_m \int_\Omega \nabla(u^m - u_h^m).\nabla v\, dx = \\ \int_\Omega (u^{m-1} - u_h^{m-1})\, v\, dx + \tau_m \int_\Omega (f^m - f_h^m)\, v\, dx \\ +\tau_m \int_\Omega (p_h^m - \nabla u_h^m).\nabla v\, dx \\ + \int_\Omega \Big(\Pi_{0,h}(u_h^m - u_h^{m-1}) - (u_h^m - u_h^{m-1})\Big)\, v\, dx.\end{aligned}$$

Comme cette relation est vraie pour tout $v \in H_0^1(\Omega)$, on prend $v = u^m - u_h^m$. De plus, on introduit $\tilde{v}_h$ l'interpolé de Clément de v sur le volume V et on choisit v_h comme étant la valeur moyenne de $\tilde{v}_h$ sur le volume V. Avec tous ces choix, pour tout m, on obtient alors la relation suivante:

$$\begin{aligned}||u^m - u_h^m||_{0,V}^2 + \tau_m \, |u^m - u_h^m|_{1,\Omega}^2 = \int_\Omega (u^m - u_h^{m-1})(u^m - u_h^m) dx \\ + \tau_m \int_\Omega (f^m - f_h^m)\, v\, dx + \tau_m \int_\Omega (p_h^m - \nabla u_h^m).\nabla v\, dx \\ + \int_\Omega \Big(\Pi_{0,h}(u_h^m - u_h^{m-1}) - (u_h^m - u_h^{m-1})\Big)\, v\, dx.\end{aligned}$$

De plus comme précédemment, on a

$$\int_\Omega (f^m - f_h^m)\, v_h\, dx = 0.$$

d'où

$$\begin{aligned}||u^m - u_h^m||^2 \leq \int_\Omega (u^m - u_h^{m-1})(u^m - u_h^m) dx + \tau_m \int_\Omega (f^m - f_h^m)\,(v - \tilde{v}_h)\, dx \\ + \tau_m \int_\Omega (f^m - f_h^m)\,(\tilde{v}_h - v_h)\, dx + \tau_m \int_\Omega (p_h^m - \nabla u_h^m).\nabla v\, dx \\ + \int_\Omega \Big(\Pi_{0,h}(u_h^m - u_h^{m-1}) - (u_h^m - u_h^{m-1})\Big)\, v\, dx.\end{aligned}$$

En utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, les propriétés de l'opérateur de Clément, celles pour la valeur moyenne et l'inégalité de Poincaré, on aboutit à:

$$\begin{aligned}||u^m - u_h^m||^2 \leq\ & ||u^m - u_h^{m-1}||_{0,\Omega}\, ||u^m - u_h^m||_{0,\Omega} + c\,\tau_m\, h\, ||f^m - f_h^m||_{0,\Omega}\, |u^m - u_h^m|_{1,\Omega} \\ & + \tau_m ||p_h^m - \nabla u_h^m||_{0,\Omega}\, |u^m - u_h^m|_{1,\Omega} \\ & + c\,\tau_m ||\frac{\Pi_{0,h}(u_h^m - u_h^{m-1}) - (u_h^m - u_h^{m-1})}{\tau_m}||_{0,\Omega}\, |u^m - u_h^m|_{1,\Omega}.\end{aligned}$$

En utilisant de nouveau Cauchy-Schwarz, on a alors la relation finale pour tout m,

$$\begin{aligned}||u^m - u_h^m||^2 \leq\ & ||u^m - u_h^{m-1}||_{0,\Omega}^2 + c\tau_m \Bigg(h^2\, ||f^m - f_h^m||_{0,\Omega}^2 + ||p_h^m - \nabla u_h^m||_{0,\Omega}^2 \\ & + ||\frac{\Pi_{0,h}(u_h^m - u_h^{m-1}) - (u_h^m - u_h^{m-1})}{\tau_m}||_{0,\Omega}^2 \Bigg).\end{aligned}$$

Comme cette relation est vraie pour tout m, il suffit de sommer sur m de 1 à n, en supposant que $u_h^0 \equiv u_0$, pour obtenir

$$||u^n - u_h^n||_{0,\Omega}^2 + \sum_{m=1}^{n} \tau_m |u^m - u_h^m|_{1,\Omega}^2 \leq c \sum_{m=1}^{n} \tau_m \sum_{V \in \mathcal{P}_h} (h^2 ||f^m - f_h^m||_{0,V}^2 + \eta_{m,V}^2).$$

Il reste à étudier le terme $\displaystyle\sum_{m=1}^{n} \tau_m ||p^m - p_h^m||_{0,\Omega}^2$.
En utilisant l'inégalité triangulaire, on aboutit à

$$\tau_m ||p^m - p_h^m||_{0,\Omega}^2 \leq \tau_m |u^m - u_h^m|_{1,\Omega}^2 + \tau_m ||p_h^m - \nabla u_h^m||_{0,\Omega}^2.$$

En sommant sur m, en utilisant ce qui précède et le fait que
$\displaystyle\sum_{m=1}^{n} \tau_m\, ||p_h^m - \nabla u_h^m||_{0,\Omega}^2 \leq \sum_{m=1}^{n} \tau_m\, \eta_{m,V}^2$, puis en ajoutant les deux dernières inégalités obtenues et en utilisant l'équivalence entre les normes $||(\cdot,\cdot)||_n$ et $|||(\cdot,\cdot)|||$, on termine la preuve. ■

Comme pour l'estimateur précédent, on montre, dans le paragraphe suivant, que cet estimateur minore l'erreur.

Borne inférieure

On montre la proposition suivante:

Proposition 8.14. *On suppose que la fonction f est dans $\mathcal{C}^0(0,T;L^2(\Omega))$ et que la fonction u_0 est dans $H_0^1(\Omega)$. Pour chaque indicateur $\eta_{n,V}$ on a l'estimation locale suivante:*

$$\eta_{n,V} \leq c\Big(||\frac{(u^n-u_h^n)-(u^{n-1}-u_h^{n-1})}{\tau_n}||_{0,V} + ||p^n-p_h^n||_{0,V} + ||div(p^n-p_h^n)||_{0,V} + |u^n-u_h^n|_{1,V} + ||f^n-f_h^n||_{0,V}\Big).$$

Preuve.
La démonstration s'effectue, comme dans le cas précédent, en deux temps. On commence par majorer $||\frac{\Pi_{0,h}(u_h^n-u_h^{n-1})-(u_h^n-u_h^{n-1})}{\tau_n}||_{0,V}$ puis $||p_h^n-\nabla u_h^n||_{0,V}$.

Majoration de $||\frac{\Pi_{0,h}(u_h^n-u_h^{n-1})-(u_h^n-u_h^{n-1})}{\tau_n}||_{0,V}$

On a d'après la forme discrète (8.8),

$$\frac{\Pi_{0,h}(u_h^n-u_h^{n-1})}{\tau_n} = div\, p_h^n + f_h^n. \tag{8.17}$$

En multipliant par $v \in L^2(\Omega)$ et en intégrant sur Ω la relation (8.17), on obtient

$$\int_\Omega \frac{\Pi_{0,h}(u_h^n-u_h^{n-1})}{\tau_n}\, v\, dx = \int_\Omega v\, div\, p_h^n\, dx + \int_\Omega f_h^n\, v\, dx.$$

En retranchant cette quantité à celle obtenue avec le problème semi-discrétisé (8.6), on aboutit à la relation ci-dessous

$$\int_\Omega \frac{u^n-u_h^{n-1}}{\tau_n}\, v\, dx - \int_\Omega \frac{\Pi_{0,h}(u_h^n-u_h^{n-1})}{\tau_n}\, v\, dx = \int_\Omega v\, div\,(p^n-p_h^n)\, dx + \int_\Omega (f^n-f_h^n)\, v\, dx.$$

En ajoutant et retranchant $\frac{u_h^n-u_h^{n-1}}{\tau_n}$, on a

$$\int_\Omega \frac{(u^n-u_h^{n-1})-(u_h^n-u_h^{n-1})}{\tau_n}\, v\, dx + \int_\Omega \frac{u_h^n-u_h^{n-1}-\Pi_{0,h}(u_h^n-u_h^{n-1})}{\tau_n}\, v\, dx = \int_\Omega v\, div\,(p^n-p_h^n)\, dx + \int_\Omega (f^n-f_h^n)\, v\, dx.$$

En prenant maintenant $v = \frac{u_h^n-u_h^{n-1}-\Pi_{0,h}(u_h^n-u_h^{n-1})}{\tau_n}\,\Psi_V$ dans l'expression précédente et en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on obtient

$$||\frac{\Pi_{0,h}(u_h^n - u_h^{n-1}) - (u_h^n - u_h^{n-1})}{\tau_n}\,\Psi_V^{\frac{1}{2}}||_{0,V}^2 \leq \Big(||\frac{(u^n - u_h^{n-1}) - (u_h^n - u_h^{n-1})}{\tau_n}||_{0,V} + ||div\,(p^n - p_h^n)||_{0,V}$$
$$+ ||f^n - f_h^n||_{0,V}\Big)||\frac{\Pi_{0,h}(u_h^n - u_h^{n-1}) - (u_h^n - u_h^{n-1})}{\tau_n}\,\Psi_V||_{0,V}.$$

En utilisant les propriétés du lemme 8.4, on termine la majoration de la première partie de l'estimateur à savoir

$$||\frac{\Pi_{0,h}(u_h^n - u_h^{n-1}) - (u_h^n - u_h^{n-1})}{\tau_n}||_{0,V} \leq c\Big(||\frac{(u^n - u_h^{n-1}) - (u_h^n - u_h^{n-1})}{\tau_n}||_{0,V} + ||div\,(p^n - p_h^n)||_{0,V}$$
$$+ ||f^n - f_h^n||_{0,V}\Big).$$

Majoration de $||p_h^n - \nabla u_h^n||_{0,V}$.
Cette deuxième partie de l'estimateur s'obtient par l'utilisation de l'inégalité triangulaire et de la relation $p^n = \nabla u^n$:

$$||p_h^n - \nabla u_h^n||_{0,V} \leq ||p^n - p_h^n||_{0,V} + |u^n - u_h^n|_{1,V}.$$

En sommant ces deux majorations, on obtient la majoration annoncée. ■

Dans le paragraphe suivant, on présente les tests numériques pour l'estimateur du problème (8.8).

8.4.6 Tests numériques

Le domaine que nous considérons dans les tests présentés ici est le carré unité $]0,1[\times]0,1[$. Un premier test a été effectué avec pour solution exacte la fonction polynômiale suivante:

$$u(t,x,y) = t^2\,x\,(1-x)\,y\,(1-y).$$

On présente sur les graphiques (8.6) l'évolution des erreurs globales $||(u,p) - (u_h,p_h)||_n$ au cours du temps pour deux estimateurs et la norme exacte de l'erreur. L'estimateur 1 représente la grandeur $||p_h - \nabla u_h^n||_{0,\Omega}$ et l'estimateur 2 la grandeur $\sum_{V\in\mathcal{P}_h} \eta_{n,V}^2$, ceci afin de mesurer l'influence du terme de "mass lumping" $\Delta t^2\,||\frac{\Pi_{0,h}(u_h^n - u_h^{n-1}) - (u_h^n - u_h^{n-1})}{\Delta t}||_{0,\Omega}$.
On constate que l'évolution de l'erreur globale de l'estimateur 1 est quasiment identique à celle de l'erreur exacte alors que l'erreur globale de l'estimateur 2 lui est supérieure. Dans les deux cas, le comportement global est similaire, ce qui montre que les estimateurs prennent bien en compte le comportement de l'erreur exacte. Dans le cas présenté ici, on observe que le fait de prendre en compte le terme de "mass lumping" dans l'estimateur dégrade celui-ci par rapport à l'erreur exacte.

On analyse maintenant le comportement local des estimateurs par rapport au comportement local de l'erreur exacte. Ces résultats sont présentés aux figures (8.7), (8.8), (8.9). On constate qu'au premier pas de temps (figure (8.7)) l'estimateur 1 ne donne pas une bonne représentation locale de l'erreur exacte puisque les erreurs les plus importantes se situent aux coins et les moins importantes au milieu de chaque côté, ce qui est exactement le contraire pour l'erreur exacte. En revanche, l'estimateur 2 donne une bonne représentation de l'erreur exacte locale. Cependant, ces constats peuvent être difficilement interprétables vu l'ordre de grandeur des erreurs locales ($\backsim 10^{-11}$). Au cours du temps, on constate que l'estimateur 1 représente de façon plus fidèle l'erreur exacte que l'estimateur 2 (figures (8.8) et (8.9)). Au temps final, les deux estimateurs donnent les mêmes cartes locales d'erreur que l'erreur exacte avec des valeurs très voisines. Ce dernier constat montre qu'au cours du temps, l'influence du terme de "mass lumping" diminue devant le terme quantifiant l'erreur en espace alors qu'il était prépondérant au début de la simulation.
On reprend l'analyse dans un cas non polynômial.
On prend pour solution dans le second test, la fonction sinusoïdale suivante:

$$u(t,x,y) = sin(\frac{\pi}{2}\,t)\,sin(\pi x)\,sin(\pi y).$$

On présente les résultats de l'évolution des erreurs exactes et estimées aux figures (8.10). On constate un bon comportement des estimateurs 1 et 2 qui suivent bien le comportement de l'erreur exacte. On constate que l'estimateur 1 tend vers l'erreur globale lorsque l'on raffine en espace et en temps, ce qui est moins visible avec l'estimateur 2. Dans ce cas également, le comportement global de l'estimateur 1 est meilleur que celui de l'estimateur 2. On regarde maintenant le comportement local des estimateurs par rapport à l'erreur exacte locale. Les résultats sont présentés aux figures (8.11), (8.12), (8.13), (8.14). Contrairement au cas précédent, l'estimateur 1 donne une bonne représentation de l'erreur locale exacte, ce qui n'est pas le cas pour l'estimateur 2. Toutefois, l'estimateur 2 évolue vers la même représentation locale que l'estimateur 1. Ceci montre que l'influence du terme de "mass lumping" diminue au cours du temps face aux erreurs en espace.

Finalement, les essais numériques montrent que les estimateurs trouvés sont de bons indicateurs d'erreurs locales (bien qu'établis pour des normes globales) puisqu'ils reproduisent, sur ces essais, le comportement de l'erreur exacte au cours du temps et localement en espace. Il paraît difficile de conclure sur l'efficacité plus importante de l'estimateur 1 par rapport à l'estimateur 2 (dans le cas sinusoïdal l'estimateur 1 est meilleur que l'estimateur 2, alors que dans le cas polynômial, l'estimateur 2 est meilleur en début de simulation et tend vers l'estimateur 1 au cours du temps).
On présente un dernier test avec un terme source non régulier. Il s'agit du cas d'une fonction f dont le support, à chaque instant, est une ellipse dont le centre se déplace autour d'un cercle dans le carré unité.

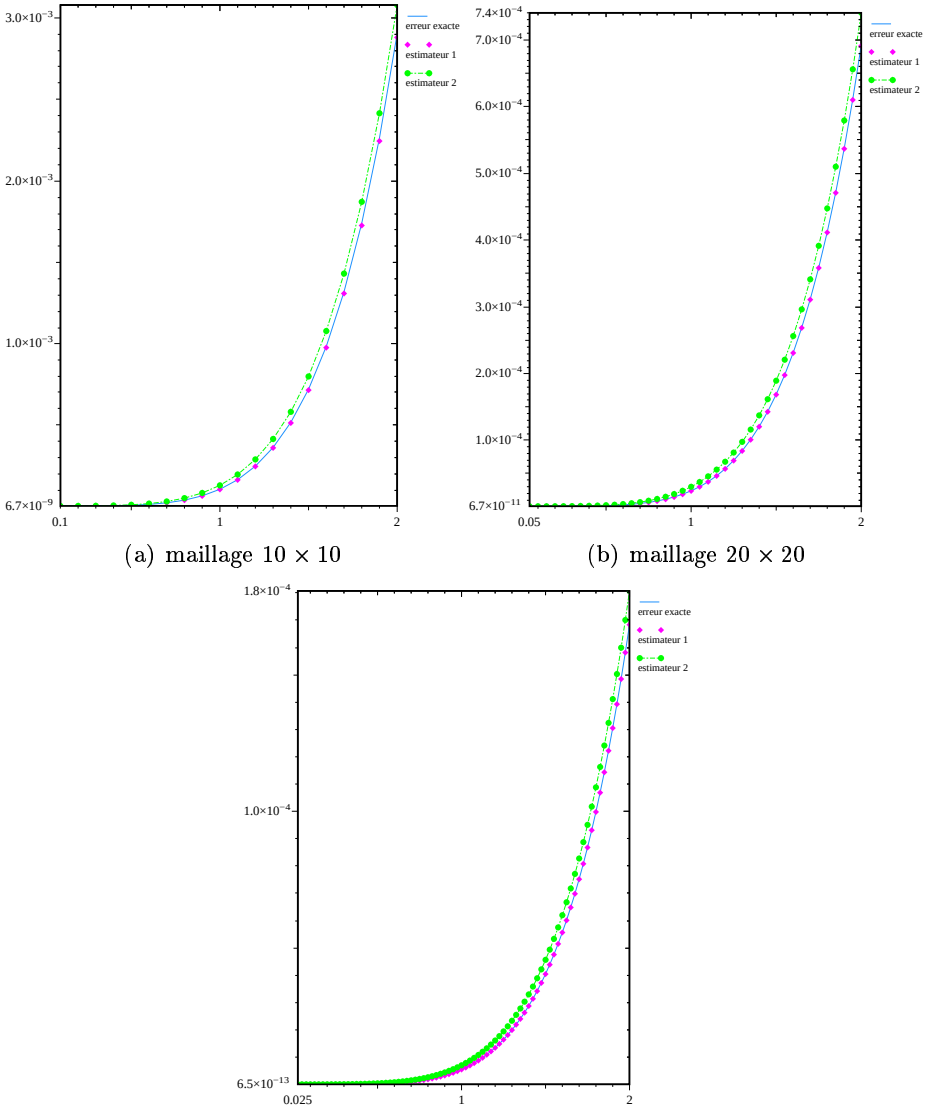
Soit $(x_c(t), y_c(t))$ le centre de l'ellipse de rayons (a, b) et t un paramètre variant sur l'intervalle $[0, 1]$. Le centre se déplace selon un cercle $\mathcal{C}$ de centre $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ et de rayon r.
On note $(\mathcal{F}_t)$ l'ensemble qui décrit la surface de l'ellipse

$$(\mathcal{F}_t) \quad \forall (x, y) \in [0, 1] \times [0, 1], \ \left(\frac{x - x_c(t)}{a}\right)^2 + \left(\frac{y - y_c(t)}{b}\right)^2 \leq 1.$$

La fonction f s'écrit alors

$$\forall (x, y) \in [0, 1] \times [0, 1], \quad f(t, x, y) = \begin{cases} 2 \text{ si } (x, y) \in \mathcal{F}_t, \\ 0 \text{ sinon.} \end{cases}$$

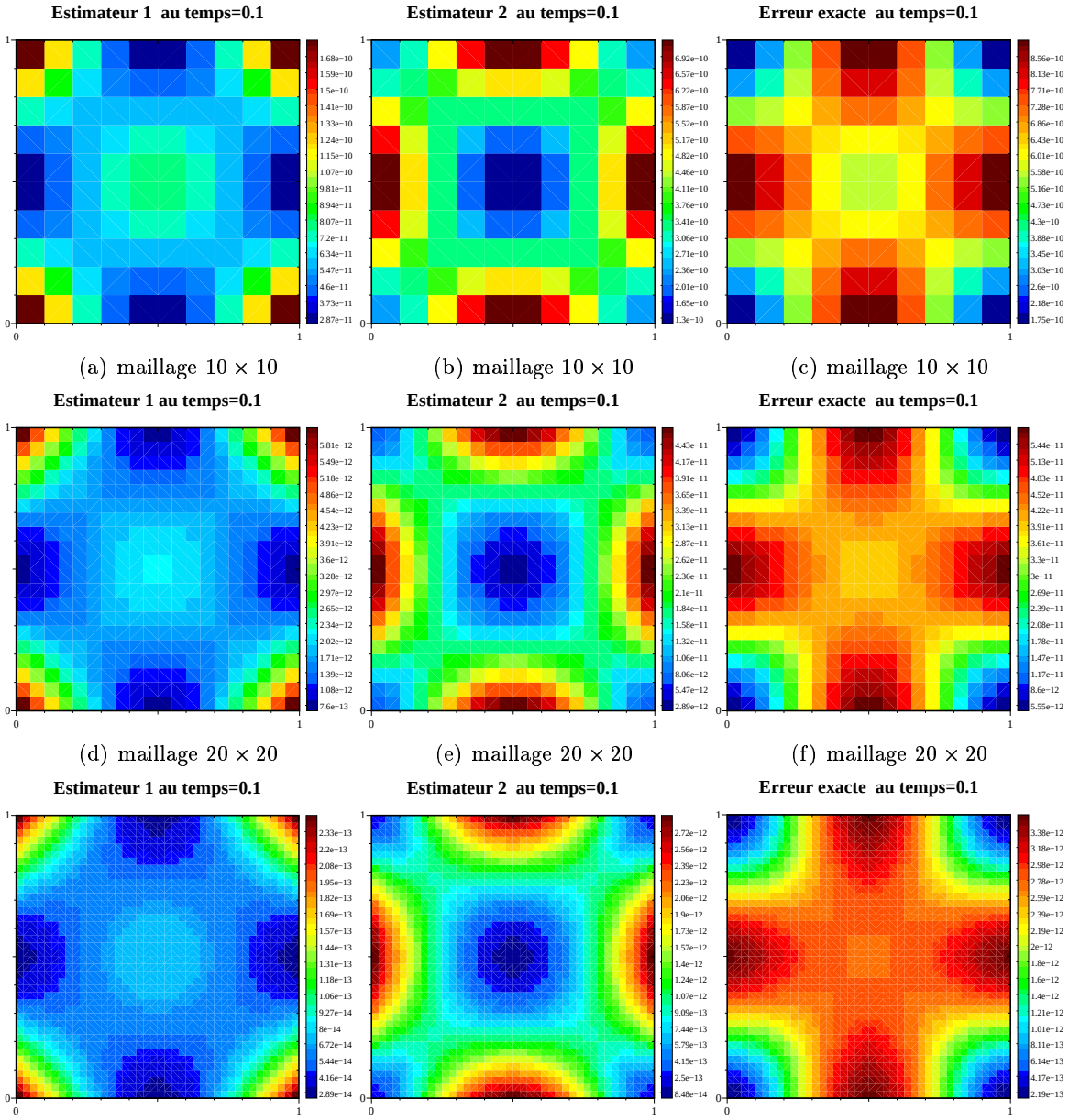
On présente sur les graphiques (8.15) le résultat des cartes locales à chaque pas de temps de l'estimateur en espace. On constate qu'il suit bien la solution puisque les plus grandes erreurs se situent au niveau de l'ensemble $\mathcal{F}_t$. Ceci montre que l'estimateur est bien adapté pour une stratégie de raffinement de maillage. Enfin, on peut constater une diffusion numérique lorsque la fonction f est proche du bord du domaine. Ceci est dû au schéma Volumes Finis utilisé. En effet, la dérivée est approchée par une formule centrée à l'intérieur du domaine et décentrée sur le bord. D'où cette diffusion numérique.



(a) maillage 10×10 (b) maillage 20×20

(c) maillage 40×40

Figure 8.6: Evolution de l'erreur globale pour les deux estimateurs et la norme exacte, dans le cas polynômial.

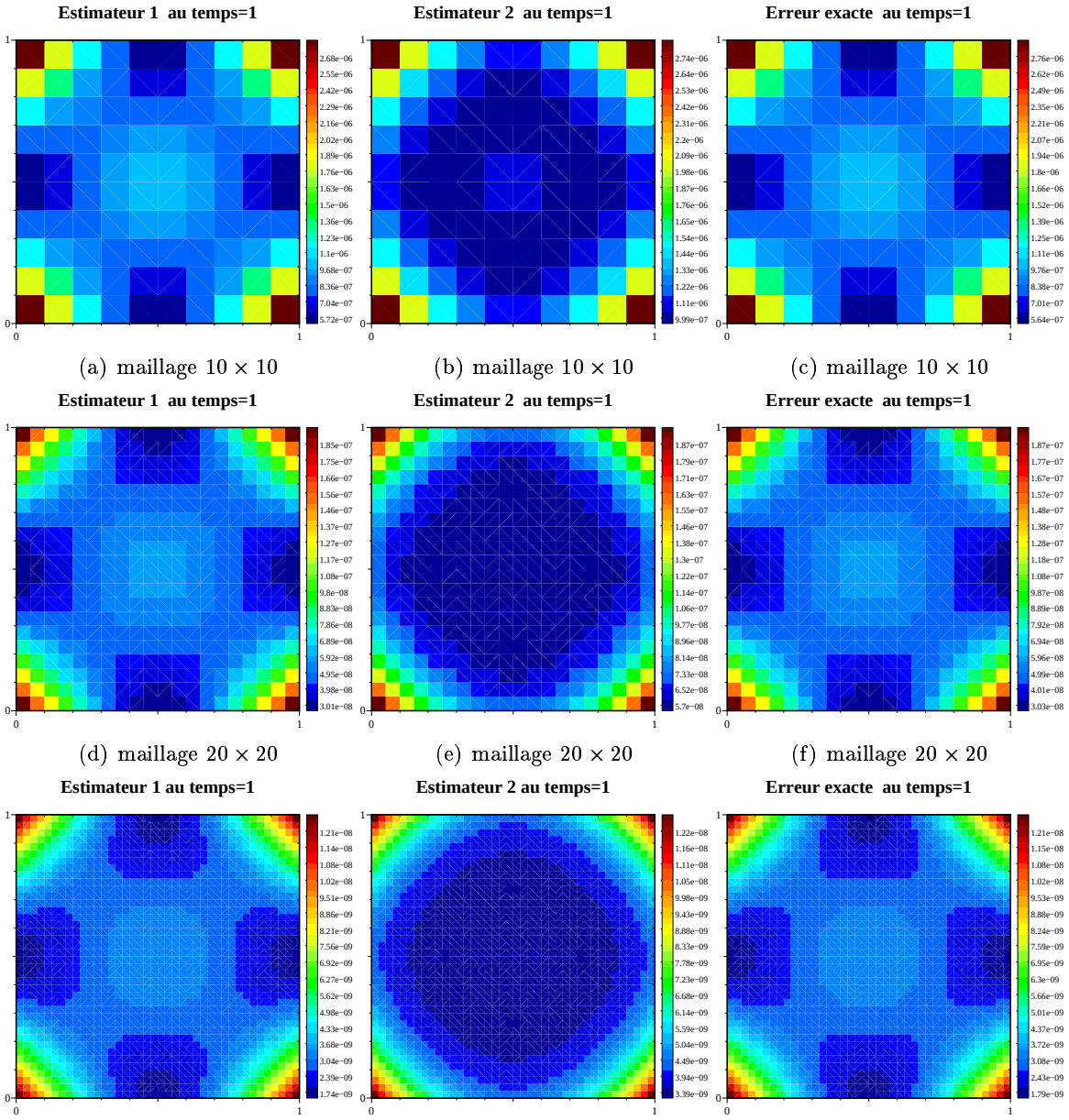


(a) maillage 10×10 (b) maillage 10×10 (c) maillage 10×10

(d) maillage 20×20 (e) maillage 20×20 (f) maillage 20×20

(g) maillage 40×40 (h) maillage 40×40 (i) maillage 40×40

Figure 8.7: Comparaison de la répartition de l'erreur estimée par deux estimateurs et de l'erreur exacte pour 3 maillages différents au même temps, dans le cas polynômial.

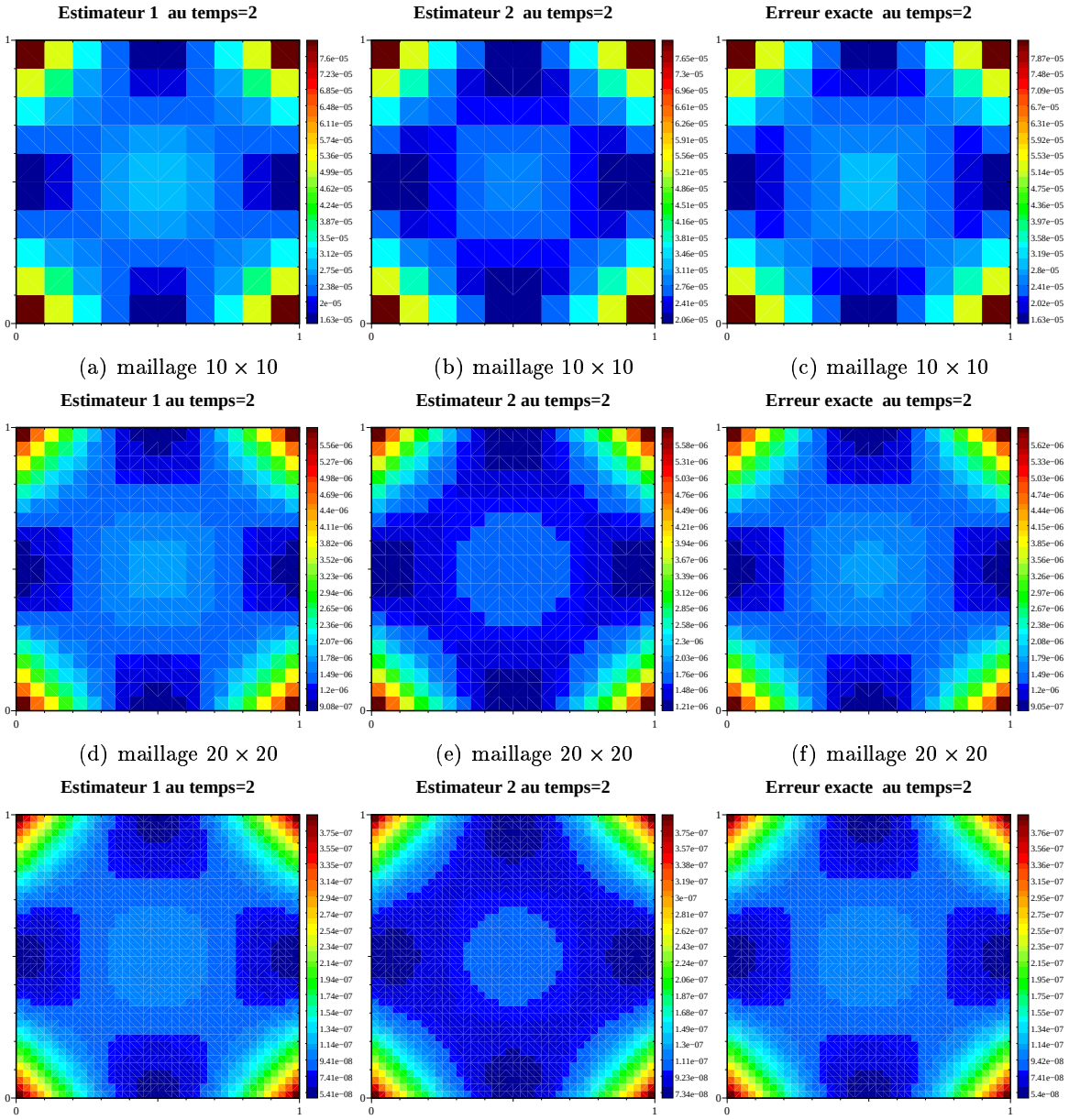


(a) maillage 10×10 (b) maillage 10×10 (c) maillage 10×10

(d) maillage 20×20 (e) maillage 20×20 (f) maillage 20×20

(g) maillage 40×40 (h) maillage 40×40 (i) maillage 40×40

Figure 8.8: Comparaison de la répartition de l'erreur estimée par deux estimateurs et de l'erreur exacte pour 3 maillages différents au même temps, dans le cas polynômial.

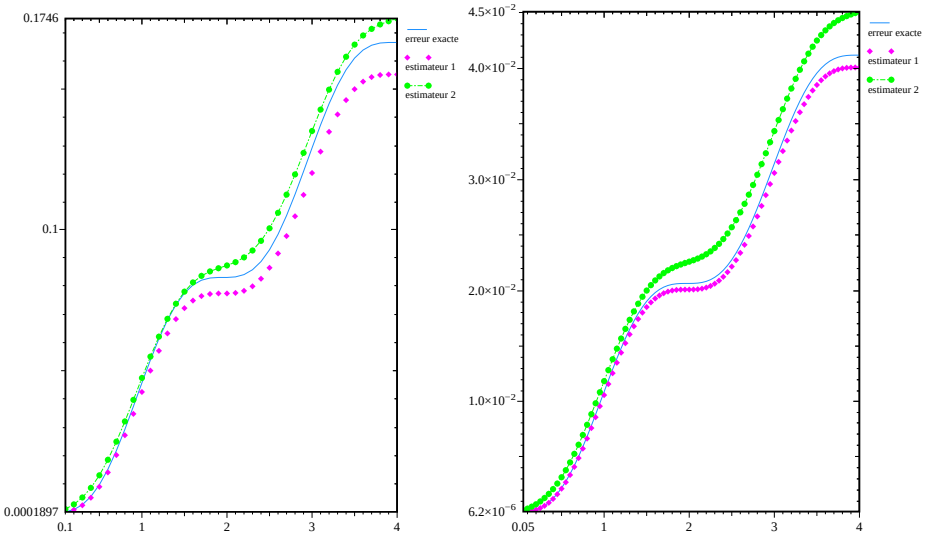


(a) maillage 10×10 (b) maillage 10×10 (c) maillage 10×10

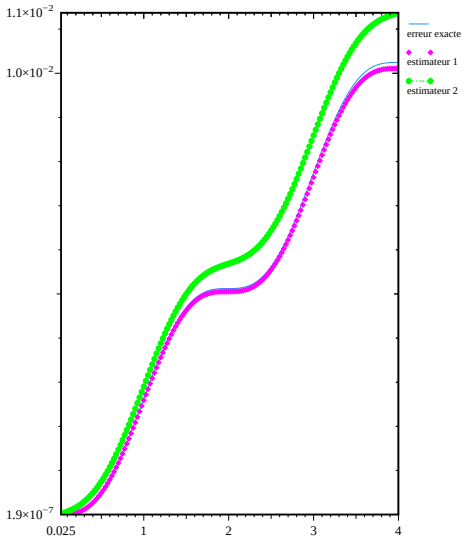
(d) maillage 20×20 (e) maillage 20×20 (f) maillage 20×20

(g) maillage 40×40 (h) maillage 40×40 (i) maillage 40×40

Figure 8.9: Comparaison de la répartition de l'erreur estimée par deux estimateurs et de l'erreur exacte pour 3 maillages différents au même temps, dans le cas polynômial.

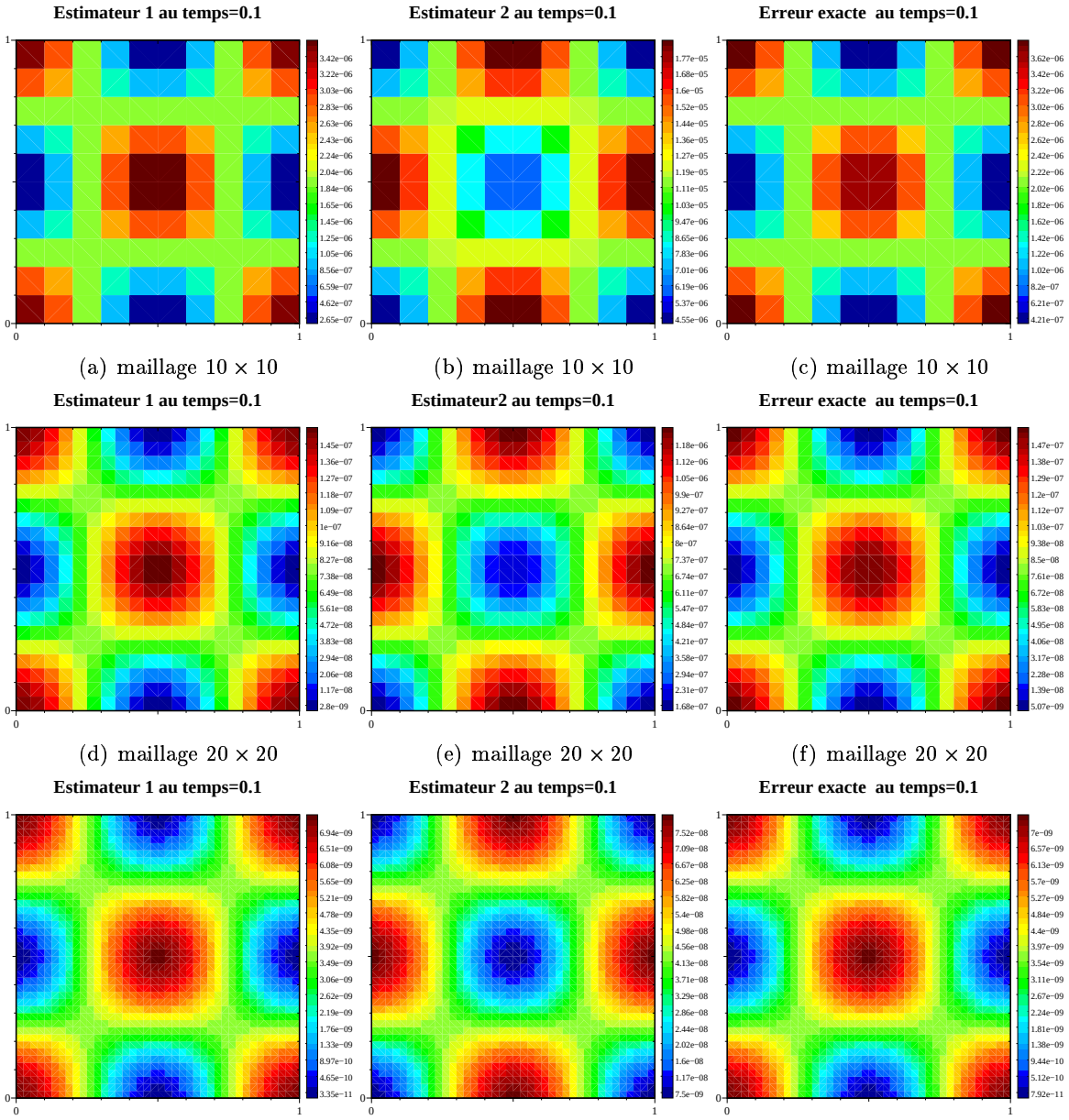


(a) maillage 10×10 (b) maillage 20×20



(c) maillage 40×40

Figure 8.10: Evolution de l'erreur globale pour les deux estimateurs et la norme exacte, dans le cas sinusoïdal.

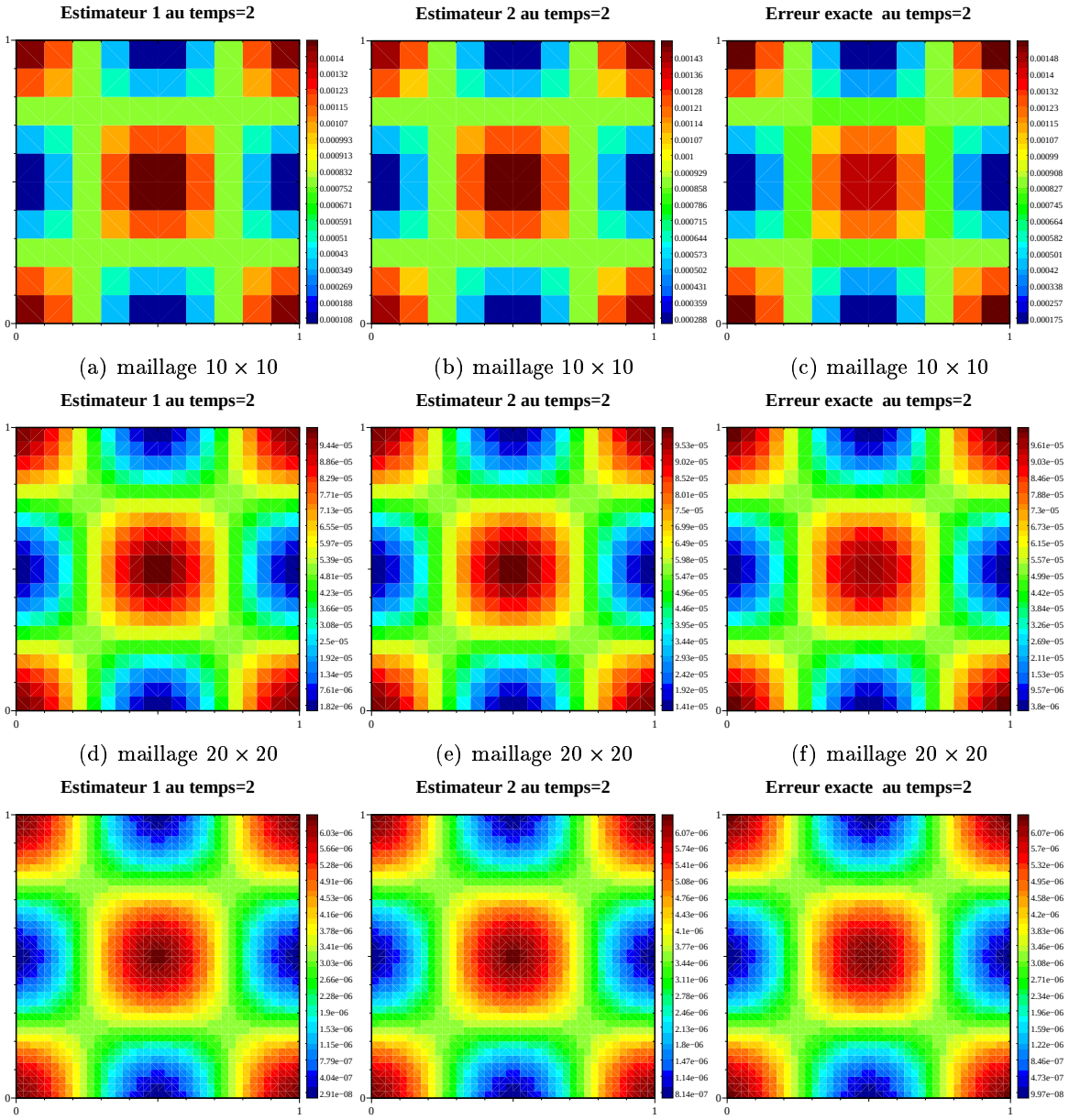


(a) maillage 10×10 (b) maillage 10×10 (c) maillage 10×10

(d) maillage 20×20 (e) maillage 20×20 (f) maillage 20×20

(g) maillage 40×40 (h) maillage 40×40 (i) maillage 40×40

Figure 8.11: Comparaison de la répartition de l'erreur estimée par deux estimateurs et de l'erreur exacte pour 3 maillages différents au même temps, dans le cas sinusoïdal.

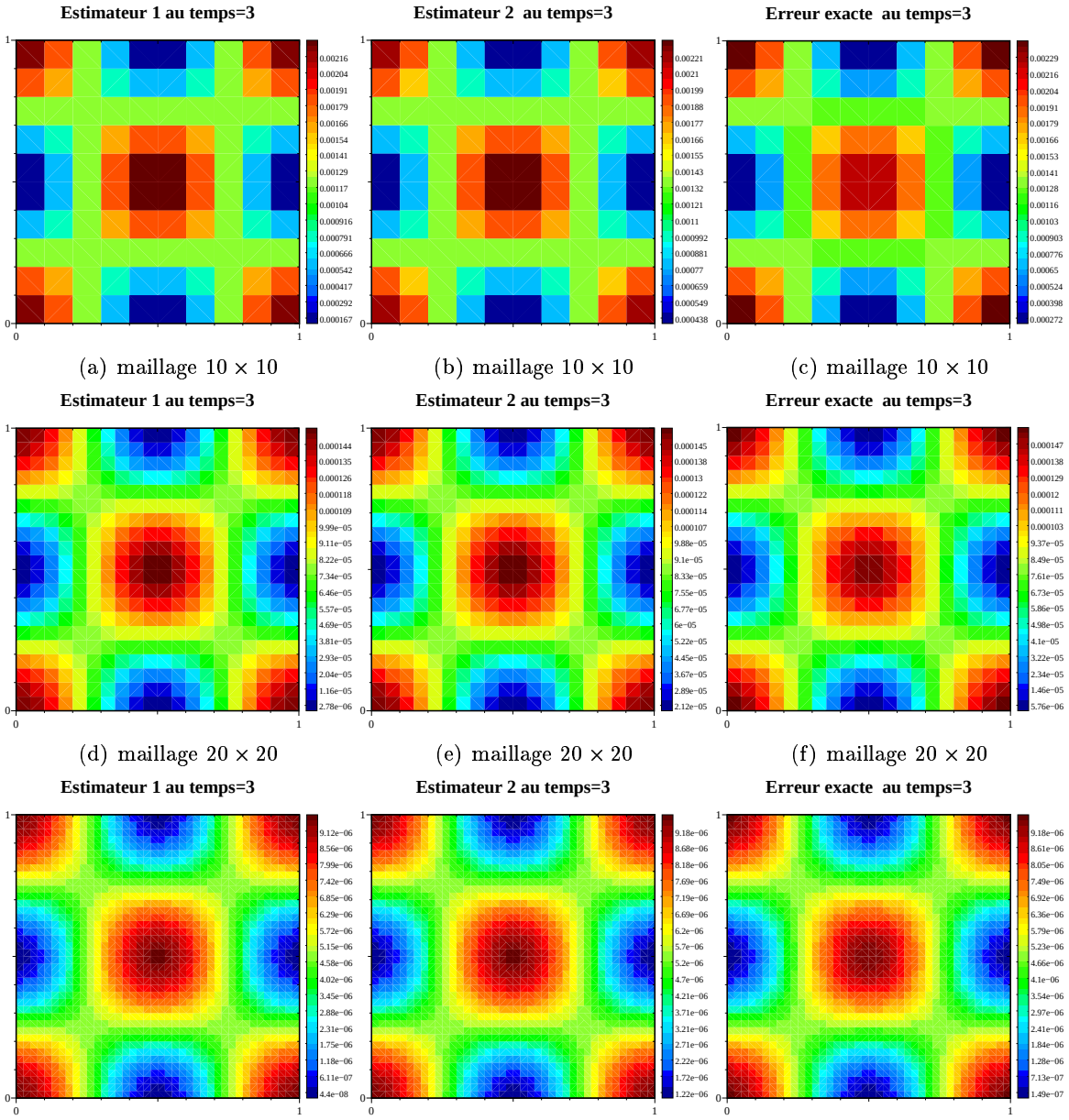


(a) maillage 10×10 (b) maillage 10×10 (c) maillage 10×10

(d) maillage 20×20 (e) maillage 20×20 (f) maillage 20×20

(g) maillage 40×40 (h) maillage 40×40 (i) maillage 40×40

Figure 8.12: Comparaison de la répartition de l'erreur estimée par deux estimateurs et de l'erreur exacte pour 3 maillages différents au même temps, dans le cas sinusoïdal.

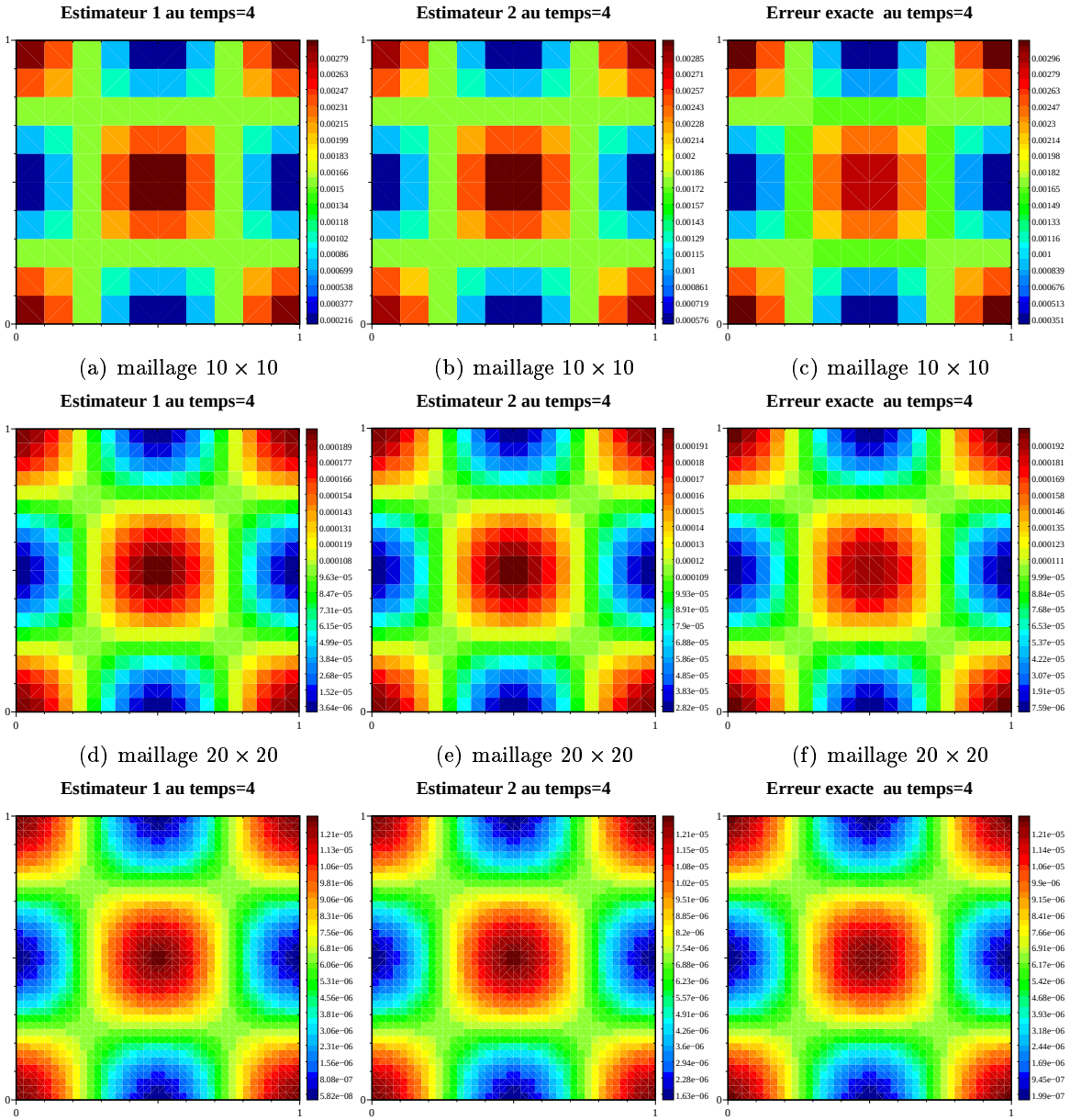


(a) maillage 10×10 (b) maillage 10×10 (c) maillage 10×10

(d) maillage 20×20 (e) maillage 20×20 (f) maillage 20×20

(g) maillage 40×40 (h) maillage 40×40 (i) maillage 40×40

Figure 8.13: Comparaison de la répartition de l'erreur estimée par deux estimateurs et de l'erreur exacte pour 3 maillages différents au même temps, dans le cas sinusoïdal.



(a) maillage 10×10 (b) maillage 10×10 (c) maillage 10×10

(d) maillage 20×20 (e) maillage 20×20 (f) maillage 20×20

(g) maillage 40×40 (h) maillage 40×40 (i) maillage 40×40

Figure 8.14: Comparaison de la répartition de l'erreur estimée par deux estimateurs et de l'erreur exacte pour 3 maillages différents au même temps, dans le cas sinusoïdal.

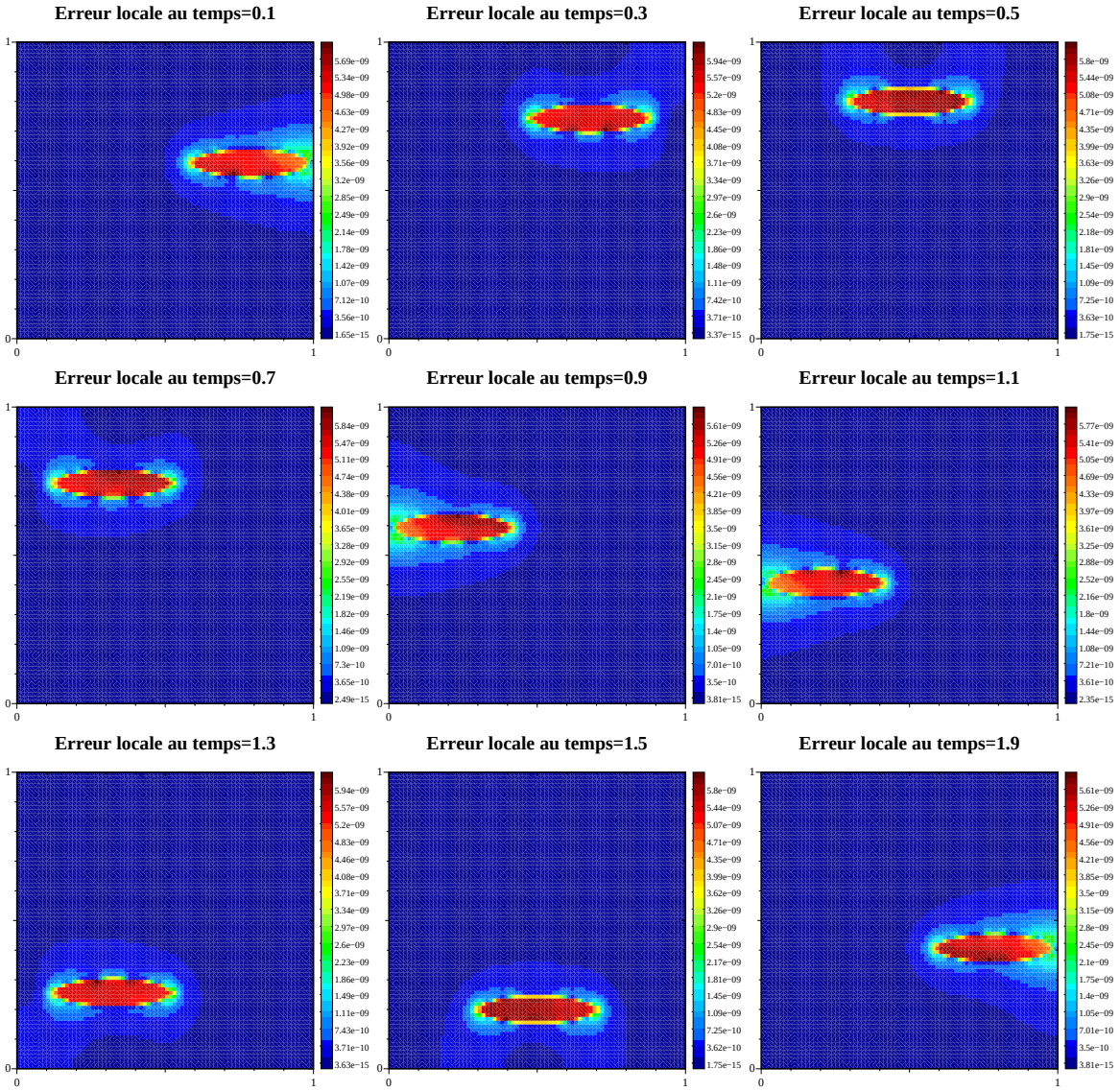


Figure 8.15: Cartes des erreurs locales pour un terme source non régulier.

8.4.7 Estimateurs *a posteriori* locaux en temps

Dans cette section, on établit un estimateur *a posteriori* par une méthode différente de celle précédemment utilisée. L'idée développée par Eriksson et Johnson [26] est d'introduire un problème rétrograde ayant pour condition finale l'erreur à estimer. Ainsi, il n'est plus nécessaire de découpler l'étude de l'erreur exacte en deux parties comme on l'a décrit précédemment.
Avant d'énoncer le résultat, on introduit les notations et estimations nécessaires à la démonstration de l'estimateur.

Quelques rappels et notations

On utilise les notations introduites dans le paragraphe (8.4.2).
On rappelle ci-dessous la formulation variationnelle du problème initial étudié (8.5).
$\forall f \in L^2(0,T;L^2(\Omega))$,

$$\left\{\begin{array}{l} \text{Trouver } u \in \mathcal{C}^0(0,T;L^2(\Omega)) \cap L^2(0,T;H_0^1(\Omega)) \text{ telle que} \\ \\ \forall v \in L^2(0,T;H_0^1(\Omega)) \displaystyle\int_0^T \{(\frac{\partial u}{\partial t}, v) + (\nabla u, \nabla v)\}\, dt = \int_0^T (f,v)\, dt \end{array}\right. \tag{8.18}$$

où $(v,w) = \displaystyle\int_\Omega v.w\, dx$ indique soit le produit scalaire usuel de $L^2(\Omega)$, soit le crochet de dualité $H^{-1}(\Omega), H_0^1(\Omega)$.
On introduit la forme bilinéaire suivante:

$$\left\{\begin{array}{l} \forall \varphi \in \mathcal{C}^0(0,T;L^2(\Omega)) \cap L^2(0,T;H_0^1(\Omega)), \\ \forall \psi \in L^2(0,T;H_0^1(\Omega))\ B(\varphi,\psi) = \displaystyle\int_0^T \{(\frac{\partial \varphi}{\partial t}, \psi) + (\nabla \varphi, \nabla \psi)\}\, dt. \end{array}\right.$$

Le problème (8.18) s'écrit alors sous la forme suivante:

$$\left\{\begin{array}{l} \text{Trouver } u \in \mathcal{C}^0(0,T;L^2(\Omega)) \cap L^2(0,T;H_0^1(\Omega)) \text{ telle que} \\ \\ \forall v \in L^2(0,T;H_0^1(\Omega)) \quad B(u,v) = \displaystyle\int_0^T (f,v)\, dt. \end{array}\right. \tag{8.19}$$

Pour la suite, on introduit le problème "rétrograde" suivant:

$$\left\{\begin{array}{ll} \dfrac{\partial z}{\partial t} + \Delta z = 0 & \text{dans }]0,T[\times\Omega, \\ z = 0 & \text{sur }]0,T[\times\Gamma \\ z(T,x) = e^N & \text{dans } \Omega. \end{array}\right. \tag{8.20}$$

où $e^N = u(N) - w(N) = u^N - w^N$ avec $w \in H^1(0,T;H_0^1(\Omega))$.
La formulation variationnelle associée au problème rétrograde est la suivante:

$$\forall\, v \in L^2(0,T;H_0^1(\Omega)) \qquad \int_0^T \{(-\frac{\partial z}{\partial t}, v) + (\nabla z, \nabla v)\}\, dt = 0. \tag{8.21}$$

On rappelle les estimations suivantes:

Lemme 8.15. *Soit z la solution du problème* (8.20), *on a les majorations suivantes p.p. $t \in]0,T[$:*

$$||z(t)||_{0,\Omega} \leq ||e^N||_{0,\Omega}, \tag{8.22a}$$

$$(\int_t^T |z|_{1,\Omega}^2\, dt)^{\frac{1}{2}} \leq \frac{1}{\sqrt{2}}||e^N||_{0,\Omega}. \tag{8.22b}$$

Preuve. On a

$$\int_t^T (\frac{\partial z}{\partial s}, z)\, ds = \int_t^T (-\frac{\partial z}{\partial s}, z)\, ds + ||z(t)||_{0,\Omega} - ||e^N||_{0,\Omega},$$

que l'on écrit

$$2\int_t^T (\frac{\partial z}{\partial s}, z)\, ds = ||z(t)||_{0,\Omega} - ||e^N||_{0,\Omega},$$

En utilisant le problème (8.20), on montre (8.22a).
A partir de l'expression ci-dessus, l'inégalité (8.22b) est immédiate.

■

Majoration de l'erreur exacte

On a le théorème suivant:

Théorème 8.16. *$\forall r \in L^2(0,T;H(div,\Omega))$ et $\forall w \in H^1(0,T;H_0^1(\Omega))$ telle que $w^0 = u^0$, en posant $e^N = ||u^N - w^N||_{0,\Omega}$, $\forall N \in \mathbb{N}^\star$ fixé, $T = \tau_N N$ on a*

$$||e^N||_{0,\Omega} \leq \sqrt{\frac{T}{2}}||r - \nabla w||_{L^2(Q)} + T \sup_{t\in[0,T]} || - \frac{\partial w}{\partial t} + f + div\, r||_{L(Q)}.$$

Avant de passer à la démonstration du théorème, on démontre le lemme suivant:

Lemme 8.17. *Sous les hypothèses du théorème* (8.16), *on a les inégalités suivantes:*

$$\int_0^T (r - \nabla w, \nabla z)\, dt \leq \sqrt{\frac{T}{2}}||e^N||_{0,\Omega}||r - \nabla w||_{L^2(Q)}, \tag{8.23a}$$

$$\int_0^T \int_\Omega (-\frac{\partial w}{\partial t} + f + div\, r, z)\, dt \leq T \sup_{t\in[0,T]} || - \frac{\partial w}{\partial t} + f + div\, r||_{L^2(Q)}\, ||e^N||_{0,\Omega}. \tag{8.23b}$$

Preuve.
En utilisant Cauchy-Schwarz dans $L^2(Q)$ puis le lemme (8.15), on obtient le résultat. ■

On passe maintenant à la démonstration du théorème (8.16).

Preuve.

En prenant $v = z$ avec z solution du problème rétrograde (8.20) dans l'équation (8.19), on obtient alors

$$B(u,z) = \int_0^T (f,z)\,dt \tag{8.24}$$

De plus, par définition de la forme bilinéaire B, en utilisant une intégration par parties en temps et en espace puis le modèle (8.21), on a:

$$\begin{aligned} B(u,z) &= \int_0^T (\frac{\partial u}{\partial t}, z)\,dt + \int_0^T (\nabla u, \nabla z)\,dt \\ &= \int_0^T (-\frac{\partial z}{\partial t}, u)\,dt + (u(T), z(T)) - (u(0), z(0)) + \int_0^T (\nabla u, \nabla z)\,dt \\ &= (u^N, e^N) - (u^0, z^0). \end{aligned} \tag{8.25}$$

D'où en remplaçant dans l'équation (8.24), on obtient:

$$(u^N, e^N) = (u^0, z^0) + \int_0^T (f,z)\,dt \tag{8.26}$$

En partant du problème rétrograde (8.21) et en prenant dans cette formulation $v = w$ on obtient alors

$$\int_0^T (-\frac{\partial z}{\partial t}, w)\,dt + \int_0^T (\nabla z, \nabla w)\,dt = 0.$$

En effectuant une intégration par parties, on trouve

$$(w^0, z^0) - (w^N, e^N) + \int_0^T (\frac{\partial w}{\partial t}, z)\,dt + \int_0^T (\nabla w, \nabla z)\,dt = 0 \tag{8.27}$$

En ajoutant les relations (8.26) et (8.27) on obtient:

$$(u^N - w^N, e^N) + (w^0, z^0) + \int_0^T (\frac{\partial w}{\partial t}, z)\,dt + \int_0^T (\nabla w, \nabla z)\,dt = (u^0, z^0) + \int_0^T (f,z)\,dt$$

Comme par hypothèse $w^0 = u^0$, l'expression finale s'écrit alors:

$$(e^N, e^N) = ||e^N||^2_{0,\Omega} = \int_0^T (f,z)\,dt - \int_0^T (\frac{\partial w}{\partial t}, z)\,dt - \int_0^T (\nabla w, \nabla z)\,dt \tag{8.28}$$

En partant de la relation (8.28), et en introduisant de manière adéquate r, on obtient:

$$\begin{aligned}||e^N||_{0,\Omega}^2 &= \int_0^T (f,z)\,dt - \int_0^T (\frac{\partial w}{\partial t}, z)\,dt - \int_0^T (\nabla w - r, \nabla z)\,dt + \int_0^T (div\, r, z)\,dt \\ &= \int_0^T (-\frac{\partial w}{\partial t} + f + div\, r, z)\,dt + \int_0^T (r - \nabla w, \nabla z)\,dt.\end{aligned}$$

En utilisant les majorations du lemme (8.17), on obtient la majoration suivante:

$$||e^N||_{0,\Omega}^2 \leq \sqrt{\frac{T}{2}}||e^N||_{0,\Omega}||r - \nabla w||_{L^2(Q)} + T\,||e^N||_{0,\Omega} \sup_{t\in[0,T]} ||-\frac{\partial w}{\partial t} + f + div\, r||_{L^2(Q)}.$$

d'où le résultat. ■

L'estimateur que l'on vient d'établir permet de prendre en compte plusieurs types de discrétisation du problème (8.5) puisque l'on ne fait intervenir aucune technique de discrétisation en espace et en temps. La seule contrainte est le respect, pour la discrétisation, de la régularité $H_0^1(\Omega)$ pour l'approximation de u et $H(div, \Omega)$ pour celle de $p = \nabla u$. Cette méthode s'applique donc aux schémas 5 points et 9 points décrits ici. De plus, en reconstruisant la régularité nécessaire sur les inconnues par post-processing, on peut appliquer l'estimateur aux formulations mixtes primales et duales. L'approximation primale-duale a déjà, par construction, la régularité nécessaire pour l'application du théorème.
On va maintenant donner un exemple d'application du théorème.

Exemple d'application

On applique le théorème au problème que l'on a étudié dans le paragraphe précédent. On rappelle que la discrétisation en temps est une formulation d'Euler implicite et que la discrétisation en espace est un schéma Volumes Finis 5 ou 9 points centrés sur les mailles, issu d'une formulation mixte primale-duale. On note u_h^n et p_h^n la solution du problème sur l'intervalle de temps I_n. On introduit la fonction $u_{h\tau}$ (*resp.* $p_{h\tau}$) appartenant à $\mathcal{C}^0(0,T;H_0^1(\Omega))$, valant u_h^n (*resp.* p_h^n) en I_n telle que

$$u_{h\tau} = \frac{t - t_{n-1}}{\tau} u_h^n + \frac{t_n - t}{\tau} u_h^{n-1},$$

avec une définition similaire pour $p_{h\tau}$.
En appliquant le théorème (8.16) en prenant $w = u_{h\tau}$ et $r = p_{h\tau}$ et en remarquant que $||u^N - u_{h\tau}^N||_{0,\Omega} = ||u - u_h^n||_{0,\Omega}$ on a

$$\begin{aligned}||u - u_h^n||_{0,\Omega} \leq &\sqrt{\frac{T}{2}}||p_{h\tau} - \nabla u_{h\tau}||_{L^2(Q)} \\ &+ T\,||-\frac{\partial u_{h\tau}}{\partial t} + f_{h\tau} + div\, p_{h\tau}||_{L^2(Q)} + T\,||f - f_{h\tau}||_{0,\Omega}.\end{aligned}$$

En remarquant que $u_{h\tau}$ et $p_{h\tau}$ sont affines en temps et en utilisant une formule de Simpson, on montre que

$$||p_{h\tau} - \nabla u_{h\tau}||_{L^2(Q)} \leq \left(\sum n = 1^N \tau_n ||p_h^n - \nabla u_h^n||_{0,\Omega}^2\right)^{\frac{1}{2}}.$$

On remarque alors que l'on retrouve un estimateur semblable à celui établi au paragraphe 8.4.3, pour le cas du problème semi-discrétisé.

8.5 Conclusion

Dans la première partie de ce chapitre, on propose un estimateur pour une équation elliptique qui s'avère être égal à l'erreur exacte dans le cas où la fonction source est constante par volume de discrétisation et qui majore et minore l'erreur exacte dans le cas où la fonction source n'est plus constante par volume de discrétisation. On confirme ces résultats par des essais numériques. On remarque que l'estimateur obtenu mesure une erreur globale (bien que l'on puisse le calculer localement) et l'on a, *a priori*, aucune information quant à la qualité de l'estimation de l'erreur sur chaque élement. Cependant, les essais numériques montrent que l'estimateur donne une bonne répartion de cette erreur locale.
Dans la deuxième partie, on s'est intéressé à une équation parabolique linéaire. On établit deux estimateurs d'erreurs par deux méthodes différentes. On montre, dans le premier paragraphe, que cet estimateur majore et minore l'erreur exacte pour deux formulations en temps différentes.Dans un second paragraphe, on établit un estimateur général pour l'équation de la chaleur. L'estimateur construit est indépendant de la méthode numérique pour l'évaluation de la solution discrète. Cet estimateur s'adapte particulièrement bien aux formulations mixtes primales, duales et primales-duales à condition que la discrétisation respecte les espaces continus introduits. On présente alors un exemple d'application de cet estimateur dans le cas parabolique étudié dans le premier paragraphe. On retrouve alors un estimateur semblable.

Chapitre 9

Conclusion et perspectives

Cette thèse avait pour objectif d'étudier le découplage des grandeurs thermodynamiques des équations de transport et de proposer un schéma numérique peu coûteux en temps de calcul. Pour ce faire, trois modèles ont été proposés, chacun permettant de réduire le nombre des inconnues par rapport aux formulations "classiques" utilisées dans le milieu de la modélisation des réservoirs et reprises pour la modélisation des écoulements dans les bassins. Ces formulations ont permis également de s'affranchir de la difficulté du choix des inconnues selon l'état thermodynamique du domaine, difficulté rencontrée avec la modélisation usuelle des écoulements dans les réservoirs.

Ces modélisations sont basées sur le concept des cœfficients de répartition qui exprime la répartition (ou le pourcentage) de la quantité de masse du constituant au sein de toutes les phases dans lesquelles il est présent. Ces cœfficients de répartition sont des paramètres de toutes les grandeurs thermodynamiques. Il existe notamment une relation simple entre les cœfficients de répartition et les fractions massiques usuellement utilisées dans les modélisations des écoulements multiphasiques multiconstituants. Ces cœfficients de répartition sont évalués par des modules thermodynamiques complexes et coûteux en temps de calcul. Comme le but recherché consiste à découpler la thermodynamique des équations de transport, on a considéré ces cœfficients de répartition de façon explicite. Les autres grandeurs thermodynamiques pouvent être prises en explicite ou en implicite puisqu'elles ont des expressions analytiques dépendantes de la pression, de la température et des cœfficients de répartition.

Dans cette thèse, seule l'étude des grandeurs thermodynamiques prises en explicite a été retenue au moyen d'un schéma inspiré du schéma IMPES.

Les simulations numériques des trois modèles proposés ont mis plus particulièrement en valeur la formulation en masses de composés. En effet, la première modélisation proposée, appelée modèle en masses-saturations, ne pouvait pas simuler l'écoulement des hydrocarbures dans le bassin dans le cas de non compaction, de l'arrêt du craquage et de la négligence de la gravité. La deuxième formulation, appelée modèle en masses de mélange, devenait instable pour de faibles densités.

Afin de diminuer le temps de calcul, on a proposé, dans un premier temps, une stratégie de gestion globale du pas de temps liée aux variations de masse. Puis on s'est penché, dans un deuxième temps, sur une stratégie de gestion de pas de temps locale en "découpant" le domaine en zones. Ces zones ne sont pas *a prioiri* connues et évoluent au cours du temps. On a donc développé une stratégie "empirique" pour déterminer ces zones au cours du temps. Pour palier aux limites de cette stratégie empirique, on s'est orienté vers l'étude des estimateurs *a posteriori*. On a commencé l'étude pour une équation elliptique linéaire pour laquelle on a montré que l'estimateur était égal à l'erreur exacte dans le cas où le terme source est constant par volume, et qu'il majore et minore l'erreur exacte lorsque le terme source n'est plus constant par volume de discrétisation. On s'est ensuite attaché à l'étude d'une équation parabolique linéaire. On établit des estimateurs *a posteriori* par deux méthodes différentes. Dans le premier cas, l'estimateur obtenu majore et minore l'erreur exacte. Dans le second cas, on obtient un estimateur général indépendant de la méthode numérique utilisée pour calculer la solution du problème. La seule contrainte est le respect par les espaces d'approximation des espaces continus. Cet estimateur s'adapte bien aux formulations mixtes primales, duales et primales-duales ainsi qu'aux méthodes de Volumes Finis Eléments Finis basées sur ces formulations. On notera cependant que tous ces estimateurs sont établis pour des normes globales et *a priori* on n'obtient aucune information quant à la qualité de l'estimation de l'erreur locale. Cependant, les essais numériques montrent que ces estimateurs donnent une bonne répartition de cette erreur locale.

Enfin, une dernière facette se rapportant à l'approximation numérique effectuée en temps sur les cœfficients de répartition a été développée.

Lorsque l'on considère les cœfficients de répartition de façon explicite, on introduit une erreur sur les équations de conservation du volume poreux ainsi que sur l'équilibre thermodynamique. On tente de corriger cela en introduisant une équation de thermodynamique à masses et volume constants. On considère deux formulations de cette équation thermodynamique à masses et volume constants. On montre que la première formulation donne soit des masses nulles ou des densités infinies, soit qu'elle est automatiquemet vérifiée. La seconde formulation de cette équation est plus délicate à apprécier du fait du défaut d'une thermodynamique complexe et réaliste. Cependant, on montre dans deux cas simples que cete équation thermodynamique à masses et volume constants ne corrige pas les cœfficients de répartition. De plus, les essais numériques montrent l'apparition de pics de saturation artificiels ainsi qu'une contrainte importante sur le pas de temps. Enfin, les essais numériques démontrent également que le modèle tenant compte de l'équation thermodynamique à masses et volume constants converge vers la solution donnée par le modèle ne tenant pas compte de l'équation de thermodynamique à masses et volume constants lorsque l'on raffine en temps et en espace.

Quelques perspectives

- Observer le comportement du modèle en masses de composés avec un module thermodynamique plus complexe.
- Intégrer le modèle dans un simulateur de bassin plus évolué (domaine en trois dimensions, intrégration des équations de compaction, prise en compte des failles, de la température, de la tectonique des plaques).
- Définir des perméabilités relatives en fonction des masses et non des saturations. En effet, les perméabilités utilisées dans cette étude dépendent des saturations, ce qui implique d'introduire des équations secondaires pour le calcul des saturations. Des premiers résultats encourageants ont été obtenus avec le calcul des perméabilités relatives suivantes:

$$kr_\alpha\left((m_j)_{j=1,\ldots,N}\right) = \left(\frac{\frac{\sum_{j=1}^{N}\beta_j^\alpha m_j}{\rho_\alpha \Phi} - S_{ir_\alpha}}{1 - S_{ir_\alpha}}\right)^\gamma$$

  Toutefois, on note que cette expression n'est autre qu'une formulation en saturation dans laquelle on a remplacé la saturation par sa définition en masse. Dans notre cas, cette formulation est plus implicite que lorsque l'on utilise les saturations qui sont calculées en fin de pas de temps précédent. Cette approche n'est pas tout à fait satisfaisante.
- Prendre en compte et étudier différentes approches de résolution pour la pression capillaire.
- Etendre les résultats obtenus pour les estimateurs *a posteriori* dans le cas linéaire au cas non linéaire en temps et en espace.
- Déterminer des estimateurs qui contrôleraient l'erreur exacte sur chaque élément.
- Appliquer les estimateurs obtenus au cas de notre bassin.

Références bibliographiques

[1] B. Achchab, A. Agouzal, J. Baranger et J.F. Maitre "Estimateur d'erreur *a posteriori* hiérarchique: applications aux éléments finis mixtes" Num. Math., vol 80, 1998, pp 159-179.

[2] M.Afif, A. Bergam, Z. Mghazli et R.Verfürth "*A posteriori* estimators of the finite volume discretization of an elliptic problem", Soumis dans Num. Algorithms, 2001.

[3] K. Aziz, A. Settari "Petroleum reservoir simulation" Applied Science Publishers, London, 1979.

[4] I. Babŭska, W.C. Rheinboldt "Error estimates for adaptative finite element computations" SIAM Numer. Anal., 15, 1978, pp 736-754.

[5] I. Babŭska, W.C. Rheinboldt "*A posteriori* error estimates for the finite element method" Int. J. Numer. Meth. Engrg., 12, 1978, pp 1597-1615.

[6] R.E. Bank et R.K. Smith "*A posteriori* error estimate based on hierarchical bases" SIAM J. Numer. Anal., vol 30, 1993, pp 921-935.

[7] R.E. Bank et A. Weiser "Some *a posteriori* error estimators for elliptic partial differential equations" Math. Comp., vol 44, 1985, pp 283-301.

[8] R.E. Bank et B.D. Welfert "*A posteriori* error estimates for the Stokes equations: a comparaison" Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., vol 82, 1990, pp 323-340.

[9] R.E. Bank et B.D. Welfert "*A posteriori* error estimates for the Stokes problem" SIAM J.Num., vol 28, 1991, pp 591-623.

[10] J. Baranger et H. El-Amri "Estimateurs *a posteriori* d'erreur pour le calcul adaptatif d'écoulements quasinewtoniens" M^2AN, vol 25, 1991, pp 173-197.

[11] A. Bergam, C. Bernardi, F. Hecht et Z. Mghazli "Error indicators for the mortar finite element discretization of a parabolic problem" Publications du laboratoire d'analyse numérique, Université Pierre et Marie Curie-CNRS, R01033, 2001. Soumis dans Num. Algorithm.

[12] A.Bergam, C.Bernardi et Z.Mghazli "*A posteriori* analysis of the finite element discretization of a nonlinear parabolic equation",Recherche menée dans le cadre du projet AUPELF-UREF n° 2000/PAS/38 et de l'A.I. France-Maroc n° 221/STU/00, preprint.

[13] A. Bergam et Z. Mghazli "Estimateurs *a posteriori* d'un schéma de volumes finis pour un problème non linéaire" C.R.A.S., Paris Sér. I Math. 331, n°6, 2000, pp 475-478.

[14] A.Bergam,, Z. Mghazli et R. Verfürth "Estimateurs *a posteriori* d'un schéma de volumes finis pour un problème non linéaire" Numerische Mathematik, 2002, à paraître.

[15] A. Bergam "Estimations *a posteriori* pour des problèmes elliptiques et paraboliques; linéaires et non linéaires" Thèse de doctorat en mathématiques, Université Ibn Tofail, Faculté des Sciences, laboratoire SIANO, Maroc, Octobre 2002.

[16] A. Bergam et Z. Mghazli "Estimateurs en temps et en espace pour les problèmes paraboliques non linéaires approchés par volumes finis" Rapport Interne, A32/02, Laboratoire S.I.A.N.O., Université Ibn Tofail, Maroc, 2002.

[17] R. Belmouhoub "Modélisation tridimentionnelle hydro-thermo-mécanique d'un bassin sédimentaire au cours de son histoire géologique" thèse de doctorat en mathématiques, en hydrologie et hydrogéologie quantitatives, ENS des Mines de Paris, 1996.

[18] C. Bernardi et B. Métivet "Indicateurs d'erreur pour l'équation de la chaleur" Revue Européenne des Eléments Finis,vol 9, 2000, pp 425-438.

[19] C. Bernardi, B. Métivet, R. Verfürth "Analyse numérique d'indicateurs d'erreur: maillage et adaptation" P.L. George ed., Hermès, 2001, pp 251-278.

[20] M. Bieterman et I. Babŭska "The finite element method for parabolic equations. I. *A posteriori* error estimation " Num. Math, vol 40, 1982, pp 339-371.

[21] M. Bieterman et I. Babŭska "The finite element method for parabolic equations. I. *A posteriori* error estimation and adaptive approach" Num. Math., vol 40, 1982, pp 373-406.

[22] H. Brezis "Analyse fonctionnelle. Théorie et applications" Masson, 1983.

[23] C. Chavent, J. Jaffré "Mathematical models and finite element for reservoir simulation" studies in mathematics and its applications - North-Holland.

[24] Z. Chen, G. Qin, R.E. Ewing "Analysis of compositional model for fluid flow in porous media" SIAM J. APPL. MATH.Vol. 60, n° 3, 2000, pp 747-777

[25] B. Durand, A. Mascle, C. Laffont "Formation de l'huile et du gaz dans les bassins sédimentaires: exemple du bassin du Wessex et du gisement de Witch Farm, Angleterre" ENSPM, Centre Exploration.

[26] K. Eriksson et C. Johnson "An adaptive finite element method for parabolic problems.I. A linear model problem" SIAM J. Num. Anal., vol 28, 1991,pp 43-47.

[27] K. Eriksson et C. Johnson "An adaptive finite element method for parabolic problems.IV. Nonlinear problems" SIAM J. Num. Anal., vol 32, 1995,pp 1729-1749.

[28] P.G.Ciarlet "The finite element method for elliptic problems" North-Holland, 1978.

[29] Ph.Clément "Approximation by finite element functions using local regularization", R.A.I.R.O. Anal. Numér., vol 9, 1975, pp 77-84,

[30] R. Eymard, T. Gallouët, R. Herbin "The finite volume methods" Handbook of Numerical Analysis, P.G.Cialet and J.L.Lions eds, North-Holland, VII, 2000, pp 713-1020.

[31] I. Faille "Modélisation bidimentionnelle de la génèse des hydrocarbures dans un bassin sédimentaire" thèse, Université Joseph Fourier, Grenoble I et I.F.P., Janvier 1992.

[32] I. Faille, J.L. Potdevin, F. Schneider, S. Wolf "Modèle de compaction élastoplastique et viscoplastique pour simulateur de bassins sédimentaires" revue IFP,vol 49, n^o Mars-Avril 1994, pp 141-148.

[33] I. Faille, F. Schneider, S. Wolf "Ecoulements compositionnels dans un modèle de bassin 3D Visco" rapport de recherche IFP n° 44363, I.F.P., 1998.

[34] P.A. Forsyth, "A control volume finite element approach to NAPL groundwater contamination" SIAM J. Sci. Stat. Comput. vol. 12, September 1991, pp 1029-1057.

[35] L.S.-K. Fung, A.D. Hiebert, L.X. Nghiem "Reservoir simulation with control-volume finite element method" SPE Reservoir Engineering, August 1992, pp 349-357.

[36] G. Gagneux, M. Madaune-Tort "Analyse mathématique de modèles non linéaires de l'ingénierie pétrolière" collection Mathématiques et Applications, Paris, Springer-Verlag, 1995.

[37] A.I. Ghabbar "Sur l'erreur *a posteriori* de méthodes duales d'éléments finis", thèse de doctorat en mathématiques, Université de Pau et des Pays de l'Adour, Pau, Juin 1995.

[38] E. Godlewski, P.A. Raviart "Hyperbolic systems of conservation laws" collection Mathématiques et Applications, SMAI, Ellipse, 1991.

[39] R.H.W. Hoppe et B. Wohlmuth "A comparaison of *a posteriori* error estimators for mixed finite element discretizations" M^2AN, vol 30, n°2, 1996,pp 237-263.

[40] C. Johnson, Y.-Y. Nie et V. Thomée "An *a posteriori* error estimate and adaptive timestep control for a backward Euler discretization of a parabolic problem" SIAM J. Num. Anal.,vol 27, 1990, pp 277-291.

[41] P. Lemmonier "Modélisation de l'écoulement appliquée à l'étude des réservoirs pétroliers" cours IFP/ENSPM rapport K2101038, 1991.

[42] J.-L. Lions et E. Magenes "Problèmes aux limites non homogènes et applications", Dunod, vol 1,1968.

[43] C.M. Marle "Les écoulements polyphasiques en milieu poreux" Cours de production Tome IV, édition Technip, Paris, 1972.

[44] D. McKenzie "The variation of temperature with time and hydrocarbon maturation in sedimentary basins formed by extension" Earth and Planetary Science Letters, vol 55, pp 87-98, Elsevier Scientific Company, Amsterdam, Printed in the Netherlands.

[45] D. McKenzie, A.S. MacKenzie, J.R. Maxwell, Cs. Sajgó "Isomerization and aromatization of hydrocarbons in stretched sedimentary basins" Letters to Nature, Nature, vol 301, 10 Febuary 1983, pp 504-506.

[46] J. Medina, M. Picasso et J. Rappaz "Error estimates and adaptive finite element for non linear diffusion-convection problems" M^3AS, vol 6, 1996, pp 689-712.

[47] R.H. Nochetto, G. Savaré et C. Verdi "*A posteriori* error estimates for variable timestep discretizations of nonlinear evolution equations" Comm. Pure Appl. Math., vol 53, 2000, pp 525-589.

[48] M. Picasso "Adaptive finite elements for a linear parabolic problem" Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., vol 167, 1998, pp 223-237.

[49] A. Pfertzel "Sur quelques schémas numériques ..." thèse de doctorat en mathématiques, Université de Paris VI, 1987.

[50] F. Schneider "Traitements numériques de la compaction dans les simulateurs de bassins sédimentaires" rapport technique n^o39365, I.F.P., Décembre 1991.

[51] V. Selmin "The node-centered finite volume approach: bridge between finite differences and finite elements" Comput. Methods App. Mech. Engrg., vol102, 1993,pp 107-138.

[52] C. Terzaghi, O.K. Frölich "Théorie du tassement des couches argileuses - Introductiuon à la mécanique analytique des argiles" Dunod, 1939.

[53] J.M. Thomas et D. Trujillo "Mixed Finite Volumes Methods" Int. J. Numer. Meth. Engrg., 46, 1999, pp. 1351-1366

[54] D. Trujillo "Couplage espace temps de schémas numériques en simulation de réservoir", thèse de doctorat en mathématiques, Université de Pau et des Pays de l'Adour, Pau, Octobre 1994.

[55] J. Vidal "Thermodynamique, application au génie chimique et à l'industrie pétrolière" publication I.F.P. - Technip.

[56] S. Verdière "Méthodes numériques de double maillage pour la simulation numérique des écoulements polyphasiques dans les milieux poreux" Thèse, Université de Pau et des Pays de l'Adour, Avril 1997.

[57] R. Verfürth "*A posteriori* estimators for the Stokes equations", Num. Math., 55, 1989, pp 309-325.

[58] R. Verfürth "*A posteriori* error estimation and adaptive mesh-refinement techniques", J. Compt. Appl. Math., vol 50, 1994, pp 67-83

[59] R. Verfürth "*A posteriori* error estimator for non linear problems: Finite element discretizations of elliptic equations" Math. Comp., vol 62, 1994, pp 445-475.

[60] R. Verfürth "A review of *A posteriori* error estimation and adaptive mesh-refinement techniques" Wiley and Teubner, 1996.

[61] R. Verfürth "*A posteriori* error estimates for nonlinear problems: $L^r(0,T;W^{1,\rho}(\Omega))$-error estimates for finite element discretizations of parabolic equations" Num. Meth. for PDE,vol 14, 1998, pp 487-518.

[62] R. Verfürth "*A posteriori* error estimates for nonlinear problems: $L^r(0,T;L^\rho(\Omega))$-error estimates for finite element discretizations of parabolic equations" Math. Comp., vol 67, 1998, pp 1335-1360.

[63] R. Verfürth "Error estimates for some quasi-interpolation operators" Modél. Math. et Anal. Num., vol 33, 1999, pp 695-713.

[64] S. Wolf "Principes physiques et numériques de TEMISCOMP triphasique" rapport IFP n° 41992, I.F.P., 1995

[65] B.I. Wohlmuth et R.H.W. Hoppe "A comparaison of *a posteriori* error estimators for mixed finite element discretizations by Raviart-Thomas elements" Math. Comp, vol 68, n°228, pp 1347-1378,1999.

Résumé :
Un bassin sédimentaire est un milieu poreux de grande dimension (plusieurs dizaines de kilomètres de long et de large pour une profondeur d'environ cinq kilomètres) qui évolue au cours du temps par les effets de compaction et de sédimentation. Au cours de cette évolution, des hydrocarbures vont se former et s'écouler dans le bassin. On établit alors un modèle permettant de simuler cette évolution de bassin ainsi que la création, la migration et le piégeage des hydrocarbures dans des roches appelées roches magasins. Ces phénomènes se déroulant sur des centaines de millions d'années, on s'est attaché à étudier principalement une discrétisation temporelle de ces équations.
On a ainsi mis en avant un raffinement local du pas de temps dont le principe est de recalculer la solution sur une zone jugée "mauvaise". A l'extérieure de cette zone, la solution est admissible. La difficulté vient de la détermination de la zone qui doit-être suffisamment "grande" pour avoir une bonne qualité de la solution, mais suffisamment "petite" pour obtenir un gain calcul. Les estimateurs *a posteriori* permettent de contourner cette difficulté.
On a donc entrepris une étude théorique de ces estimateurs *a posteriori* dans le cas des équations linéaires elliptique et parabolique. Des simulations numériques montrent l'efficacité de ces estimateurs dans des cas académiques.

Mots-Clés : Bassin sédimentaire, multiphasique, multiconstituant, milieu poreux, Volumes Finis, Estimateurs *a posteriori*, Eléments Finis Mixtes, Pas adaptatif en temps et en espace, maillage adaptatif, raffinement.

Abstract:
A sedimentary basin is a large porous medium (several hundred kilometers in length and in width and five kilometers in depth) which evolve in the course of time with the sedimentation and compaction effects. During this evolution, hydrocarbons appear and then flow in this basin. We also establish a model which permits to simulate a sedimentary basin evolution (compaction, sedimentation) and the hydrocarbon flows generation, migration and trapping. These phenomena occured during millions of years. Consequently, we mainly study time discretisation of these equations.
We exhibit a time local refinement strategy. The main idea of this strategy consists to distinguish the regions where the solution is well computed and those where an improvement of the accuracy is necessary. In the latter, the accuracy is improved by means of a time step refinement and a new computation of all the quantities. Nethertheless, the distinction between good and bad areas constitues a very serious difficulty. We overcome this issue using adequate *a posteriori* estimators for which we obtain several theorical and numerical results in the case of linear parabolic equations.

Key-Words: Sedimentary basin, multiphase, multicomponent, porous medium, Finite Volume, *A posteriori* estimators, Mixte Finite Element, Time and Space adaptative step, adaptive mesh, refinement.