



UNIVERSITE SIDI MOHAMED BEN ABDELLAH
FACULTE DES SCIENCES ET TECHNIQUES
DEPARTEMENT DES MATHÉMATIQUES

Master Mathématique et Applications au Calcul Scientifique (MACS)

MEMOIRE DE FIN D'ETUDES

Pour l'obtention du Diplôme de Master Sciences et Techniques
(MST)

Décomposition de domaines espace-temps pour les écoulements souterrains

◆ *Réalisé par : Khadija Talali*

◆ *Encadré par : El Khaoulani Rachid & Michel Kern*

Soutenu le 17 Juin 2017

Devant le jury composé de :

◆ Azzedine El baraka	Faculté des Sciences et Techniques Fès	Président
◆ Ezzaki Fatima	Faculté des Sciences et Techniques Fès	Examineur
◆ El Khaoulani Rachid	Faculté des Sciences et Techniques Fès	Encadrant
◆ Ettaouil Mohamed	Faculté des Sciences et Techniques Fès	Examineur
◆ El Ayadi Rachid	Faculté des Sciences et Techniques Fès	Examineur

Année Universitaire 2016/ 2017



Université Sidi Mohamed Ben Abdellah
Faculté des Sciences et Techniques-Fes

Master Mathématique et Applications au
Calcul Scientifique
Rapport de stage

Décomposition de domaines
espace-temps pour les écoulements
souterrains

Réalisé par :

Khadija TALALI

Encadré par :

Michel KERN

Rachid ELKHAOUANI EL IDRISSI

Membres de Jury :

Azzeddine EL BARAKA

Fatima EZZAKI

Mohamed ETTAOUIL

Rachid EL AYADI

Rachid EL KHAOUANI EL IDRISSI

ANNÉE UNIVERSITAIRE : 2016/2017

Table des matières

Introduction	2
Motivation	2
1 Ecoulement Diphasique dans les milieux poreux	13
1.1 Introduction	13
1.2 Généralités sur les milieux Poreux et la notion de Volume Élémentaire Représentatif (VER)	13
1.2.1 La porosité	15
1.2.2 La perméabilité	15
1.3 Description des deux phases et de leurs propriétés	15
1.4 La loi de Darcy et l'équation de conservation de masse	17
1.4.1 Loi de Darcy	17
1.4.2 L'équation de conservation de masse	19
1.5 Ecoulement diphasique immiscible dans un milieu poreux hétérogène . . .	20
1.5.1 Formulation mathématique	20
1.5.2 Présentation du problème mathématique	22
1.5.3 Transformation de l'équation	25
2 Volumes finis pour les problèmes de diffusion	27
2.1 Introduction	27

2.2	Rappel d'analyse fonctionnelle	27
2.3	Schéma volumes finis pour les problèmes de diffusion 1D	28
2.3.1	Discrétisation en espace	29
2.3.2	Discrétisation en temps : Schéma implicite	30
2.3.3	Convergence de schéma	32
2.4	Résultats numériques	32
2.4.1	Estimation de l'ordre de convergence	33
2.4.2	Simulations numériques	33
2.4.3	Analyse de l'erreur et ordre de convergence	37
3	Méthodes de décomposition de domaine appliquées au problème de diffusion 1D en espace	39
3.1	Introduction	39
3.2	Relaxation d'Ondes de Schwarz Optimisées(OSWR)	41
3.3	Le schéma multidomaine	43
3.4	L'équivalence entre la solution multidomaine et monodomaine	46
3.4.1	Problème d'interface	47

Remerciement

Nombreuses sont les personnes que j'aimerais remercier.

Merci à Monsieur Martin Vohralik, directeur de recherche et chef de l'équipe Serena pour la confiance qu'il m'a accordée et son accueil très chaleureux. Je remercie tout particulièrement mon encadrant principal Monsieur Michel Kern, chercheur au sein du projet Serena pour sa disponibilité, ses conseils, sa gentillesse, son aide précieuse, son attention, sa fine pédagogie et la clarté de ses explications.

Ma reconnaissance va également aux membres du jury, qui ont accepté d'être présent lors de ma soutenance. C'est un grand honneur. Je n'oublierai pas non plus la gentillesse et le soutien de Caroline Japhet, maître de conférence à l'Université Paris 13 et collaborateur de l'équipe Serena qui a accepté d'intervenir ponctuellement dans mon stage.

Je remercie également Patrik Daniel, Jad Dabaghi et Sarah Ali Hassan, doctorants de l'équipe Serena, pour leur accueil et leur disponibilités et leur bonne compagnie. Ma gratitude va également à Virginie Collette, assistance de l'équipe Serena, qui m'a aidée à intégrer l'équipe et affronter les tempêtes administratives. Il serait présomptueux d'occulter, Mamouni Abdellah, Abdel Aziz Taakili, enseignants chercheurs à la Faculté des Sciences et Techniques Errachidia, Elyes Ahmed, pour leur soutiens sans faille et leur disponibilité.

D'une manière plus générale, je remercie infiniment le centre Inria Paris de m'avoir accueilli et donner l'opportunité de découvrir un univers tant riche sur le plan scientifique que sur le plan humain. Parallèlement, je remercie tous mes enseignants de la Faculté

des Sciences et Techniques de Fes qui ont contribué à ma réussite, mon épanouissement culturelle et scientifique.

Pour finir, une attention très particulière à ma famille, ma mère, Fatima Hamidi, mes sœurs, mes frères mes grands-parents pour m'avoir épaulé, encouragé et sans lesquels je ne serai pas là où je suis aujourd'hui.

A mes chers parents.

Sources de mes joies, secrets de ma force.

Introduction

Actuellement dans l'industrie automobile, en médecine ou astrophysique, les problèmes complexes de calculs de structures et de reconnaissance de forme sont résolus sur des calculateurs parallèles composés de centaines de nœuds de calcul. L'utilisation efficace de ces machines requiert la conception et le développement des algorithmes adaptés pour exploiter au mieux possible toutes ressources disponibles lors de l'exécution. C'est dans ce sens que les méthodes de décomposition de domaine ont été développées. Le principe consiste à morceler un problème de grande taille en une suite de sous-problèmes de taille plus petite, Selon un algorithme itératif, les différents processeurs chargés de résoudre les problèmes locaux échangent, aux interfaces entre les sous-problèmes, les informations nécessaires pour converger vers la solution globale.

Ces méthodes se sont développées et ont été étendues à d'autres besoins. En effet, dans certaines applications, la modélisation recouvre différents milieux physiques ayant des propriétés très différentes (c'est le cas de la modélisation du stockage où l'on doit prendre en compte différents matériaux de propriétés hétérogènes dont le but est de simuler la migration de gaz autour de déchets nucléaires dans le sous-sol géologique) ou considère différents modèles selon des zones différentes (par exemple la modélisation du climat avec plusieurs modèles climatiques, ou encore le couplage océan atmosphère).

Dans ces cas de problèmes hétérogènes ou de couplage de modèles, les échelles en espace et en temps diffèrent et il est alors souhaitable d'utiliser des discrétisations différentes en espace et en temps selon les sous-domaines. Les méthodes de décomposition de domaine

espace-temps sont alors particulièrement adaptées, puisqu'elles découpent les problèmes en différents sous-domaines. On entrevoit cependant que la difficulté consistera dans la manière de traiter le problème sur les interfaces entre les sous domaines.

Dans ce travail, nous considérons les méthodes de décompositions de domaine espace temps, plus particulièrement les méthode de Schwarz optimisée de type relaxation d'ondes, Nous avons choisi de travailler avec un schéma en temps de type Euler implicite et avec le schéma volumes finis qui a l'avantage de pouvoir être utilisé sur des maillages admissibles et non conformes.

La première partie de ce document est une modélisation mathématique du stockage des déchets radioactifs dans les zones géologiques profondes, Dans la deuxième partie, nous résolvons le problème de diffusion linéaire avec différentes conditions aux limites sur un domaine global (dit schéma mono-domaine) en 1D espace. Dans le troisième chapitre, Nous avons défini un nouveau schéma multidomaine (schéma défini sur chacun des sous-domaines complété par des conditions de transmission), dont nous montrons le caractère bien posé puis l'équivalence avec le schéma monodomaine proposé. Nous présentons une méthode itérative de Schwarz optimisée de type relaxation d'ondes pour la résolution du problème multidomaine. Pour réaliser les tests numériques, un code Matlab à été développé. Nous terminons ce rapport par une conclusion.

Motivation

La gestion des déchets radioactifs est l'une des difficultés liée à la filière nucléaire. Une solution intéressante consiste à enfouir les déchets les plus nocifs dans un sous-sol stable et peu perméable afin de garantir le confinement des éléments radioactifs pour des millions d'années. Mais, l'eau contenu dans le sous-sol peut corroder l'acier contenu dans les colis de déchets et les structures du stockage provoquant un dégagement d'hydrogène non négligeable. Cette production d'hydrogène peut engendrer de fortes pressions au niveau du stockage et provoquer des fracturations de la roche environnante et donc accélérer la migration des radionucléides. Afin de mieux prévoir l'évolution de ces stockages à long terme (plusieurs dizaines de millier d'années), il est donc important de bien comprendre la problématique des écoulements diphasiques en milieu poreux et d'effectuer des simulations numériques fiables pour prévoir correctement comment l'hydrogène migre dans le site de stockage de déchets radioactifs.

Dans cette section, nous présentons une description du stockage des déchets radioactifs dans les couches géologiques profondes qu'est le cas d'application du projet Dedales (ANR-14-CE23-0005) : écoulement eau-gaz dans un milieu hautement hétérogène, avec de grandes disparités sur les échelles d'espace et de temps.

Le projet rassemble des équipes possédant des compétences dans les méthodes numériques pour les écoulements souterrains (Inria / Serena), en décomposition de domaines (Univ. Paris-Nord / Laga), en algèbre linéaire parallèle (Inria / Hiepacks), en calcul haute performance (Maison de la Simulation), et une agence publique qui possède

une longue expérience dans les simulation de situations complexes (Andra), le but est de développer des logiciels pour la simulation d'écoulements diphasiques en milieu poreux. Il vise essentiellement des ordinateurs parallèles dont chaque nœud est lui-même constitué d'un grand nombre de cœurs de calcul, tels qu'on les trouve dans les architectures récentes [2].

Le stockage en couche géologique profonde

L'Andra, Agence Nationale des Déchets Radioactives, étudie depuis plus de vingt ans le stockage profond, à environ 500 mètres sous terre, des déchets les plus radioactifs produits en France. L'un des enjeux est de créer un stockage à la fois hermétique et réversible, comme introduit dans le site web d'Andra [1]. Cela laisserait aux générations futures la possibilité de changer de stratégie en fonction des progrès techniques et de récupérer les colis de déchets intacts en toute sûreté pendant au moins cent ans.

Concept du stockage géologique

Les déchets concernés par le stockage profond sont ceux de haute activité (HA) et de moyenne activité à vie longue (MA-VL) [1].

Le stockage géologique est conçu pour retarder le relâchement et la migration des radioéléments sur une échelle de temps compatible avec leur période de décroissance. Il repose sur une conception multi-barrières dont le niveau le plus élevé est la formation géologique en elle-même. Les autres barrières mises en place sont : le colis de déchets en lui-même, le colis de stockage ainsi que d'éventuels dispositifs de confinement telle une barrière ouvragée en bentonite. Il existe différentes configurations possibles du stockage selon le type du déchet (la figure (1) représente une galerie pour les déchets de type HA). Par exemple, les déchets HA pourraient être vitrifiés puis placés dans un colis métallique lui-même séparé de l'alvéole par un chemisage métallique. Ces alvéoles sont comblées par des bouchons (de bétons, d'argiles gonflantes). (Voir [10],[3])

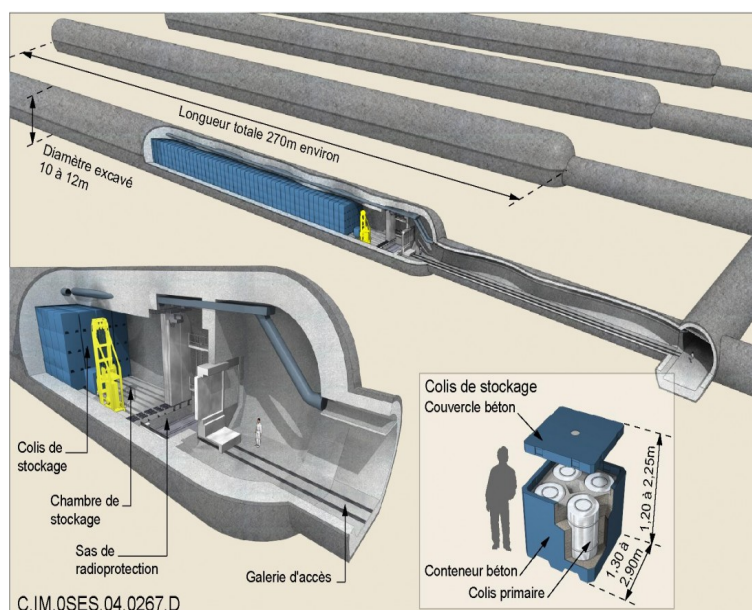


FIGURE 1 – Schéma d'une galerie de stockage de déchets HA par l'Andra

Différentes formations-hôtes sont actuellement étudiées ou utilisées dans le monde : tuf volcanique, granite, sel, argile, etc. Le comportement de ces différents matériaux vis-à-vis des contraintes du stockage (température et présence d'eau particulièrement) détermine la nature des barrières mises en place.

Depuis les années 90, des études sont menées à la limite des départements de la Meuse et de la Haute-Marne, là où se trouve une couche d'argile vieille de 160 millions d'année dont les propriétés permettraient d'isoler durablement les déchets les plus radioactifs, tant qu'ils présentent un risque [3]. L'argile sert ainsi de barrière naturelle à long terme en limitant et en retardant la dispersion dans l'environnement des substances contenues dans les déchets. Au fil du temps, plusieurs centaines d'années après la fermeture du stockage, l'eau et l'oxygène dégraderont le béton et l'acier des colis renfermant les déchets radioactifs vitrifiés ou bétonnés. Les radionucléides les plus solubles et les plus mobiles commenceront alors à se déplacer dans la roche. Dans l'argile qui est une roche très imperméable où l'eau se déplace très lentement, les radionucléides migreront principalement par diffusion. Ils se disperseront alors progressivement sur une étendue très importante et quelques uns remonteront lentement à la surface en traversant les autres couches géologiques de

propriétés très différentes [3]. Vue l'échelle de temps considérée (de plusieurs milliers à plusieurs millions d'années), le transport de radionucléides par convection ne peut toutefois pas être négligé.

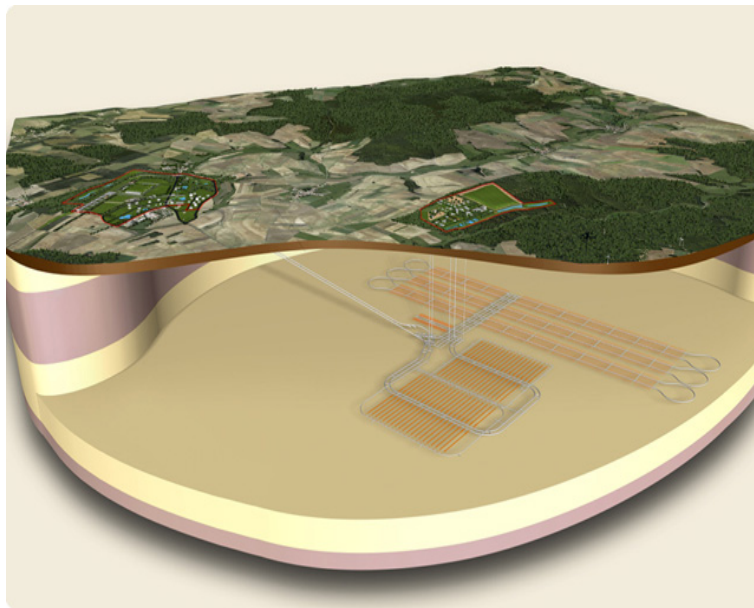


FIGURE 2 – Stockage en couche géologique profond

La modélisation des déplacements de l'eau dans le sous-sol est un problème complexe, principalement dicté par la loi de **Darcy** dans un milieu poreux. Dans ce type d'écoulement, c'est un différentiel de pression qui induit le déplacement de l'eau, celle-ci entraînant certains éléments avec elle. Cependant, même si l'eau ne peut pas se déplacer, des éléments peuvent migrer si un différentiel de concentration est établi (on parle alors de diffusion moléculaire).

Chapitre	1
----------	----------

Écoulement Diphasique dans les milieux poreux

1.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous fournissons le cadre physique général pour décrire l'écoulement d'un mélange eau/gaz dans un milieu poreux en présence de deux phases. Nous établissons les équations aux dérivées partielles (EDPs) régissant ces écoulements. Leur processus est gouverné par les relations issues de la loi de Darcy et de l'équation de continuité.

Pour simuler les déplacements du gaz, dans un site de stockage, il est nécessaire d'utiliser des modèles tenant compte du transfert d'hydrogène entre les phases.

1.2 Généralités sur les milieux Poreux et la notion de Volume Élémentaire Représentatif (VER)

Un milieu poreux est un assemblage de grains ou particules solides entre lesquels existent des vides (les pores) remplis par de l'eau, de l'air, ou d'autre fluides. Lorsque l'espace poreux est occupé par une seule phase fluide (le fluide désigne le liquide et/ou le gaz), le milieu est dit monophasique et lorsqu'il est occupé par plusieurs phases fluides, le milieu est dit multiphasique. La caractérisation du milieu poreux se base sur la

caractéristiques géométriques de ces grains et pores ainsi que sur leur capacité véhiculer ou laisser passer des fluides [26].

Les équations générales de la dynamique des fluides sont exprimées à l'échelle microscopique, c'est-à-dire valables à l'échelle du pore. À l'opposé, la forte hétérogénéité des milieux poreux nous contraint à nous placer à l'échelle macroscopique. Le milieu est alors considéré comme étant la superposition de différentes phases homogènes (par exemple : le squelette, la phase liquide et la phase gazeuse), il est alors vu comme étant un milieu continu multiphasique. plusieurs approches coexistent, permettant de définir des grandeurs locales, notamment l'approche Volume Élémentaire Représentatif (V.E.R) ou théorie de la continuité [4], l'approche stochastique [25] . Néanmoins, nous présenterons ici uniquement l'approche qui est basée sur l'existence d'un V.E.R. Dans cette théorie, le système physique réel discret est remplacé par un système continu, dans lequel les propriétés physiques le décrivant varient de manière continue dans l'espace. Cette théorie suppose qu'un système physique réel peut être approché par un système dans lequel les variations dans l'espace des propriétés que nous souhaitons étudier sont suffisamment faibles [21]. Ceci permet l'utilisation de calculs différentiels pour décrire les processus s'y déroulant. l'intérêt est donc de pouvoir formuler les changements sous forme d'équations aux dérivées partielles. Autrement dit, les variables physiques discontinues à l'échelle microscopique sont remplacées par des variables continues à l'échelle macroscopique.

Le modèle macroscopique présente l'avantage de reposer sur une notion intuitive : la notion d'échantillon. Cette dernière permet alors de définir des grandeurs moyennes attachées au milieu. Ainsi, nous allons pouvoir décrire les quantités définies à l'échelle macroscopique comme la moyenne de la quantité (exprimée à l'échelle microscopique) sur le V.E.R. Nous supposons par la suite, l'existence de ce V.E.R ainsi que l'obtention des équations à l'échelle macroscopique par prise de moyenne sur le V.E.R des équations données à l'échelle microscopique [23].

1.2.1 La porosité

Le sol et le sous-sol ne peuvent contenir de l'eau que s'ils possèdent une porosité significative. La porosité totale d'un sol ou d'une roche est le rapport du volume des vides et des interstices V_p de cette roche par rapport au volume total de l'échantillon V_t .

$$\phi = \frac{V_p}{V_t},$$

Par définition, $0 \leq \phi \leq 1$.

1.2.2 La perméabilité

La perméabilité est une caractéristique physique qui représente la facilité qu'un matériau à permettre le transfert de fluide au travers d'un réseau connecté. Elle dépend de la forme des grains, de la porosité et de la connectivité, donc elle est indépendante des caractéristiques du fluide.

1.3 Description des deux phases et de leurs propriétés

Dans un site de stockage des déchets radioactifs, le mélange fluide est supposé composé de deux phases : une phase liquide constituée d'un composant eau liquide et une phase gazeuse constituée d'hydrogène. Chaque phase $\alpha \in \{l, g\}$, est constituée d'un seul composante w ou h . On note w le composant eau (constituant de la phase liquide) et h le composant d'hydrogène (constituant de la phase gazeuse). L'écoulement est supposé diphasique (liquide et gaz) [21].

Pour chaque phase $\alpha \in \{l, g\}$, on note ρ_α sa densité massique et p_α sa pression. On suppose que la porosité ϕ ne dépend que de l'espace (milieu poreux indéformable). Enfin, on définit la saturation s de la phase $\alpha \in \{l, g\}$ comme le rapport entre le volume occupé par la phase α et le volume poreux où le fluide est libre de circuler. Puisque le volume poreux est entièrement occupé par le fluide, nous avons la relation suivante

$$s_l + s_g = 1, \tag{1.1}$$

En présence de deux fluides immiscibles en milieu poreux, la pression capillaire π relie les pressions de ces deux fluides de part et d'autre de l'interface les séparant. Elle correspond à la différence entre la pression du fluide non mouillant et le fluide mouillant. Cette différence est due à la courbure de l'interface, la pression du fluide du côté concave de l'interface étant supérieure à celle du côté convexe [11]. Dans un pore, le sens de la courbure de l'interface entre les deux fluides provient de la capacité plus ou moins grande de chaque fluide à mouiller la paroi solide. Donc, dans le cas liquide/gaz, le liquide est le fluide le plus mouillant et par conséquent la pression du gaz est supérieure à celle du liquide. Les expérimentations font apparaître que la pression capillaire dépend essentiellement de la saturation et ceci d'une manière monotone [26].

Dans la suite, on exprimera la pression capillaire comme une fonction univoque de la saturation. Pour une configuration liquide/gaz, on définit donc

$$\pi(s_l) = p_g - p_l, \quad (1.2)$$

Dans le cas liquide/gaz, on observe l'existence d'une saturation résiduelle en liquide $s_{l,res}$ pour laquelle la phase liquide ne peut plus s'écouler. A la limite $s_l \rightarrow s_{l,res}$, la phase liquide ne forme alors plus une phase continue dans les pores. Cette perte de continuité hydraulique se traduit par une asymptote verticale de la pression capillaire lorsque la saturation liquide tend vers la saturation résiduelle. Autrement dit, nous avons

$$\lim_{s_l \rightarrow s_{l,res}} \pi(s_l) = +\infty,$$

La mouillabilité du gaz étant nettement moindre que celle du liquide, la saturation résiduelle du gaz peut être considérée nulle ($s_{g,res} = 0$) et donc nous aurons une pression capillaire finie lorsque la saturation du gaz est nulle. Dans la suite, on considère que $\pi(s_l = 1) = 0$. Des modèles classiques, donnés par *Van Genuchten, Brooks et Corey* [19].., sont utilisées pour décrire la pression capillaire et la perméabilité relative, qui sera introduite dans la suite, en fonction de la saturation.

La figure (1.2) représente un exemple d'évolution de la pression capillaire utilisée en fonction de la saturation liquide.

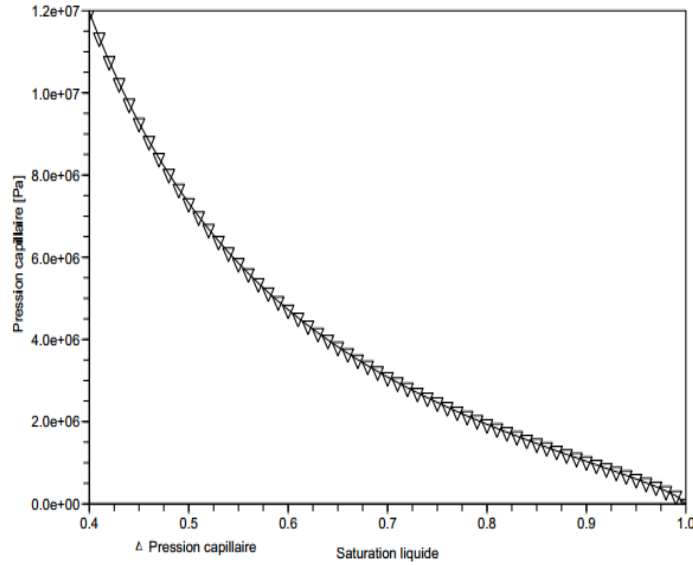


FIGURE 1.1 – Exemple d'évolution de la pression capillaire [Pa] utilisée en fonction de la saturation liquide.

1.4 La loi de Darcy et l'équation de conservation de masse

1.4.1 Loi de Darcy

La loi de Darcy a été établie expérimentalement par Henry Darcy en 1856. Elle est notamment utile pour calculer les écoulements souterrains d'un fluide à travers un milieu poreux (comme, par exemple, dans un barrage en terre).

La Loi de Darcy est donnée par l'équation suivante :

$$u = -\frac{k}{\mu}(\nabla p - \rho g \nabla z), \quad (1.3)$$

- u : Le vecteur vitesse de Darcy (m/s).
- k : le tenseur de perméabilité : $k = (k)_{ij}(\text{m}^2)$ pour $ij = 1, 2, 3$ est la perméabilité intrinsèque du milieu.
- μ : La viscosité ($\text{Pa} \cdot \text{m}$).
- ρ : La masse volumique du fluide ($\text{kg} \cdot \text{m}^3$).

- p : La pression du fluide (Pa).
- z : La cote verticale (m).
- g : La constante de gravité (m/s²).

On définit la charge hydraulique h (m) par

$$h = \frac{p}{\rho g} + z. \quad (1.4)$$

La loi de **Darcy-Muskat** généralise la loi de **Darcy** aux cas multiphasiques en introduisant la notion de perméabilité relative de la façon suivante

$$u_\alpha = -\frac{k_{r_\alpha}}{\mu_\alpha} k(\nabla p_\alpha - \rho_\alpha g \nabla z),$$

où, k_{r_α} représente la perméabilité relative de la phase α .

k_{rl} (resp. k_{rg}) est une fonction de la saturation à valeur dans $[0, 1]$, croissante (resp. décroissante) vérifiant

$$k_{rl}(s_l = 0) = 0, \quad \text{et} \quad k_{rl}(s_l = 1) = 1.$$

(resp.

$$k_{rg}(s_l = 0) = 1, \quad \text{et} \quad k_{rg}(s_l = 1) = 0.$$

La figure (1.4.1) représente un exemple de profils de perméabilités relatives

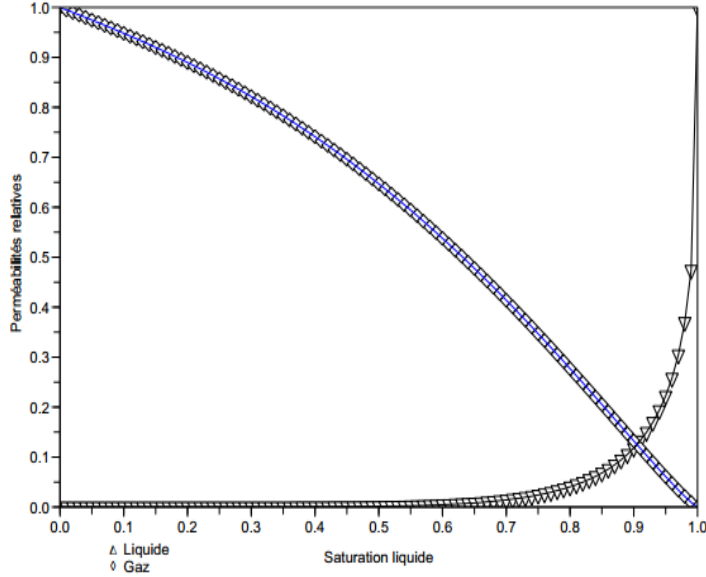


FIGURE 1.2 – Exemple de profils de perméabilités relatives.

1.4.2 L'équation de conservation de masse

L'équation de conservation de masse, dans le cas monophasique, décrivant le débit massique dans un petit élément d'un milieu poreux saturé est donnée par

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = -\text{div}(\rho u) + q, \quad (1.5)$$

où q est un terme de source, et ρ est la densité du fluide supposée constante.

Si le fluide est légèrement compressible, il est utile d'introduire le coefficient d'emménagement $S_s(\text{m}^{-1})$

$$S_s = g \frac{\partial(\phi\rho)}{\partial p}, \quad (1.6)$$

en utilisant la définition de h dans (1.4) et de (1.5) nous obtenons

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \text{div}(u) = \frac{q}{\rho}, \quad \text{dans } \Omega \times [0, T],$$

et

$$u = -K \nabla h, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T).$$

Pour un fluide incompressible

Dans ce cas, le terme source et S_s sont nuls, et l'écoulement devient indépendant du temps, ce qui donne

$$\begin{cases} \operatorname{div}(u) = 0, & \text{dans } \Omega, \\ u = -K\nabla h, & \text{dans } \Omega, \\ +\text{conditions aux limites.} \end{cases}$$

Dans la suite, nous négligeons la gravité g ,

1.5 Ecoulement diphasique immiscible dans un milieu poreux hétérogène

1.5.1 Formulation mathématique

Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement et la loi de Darcy appliquées à chaque phase ont la forme suivante :

$$\frac{\partial(\phi s_w)}{\partial t} + \operatorname{div}(u_w) = \frac{q_w}{\rho_w}, \quad (1.7)$$

$$\frac{\partial(\phi s_g)}{\partial t} + \operatorname{div}(u_g) = \frac{q_g}{\rho_g}, \quad (1.8)$$

$$u_w = -\lambda_w K \nabla p_w, \quad (1.9)$$

$$u_g = -\lambda_g K \nabla p_g, \quad (1.10)$$

$$s_w + s_g = 1, \quad (1.11)$$

$$\pi = p_g - p_w. \quad (1.12)$$

On additionne les équations (1.7) et (1.8), on obtient

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi(s_w + s_g)) + \operatorname{div}(u_w + u_g) = \frac{q_w}{\rho_w} + \frac{q_g}{\rho_g}. \quad (1.13)$$

Nous posons $u = u_w + u_g$ la vitesse totale, le problème (1.13) devient

$$\operatorname{div}(u) = \frac{q_w}{\rho_w} + \frac{q_g}{\rho_g}. \quad (1.14)$$

En utilisant la loi de **Darcy-Muskat** (1.9,1.10), et l'expression de la pression capillaire (1.12), nous pouvons exprimer la vitesse totale u en fonction de la pression de phase non mouillante p_g , d'où

$$u = -\lambda K \nabla p_g - f_w \nabla \pi, \quad (1.15)$$

avec

$$\lambda = \lambda_g + \lambda_w \quad \text{et} \quad f_w = \frac{\lambda_w}{\lambda},$$

Les vitesses de phase u_α peuvent s'exprimer en fonction de la vitesse totale en utilisant l'approche suivante :

$$\lambda_g u_w - \lambda_w u_g = \lambda_w \lambda_g K \nabla \pi, \quad (1.16)$$

par suite,

$$u_w = f_w u + \lambda_g f_w K \nabla \pi, \quad (1.17)$$

et

$$u_g = f_g u - \lambda_g f_g K \nabla \pi. \quad (1.18)$$

Nous allons utiliser une fonction pression globale comme définie dans [7] par

$$P_{\text{globale}}(x, t, s(x, t)) = p_g - \int_0^s f_w(s(x, t)) \nabla \pi(s(x, t)) \, dx, \quad (1.19)$$

donc

$$\nabla P_{\text{globale}}(x, t, s_w(x, t)) = \nabla p_g(x, t) - f_w(s_w(x, t)) \nabla \pi(s_w(x, t)), \quad (1.20)$$

par conséquent, la relation (1.15) s'écrit comme suit

$$u = -\lambda K \nabla P_{\text{globale}} \quad (1.21)$$

A l'aide de l'expression de la pression globale, on peut réécrire l'équation (1.8) sous forme :

$$\frac{\partial(\phi s_g)}{\partial t} - \text{div} \left(\lambda_g K (\nabla P_{\text{globale}} + f_w \nabla \pi) \right) = \frac{q_g}{\rho_g}, \quad (1.22)$$

d'où

$$\begin{cases} \frac{\partial(\phi s_g)}{\partial t} - \text{div}(\lambda_g K f_w \nabla \pi) = \frac{q_g}{\rho_n} - \text{div}(Q_t) \\ Q_t = -\lambda_g K \nabla P_{\text{globale}}, \\ + \text{conditions initiales} + \text{conditions aux limites.} \end{cases} \quad (1.23)$$

Pour simplifier, on suppose que $Q_t = 0$. (pour plus de détaille sur la notion de la pression globale, voir [7],[8])

Dans la suite de ce travail, on note u la saturation du gaz, et on prend la porosité $\phi = 1$.

1.5.2 Présentation du problème mathématique

Soit Ω un ouvert borné de $\mathbb{R}^d (d = 1, 2, 3)$, $\partial\Omega$ sa frontière et $[0, T]$ un intervalle de temps avec $T > 0$. Nous considérons le modèle d'écoulement diphasique (1.23) dans un milieu poreux hétérogène avec une convection négligeable. Sa forme mathématique, avec la nouvelle notation, ie. $s_g = u$, est la suivante : étant donné une saturation initiale u_0 et un second membre f , trouver u solution du problème suivant

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\lambda(u, x) \nabla \pi(u, x)) = f, & \text{sur } \Omega \times [0, T], \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \Omega, \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0, & \text{sur } \partial\Omega \times [0, T], \end{cases} \quad (1.24)$$

où $u : \Omega \times [0, T] \rightarrow [0, 1]$ est la saturation du gaz (donc $(1-u)$ est la saturation du liquide), $\pi(u, x) : [0, 1] \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ est la pression capillaire, et $\lambda(u, x) : [0, 1] \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ est la mobilité globale du gaz. Pour simplifier, nous considérons les conditions de Neumann homogènes sur $\partial\Omega$.

La mobilité globale $\lambda(u) \rightarrow 0$ quand $u \rightarrow 0$ et $u \rightarrow 1$, de plus $\pi'(u) \rightarrow 0$ quand u tend vers 0, par conséquent, (1.24) est un problème parabolique non linéaire dégénéré.

L'écoulement entre deux roches de types différents

Dans cette partie, nous présentons le problème (1.24) dans un milieu poreux avec une discontinuité de la pression capillaire [11]. On décompose le domaine Ω en deux sous domaines disjoints Ω_i $i = 1, 2$ séparés par une interface Γ , i.e $\Gamma = \partial\overline{\Omega}_1 \cap \partial\overline{\Omega}_2$. Soit $\Gamma_i^D = \partial\Omega_i \cap \partial\Omega$. Supposons que les fonctions λ et π sont homogènes dans chaque $\Omega_i, i = 1, 2$,

i.e, $\pi_i(\cdot) = \pi(x, \cdot)$, $\lambda_i(\cdot) = \lambda(x, \cdot)$, $\forall x \in \Omega_i$. L'équation (1.24) dans chaque Ω_i s'écrit

$$\begin{cases} \frac{\partial u_i}{\partial t} - \operatorname{div}(\lambda_i(u_i) \nabla \pi_i(u_i)) = f_i, & \text{dans } \Omega_i \times (0, T), \\ u_i(x, 0) = u_0(x), & x \in \Omega_i, \\ \frac{\partial u_i}{\partial n} = 0, & \text{sur } \Gamma_i^D \times [0, T]. \end{cases} \quad (1.25)$$

Pour donner un cadre raisonnable, compatible avec la physique, nous précisons les hypothèses suivantes :

Hypothèses

1. Pour tout $i \in \{1, 2\}$, $\pi_i(\text{resp. } \lambda) \in C^0(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ avec $\pi_i(\text{resp. } \lambda)|_{[0,1]} \in C^1([0, 1], \mathbb{R})$ est croissante et satisfait $\pi_i(u) = \pi_i(0)$ (resp. $\lambda_i(u) = \lambda_i(0)$), pour tout $u \leq 0$ et $\pi_i(u) = \pi_i(1)$ (resp. $\lambda_i(1) = \lambda_i(u)$) pour tout $u \geq 1$ (prolongement par continuité).
2. la condition initiale $u_0 \in L^\infty(\Omega)$, avec $0 \leq u_0 \leq 1$.
3. Le second membre $f \in L^2([0, T]; \mathbb{R}^2(\Omega))$.

Nous décrivons les conditions de transmission sur l'interface Γ

Conditions de transmission

Dans cette partie, nous présentons les conditions de transmission permettant l'échange d'information entre les sous domaines. Nous considérons deux cas. Le premier est quand

$$\pi_1(0) = \pi_2(0) \quad \text{et} \quad \pi_1(1) = \pi_2(1), \quad (1.26)$$

dans ce cas, on a

$$\begin{aligned} \pi_1(u_1) &= \pi_2(u_2), & \text{sur } \Gamma \times [0, T], \\ \lambda_1 \nabla \pi_1(u_1) \cdot n_1 &= -\lambda_2 \nabla \pi_2(u_2) \cdot n_2, & \text{sur } \Gamma \times [0, T]. \end{aligned}$$

Ces conditions donnent une saturation discontinue sur l'interface Γ , i.e, en général on trouve $u_1 \neq u_2$.

Dans le deuxième cas, i.e, dans le cas où

$$\pi_1(0) \neq \pi_2(0) \quad \text{ou} \quad \pi_1(1) \neq \pi_2(1), \quad (1.27)$$

la pression capillaire est discontinue sur l'interface, la condition (1.27), étudiée dans [17], a une conséquence directe sur le comportement de la pression capillaire sur les deux cotés de

Γ . Supposons que $\pi_1(0) < \pi_2(0) < \pi_1(1) < \pi_2(1)$, et soit $u_1^* \in [0, 1]$ tel que $\pi_1(u_1^*) = \pi_2(0)$, et $u_2^* \in [0, 1]$ tel que $\pi_2(u_2^*) = \pi_1(1)$.

1. $u_1 \geq u_1^*$ et $u_2 \leq u_2^*$, on a une continuité de la pression capillaire sur l'interface Γ , $\pi_1(u_1) = \pi_2(u_2)$.

2. $0 \leq u_1 \leq u_1^*$, on a $u_2 = 0$, et la phase gazeuse est piégée dans la roche Ω_1 , et l'eau circule à travers Γ .

3. La même chose si $u_2^* \leq u_2 \leq 1$, on a $u_1 = 1$, la phase aqueuse est capturée dans Ω_1 , et le gaz circule à travers Γ .

Ce cas permet de mettre en évidence le phénomène de piégeage capillaire [6].

En introduisant les fonctions modifiées $\bar{\pi}_1$ et $\bar{\pi}_2$ définies par $\bar{\pi}_1 : u \mapsto \max(\pi_1(u), \pi_2(0))$ et $\bar{\pi}_2 : u \mapsto \min(\pi_2(u), \pi_1(1))$ (voir la figure (1.3) droite). Ces conditions sur l'interface Γ sont simplement données par

$$\begin{aligned} \bar{\pi}_1(u_1) &= \bar{\pi}_2(u_2), & \text{sur } \Gamma \times [0, T], \\ \lambda_1(u_1) \nabla \pi_1(u_1) \cdot n_1 &= -\lambda_2 \nabla \pi_2(u_2) \cdot n_2, & \text{sur } \Gamma \times [0, T], \end{aligned} \quad (1.28)$$

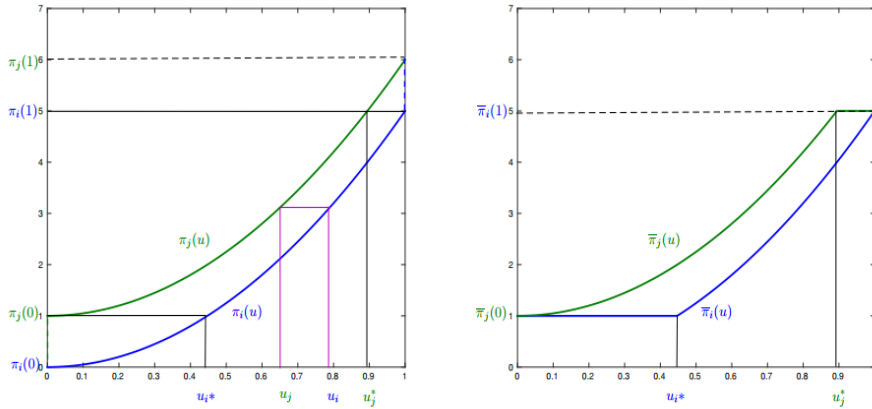


FIGURE 1.3 – Pression capillaire(à gauche) et troncature de la pression capillaire (à droite)

1.5.3 Transformation de l'équation

Pour tout $i = 1, 2$, Ω_i est une roche homogène, π_i et λ_i ne dépendent pas de x , on peut définir la transformation de Kirchhoff par

$$\varphi_i : \begin{cases} [0, 1] & \longrightarrow \mathbb{R}^+ \\ s & \mapsto \int_0^s \lambda_i(a) \pi_i'(a) da, \end{cases} \quad (1.29)$$

alors φ_i est une fonction lipschitzienne continue croissante sur $[0, 1]$.

Soit $L_{\varphi,i} = \max_{a \in [0,1]} \lambda_i(a) \pi_i'(a)$ constante de Lipschitz, alors

$$|\varphi_i(a) - \varphi_i(b)| \leq L_{\varphi,i} |a - b|, \forall (a, b) \in [0, 1]^2. \quad (1.30)$$

Nous appliquons la transformation de Kirchhoff (1.29) sur chaque sous-domaine,

$$\begin{cases} \frac{\partial u_i}{\partial t} - \Delta \varphi_i(u_i) = f_i, & \text{sur } \Omega_i \times [0, T], \\ u_i(x, 0) = u_0(x), & x \in \Omega, \\ \varphi_i(u_i) = 0, & (x, t) \in \Gamma_i^D \times [0, T]. \end{cases} \quad (1.31)$$

En effet,

$$\begin{aligned} \nabla \varphi_i(s(x)) &= \lambda_i(s) \pi_i'(s) \cdot \nabla(s(x)), \\ &= \lambda_i(s) \nabla \pi_i(s(x)), \end{aligned} \quad (1.32)$$

$\Rightarrow$

$$\operatorname{div}(\nabla \varphi_i) = \operatorname{div}(\lambda_i \nabla \pi_i)$$

donc

$$\Delta \varphi = \operatorname{div}(\lambda_i \nabla \pi_i). \quad (1.33)$$

Nous précisons les nouvelles conditions de transmissions [12], soit ϕ une fonction strictement croissante définie par

$$\phi : \begin{cases} [\pi_2(0), \pi_1(1)] & \longrightarrow \mathbb{R}^+ \\ s & \longmapsto \int_{\pi_2(0)}^s \min_{j \in \{1,2\}} (\lambda_j \circ \pi_j^{-1}(a)) dx, \end{cases} \quad (1.34)$$

et soit $\Pi_i = \phi \circ \bar{\pi}_i$, $\forall i \in \{1, 2\}$. La restriction de Π_i à $[0, 1]$ est une fonction croissante, et on a $\Pi_i(u) = \Pi_i(0)$ pour tout $u \leq 0$ et $\Pi_i(u) = \Pi_i(1)$ pour tout $u \geq 1$. Nous définissons

aussi la fonction Π par

$$\Pi(u, x) = \Pi_i(u), \quad \forall x \in \Omega_i. \quad (1.35)$$

La fonction Π introduite dans [14], et utilisée dans [6], est plus régulière que $\bar{\pi}$, et pour tout $(u_1, u_2) \in \mathbb{R}^2$, on a

$$\bar{\pi}_1(u_1) = \bar{\pi}_2(u_2) \Leftrightarrow \Pi_1(u_1) = \Pi_2(u_2). \quad (1.36)$$

Donc la nouvelle expression des conditions de transmission est donnée par

$$\begin{aligned} \Pi_1(u_1) &= \Pi_2(u_2), & (x, t) &\in \Gamma \times [0, T], \\ \nabla \varphi_1(u_1) \cdot n_1 &= -\nabla \varphi_2(u_2) \cdot n_2, & (x, t) &\in \Gamma \times [0, T]. \end{aligned} \quad (1.37)$$

En général, Le problème multi-domaine (1.31)-(1.37) n'admet pas de solution forte, l'existence d'une solution faible a été démontrée dans [13].

Chapitre

2

Volumes finis pour les problèmes de diffusion

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous résolvons l'équation de diffusion sur un domaine globale (problème monodomaine) avec des conditions aux bords de type Dirichlet ou Robin, Pour la discrétisation en espace, on utilise une méthode volumes finis sur un maillage régulier, et un schéma implicite en temps. Nous commençons par rappeler quelques notions d'analyse fonctionnelle.

2.2 Rappel d'analyse fonctionnelle

Définition 2.1 *les espaces $L^2(\Omega)$* [5]

Soit Ω un ouvert de $\mathbb{R}^N$ muni de la mesure de Lebesgue. On définit l'espace $L^2(\Omega)$ comme étant l'espace des fonctions mesurables de carré sommable sur Ω :

$$L^2(\Omega) = \{u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \text{ mesurable tel que } \int_{\Omega} |u|^2 < \infty\},$$

muni du produit scalaire :

$$\langle f, g \rangle = \int_{\Omega} f(x) \cdot g(x) dx,$$

$L^2(\Omega)$ est un espace de **Hilbert**.

On note

$$\|f\|_{L^2(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |f(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}},$$

La norme correspondante.

Définition 2.2 [5] Soit X un espace de Hilbert, muni de la norme hilbertienne $\| \cdot \|_X$. $L^2([0, T]; X)$ dénote l'espace des fonctions mesurables f définies sur $[0, T]$ à valeurs dans X pour la mesure dt , telles que $\int_0^T \| f(t) \|_X^2 dt < \infty$, la norme correspondante étant définie par

$$\| f \|_{L^2([0, T]; X)} = \left(\int_0^T \| f(t) \|_X^2 dt \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.1)$$

$L^\infty([0, T]; X)$ dénote l'espace des fonctions mesurables f définies sur $[0, T]$ à valeurs dans X et bornées presque partout sur $[0, T]$.

Définition 2.3 Les espaces de Sobolev [5]

$*H^1(\Omega) = \{u \in L^2(\Omega) / \frac{\partial u}{\partial x_i} \in L^2(\Omega); 1 \leq i \leq N\}$ ou $\frac{\partial u}{\partial x_i}$ est définie au sens de distribution.

$H^1(\Omega)$ est appelé espace de Sobolev d'ordre 1.

$*H^2(\Omega) = \{u \in L^2(\Omega) / \frac{\partial u}{\partial x_i} \in L^2(\Omega) \text{ et } \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} \in L^2(\Omega); 1 \leq i, j \leq N\}$ est appelé espace de Sobolev d'ordre 2.

2.3 Schéma volumes finis pour les problèmes de diffusion 1D

Nous nous plaçons dans le cas d'un modèle 1D, et pour simplifier, nous prenons la porosité égale à 1. $T > 0$ étant fixé, on considère le problème unidimensionnel suivant

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial u}{\partial x} \right) = f, & \text{sur } [0, L] \times [0, T], \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in [0, L], \\ u(0, t) = g_{d1}(t), u(L, t) = g_{d2}(t), & \text{sur } [0, T], \end{cases} \quad (2.2)$$

où $f \in L^2([0, T]; L^2([0, L]))$, $u_0 \in L^2([0, L])$ et $\exists D^-, D^+$ tel que $0 < D^- < D < D^+$.

Théorème 2.1 Théorème d'existence[9]

Sous les hypothèses précédentes, le problème (2.2) admet une solution faible u dans $L^\infty([0, T]; L^2(\mathbb{R})) \cap L^2([0, T]; H^1(\mathbb{R}))$.

2.3.1 Discrétisation en espace

On subdivise l'intervalle $[0, L]$ en N sous intervalles (volumes de contrôle) K_i , $i = 1, \dots, N$, avec $K_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$, $x_{1/2} = 0$ et $x_{N+1/2} = L$. Pour simplifier les calculs, nous supposons que D est constante sur $[0, L]$, et $h = x_{i+1/2} - x_{i-1/2} = x_{i+1} - x_i$. Pour chaque volume de contrôle K_i , on se donne un point $x_i \in K_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$. On pourra considérer par exemple (mais ce n'est le seule choix possible) : $x_i = \frac{(x_{i+1/2} + x_{i-1/2})}{2}$.

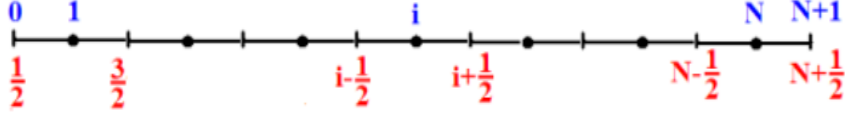


FIGURE 2.1 – Discrétisation du domaine $[0, L]$.

On intègre l'équation (2.2) sur K_i , on obtient :

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{\partial u}{\partial t} dx - \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial u}{\partial x} \right) dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(x, t) dx, \quad (2.3)$$

on pose $f_i = \frac{1}{h} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(x, t) dx$, donc

$$h \frac{\partial u_i}{\partial t} + F_{i+1/2} - F_{i-1/2} = h f_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.4)$$

le flux diffusif en $x_{i+1/2}$, noté $F_{i+1/2}$, est donné par l'approximation aux différences finies suivante :

vu la maille i ,

$$F_{i+1/2} = -2D \frac{u_{i+1/2} - u_i}{h}, \quad (2.5)$$

et vu la maille $i+1$

$$F_{i+1/2} = -2D \frac{u_{i+1} - u_{i+1/2}}{h}, \quad (2.6)$$

où $u_{i+1/2}(t)$ est l'inconnue approchant $u(x_{i+1/2}, t)$, $\forall t \in [0, T]$, qui sera éliminée en écrivant la conservation du flux diffusion.

2.3.2 Discrétisation en temps : Schéma implicite

On discrétise l'intervalle $[0, T]$ en N sous-intervalles $]t_n, t_{n+1}[$ tels que $t_0 = 0 < t_1 < \dots < t_{N+1} = T$, et on note par u_i^n la valeur de $u_i(n\Delta t)$, on intègre (2.2) en un point x_i par rapport au temps donc on aura :

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\partial u_i}{\partial t} dx - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial u}{\partial x} \right) dx = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(x, t) dx, \quad (2.7)$$

où $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ ce qui donne :

$$h(u_i^{n+1} - u_i^n) + (F_{i+1/2}^{n+1} - F_{i-1/2}^{n+1})\Delta t = f_i^n h \Delta t, \quad (2.8)$$

où f_i^n est la valeur moyenne exacte de f sur la cellule $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$, $F_{i+1/2}^{n+1} = -D \frac{u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}}{h}$ et $F_{i-1/2}^{n+1} = -D \frac{u_i^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{h}$.

On a alors, l'équation discrète :

$$\begin{cases} hu_i^{n+1} - D \left(\frac{u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}}{h} \right) \Delta t + D \left(\frac{u_i^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{h} \right) \Delta t = hu_i^n + f_i^n h \Delta t, & \forall i = 1, \dots, N, \\ + \text{Conditions aux limites.} \end{cases} \quad (2.9)$$

En regroupant les termes on obtient :

$$- \Delta t \frac{D}{h} u_{i-1}^{n+1} + \left(h + 2 \frac{D}{h} \Delta t \right) u_i^{n+1} - \Delta t \frac{D}{h} u_{i+1}^{n+1} = hu_i^n + f_i^n h \Delta t, \quad \forall i = 1, \dots, N \quad (2.10)$$

Conditions aux bords

Pour la condition de Dirichlet imposée dans les hypothèses on a :

1. Pour $i = 1$, le schéma (2.10) s'écrit :

$$\left(h + 2 \frac{D}{h} \Delta t \right) u_1^{n+1} - \Delta t \frac{D}{h} u_2^{n+1} = hu_1^n + \left(\Delta t \frac{D}{h} \right) g_{d1}^{n+1} + hf_1^n \Delta t. \quad (2.11)$$

2. Pour $i = N$,

$$- \Delta t \frac{D}{h} u_{N-1}^{n+1} + \left(h + 2 \frac{D}{h} \Delta t \right) u_N^{n+1} = hu_N^n + \left(\Delta t \frac{D}{h} \right) g_{d2}^{n+1} + hf_N^n \Delta t, \quad (2.12)$$

où g_{d1}^{n+1} (resp. g_{d2}^{n+1}) est une approximation de g_{d1} (resp. g_{d2}) sur $x_{1/2}$ (resp. $x_{N+1/2}$) à l'instant t_{n+1} .

Le système linéaire :

On a donc un système linéaire sous la forme $Au = b$ où $u = (u_1^{n+1}, \dots, u_N^{n+1})^T$ est la solution du système. La matrice tridiagonale A est définie par :

$$A = \begin{pmatrix} h + 2a_d & -a_d & & & 0 \\ -a_d & h + 2a_d & -a_d & & \\ & -a_d & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -a_d \\ 0 & & & -a_d & h + 2a_d \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

avec $a_d = \frac{D}{h}\Delta t$.

Le vecteur de second membre b contient les conditions aux limites, est donné par :

$$b = \begin{pmatrix} hu_1^n + f_1^n h \Delta t + \Delta t \frac{D}{h} g_{d1}^{n+1} \\ hu_2^n + h \Delta t f_2^n \\ \vdots \\ hu_{N-1}^n + h f_{N-1}^n \Delta t \\ hu_N^n + f_N^n \Delta t + \frac{D}{h} \Delta t g_{d2}^{n+1} \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Comme A est à diagonale strictement dominante i. e :

$$|a_{ii}| > \sum_{i \neq j} |a_{ij}|, \quad (2.15)$$

alors A est inversible, et le problème discret admet une unique solution. Plusieurs méthodes directes sont possibles pour résoudre le système linéaire, on considère par exemple la méthode de décomposition LU.

Autres conditions aux limites

Conditions de Neumann et Fourier On appelle condition de Neumann une condition qui impose une valeur du flux, par exemple :

$$-Du'(0, t) = g_N(t). \quad (2.16)$$

On appelle condition de Fourier ou condition de Robin une condition qui impose une relation entre la valeur du flux et la valeur de la solution, par exemple,

$$Du'(L, t) + \alpha u(L, t) = g_R(t), \quad (2.17)$$

avec $\alpha > 0$.

Enfin, on dit que les conditions sont mixtes dans le cas unidimensionnel si, par exemple, on a une condition de Dirichlet en 0 et une condition de Neumann en L .

Schéma de volumes finis

La condition de Neumann est particulièrement simple à prendre en compte, puisque le schéma de volumes finis fait intervenir l'approximation du flux au point 0, $u'(0, t_{n+1})$ dans l'équation (2.11), que l'on discrétise donc par :

$$hu_1^{n+1} - \Delta t D \frac{u_2^{n+1} - u_1^{n+1}}{h} - \Delta t D g_N^{n+1} = hf_1 \Delta t + hu_1^n, \quad (2.18)$$

On tient compte ensuite de la condition de Fourier (2.17) pour approcher le terme $Du'(L, t_{n+1})$ dans l'équation (2.12) : on peut par exemple approcher $Du'(L, t_{n+1})$ par $g_R(t_{n+1}) - \alpha u_N^{n+1}$, cette approche est bien adaptée au schéma monodomaine [16], par contre, elle n'est pas adaptée au cas de décomposition de domaine (voir chapitre 3), ce qui donne :

$$h(u_N^{n+1} - u_N^n) + (F_{N+1/2}^{n+1} - F_{N-1/2}^{n+1})\Delta t = hf_N^{n+1}\Delta t, \quad (2.19)$$

où $F_{N+1/2}^{n+1} = \alpha u_N^{n+1} - g_R^{n+1}$ et $F_{N-1/2}^{n+1} = -\frac{u_N^{n+1} - u_{N-1}^{n+1}}{h}$.

2.3.3 Convergence de schéma

Théorème 2.2 [15] *On suppose que la solution u de notre équation est de classe C^2 sur $[0, L] \times [0, T]$, on pose $e_i^n = u(x_i, t_n) - u_i^n$ pour $i = 1, \dots, N$, et $e_0^n = e_{N+1}^n = 0$, il existe une constante $K > 0$ ne dépend pas de h tel que le schéma discrétisé est convergent, ie. $\exists K > 0$ ne dépend de h , tel que :*

$$\left(\sum_{i=1, \dots, N} h(e_i^n)^2 \right)^{1/2} \leq K(h + \Delta t). \quad (2.20)$$

2.4 Résultats numériques

Dans cette partie, nous allons présenter quelques résultats numériques. Premièrement On va comparer la solution numérique avec la solution exacte, deuxièmement nous allons faire une analyse de l'erreur entre la solution exacte et la solution approchée.

2.4.1 Estimation de l'ordre de convergence

On définit l'erreur relative en norme l^2 , $e_h = \frac{\|u - u_h\|_{l^2}}{\|u\|} = \frac{\sqrt{\sum_n (\sum_j (|u_j - u(x_j, t_n)|)^2) h \Delta t}}{\|u\|}$,

avec h est le pas de discrétisation d'espace et u et u_h sont respectivement la solution exacte, et la solution approchée obtenue par la méthode des volumes finis .

Soit p l'ordre de convergence du schéma en espace, alors il existe une constante k tel que : $e_h \approx kh^p$. Pour estimer numériquement l'ordre de convergence, on raffine plusieurs fois un maillage initial par exemple d'un facteur 2. Pour deux maillages successifs de maille h et $h/2$, on a

$$e_{\frac{h}{2}} \approx k \left(\frac{h}{2} \right)^p \approx \frac{e_h}{2^p},$$

on obtient

$$p \approx \frac{\log(\frac{e_h}{e_{(\frac{h}{2})}})}{\log(2)}. \quad (2.21)$$

2.4.2 Simulations numériques

Dans cette section, on compare la solution approchée et la solution exacte.

On prend le coefficient $D = 1$, et le terme source :

$$f(x, t) = 0.$$

Avec ces hypothèses supplémentaires, la solution exacte du problème (2.2) est donnée par

$$u(x, t) = \exp(-\pi^2 \frac{t}{4}) \sin(\frac{\pi}{2}x) + \frac{1}{2} \exp(-4\pi^2 t) \sin(2\pi x). \quad (2.22)$$

On va comparer la solution exacte et la solution approchée, pour cela, on fait varier simultanément le pas de temps Δt et le pas d'espace h en gardant le quotient $\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ constant.

Conditions aux limites de Dirichlet

Nous considérons les conditions aux limites de Dirichlet, nous avons les résultats suivants

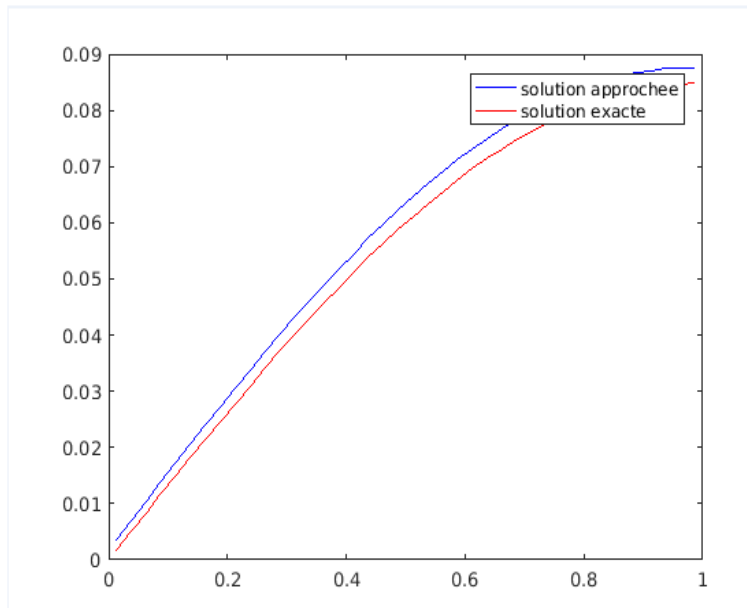


FIGURE 2.2 – Solution exacte et solution numérique avec $h = 0.025$ et $\Delta t = 0.0125$.

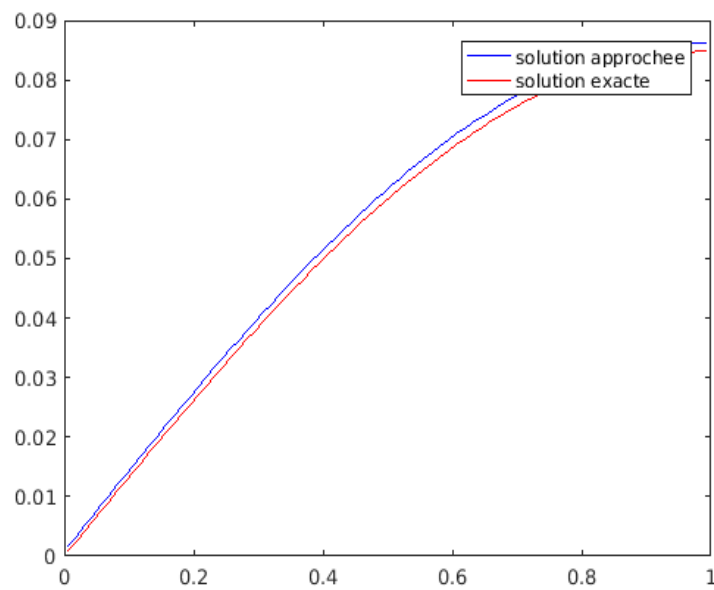


FIGURE 2.3 – Solution exacte et solution numérique avec $h = 0.0125$ et $\Delta t = 0.0063$.

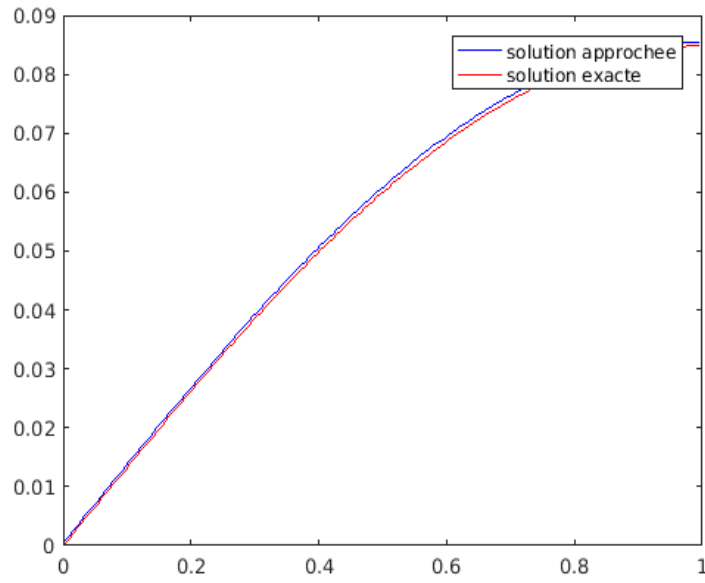


FIGURE 2.4 – Solution exacte et solution numérique avec $h = 0.0063$ et $\Delta t = 0.0031$.

Conditions aux limites de Robin

Nous considérons les conditions aux limites de Robin, et Nous choisissons $\alpha = 15$.

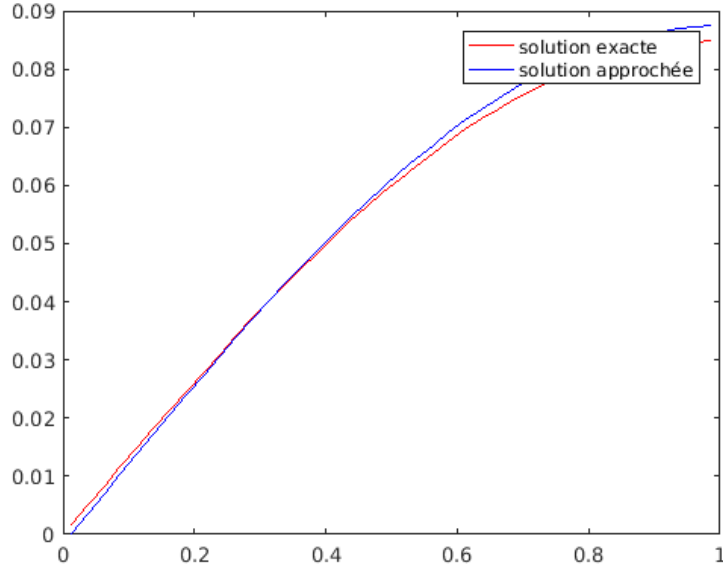


FIGURE 2.5 – Solution exacte et solution numérique avec $h = 0.025$ et $\Delta t = 0.0125$.

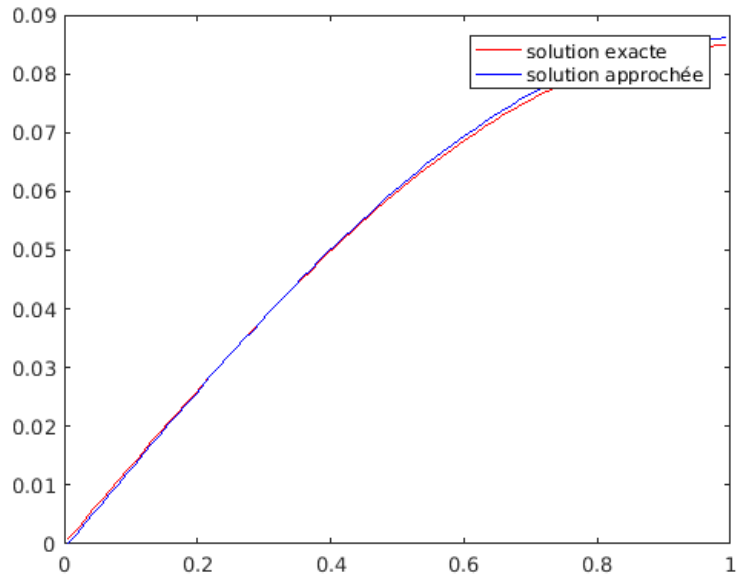


FIGURE 2.6 – Solution exacte et solution numérique avec $h = 0.0125$ et $\Delta t = 0.0063$.

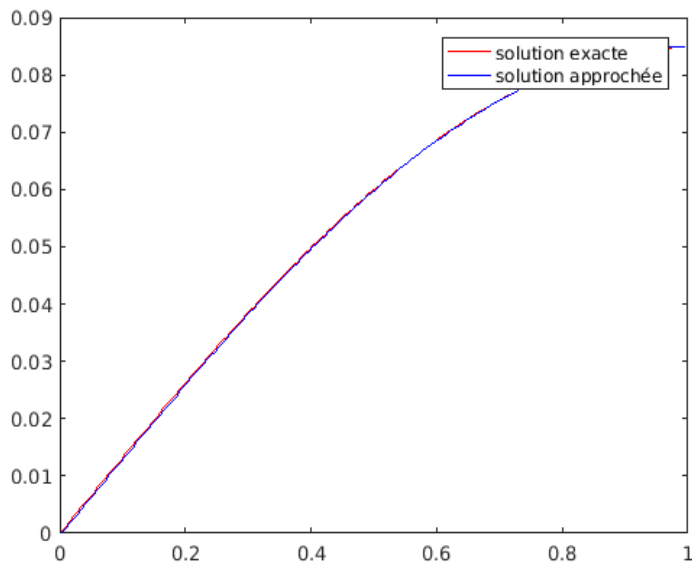


FIGURE 2.7 – Solution exacte et solution numérique avec $h = 0.0063$ et $\Delta t = 0.0031$.

Toutes ces figures montrent que lorsqu'on diminue le pas d'espace h et le pas de temps Δt , la solution numérique s'approche à la solution exacte. Et cela doit être confirmé par

une analyse quantitative de l'erreur. Soit $h = 0.025$ et $\Delta t = 0.012$,

pas de temps	pas d'espace	e_h	ordre de convergence
Δt	h	$2,47.10^{-2}$	
$\Delta t/4$	$h/2$	$1,43.10^{-2}$	0,78
$\Delta t/16$	$h/4$	$4,2.10^{-3}$	1,76
$\Delta t/64$	$h/8$	$1,6.10^{-3}$	1,39
$\Delta t/256$	$h/16$	$7,49.10^{-4}$	1,09

FIGURE 2.8 – Erreur et ordre de convergence pour les CL de Dirichlet.

pas de temps	pas d'espace	e_h	ordre de convergence
Δt	h	0.0156	...
$\Delta t/4$	$h/2$	$5,1.10^{-3}$	1,5
$\Delta t/16$	$h/4$	$2,3.10^{-3}$	1,14
$\Delta t/64$	$h/8$	$1,2.10^{-3}$	0,98
$\Delta t/256$	$h/16$	$3.03.10^{-4}$	1,60

FIGURE 2.9 – Erreur et ordre de convergence pour les CL de Robin.

Le tableau (2.4.2) (resp. (2.4.2)) montre que la norme l^2 tend vers 0 lorsque h et Δt tendent vers 0, et l'ordre de convergence, en espace estimé par la relation (2.21) est approximativement égale à 1.

2.4.3 Analyse de l'erreur et ordre de convergence

Dans cette section on va faire une analyse de l'erreur en partant d'une valeur initial $h(= 0.05)$ et un $\Delta t(= 10^{-3})$ fixé, puis on va calculer l'ordre de convergence numérique. Les tableaux ci-dessous représentent la norme l^2 de l'erreur en fonction du pas d'espace h ainsi que l'ordre de convergence .

<i>pas</i>	e_h	<i>ordre de convergence</i>
h	0,0212	
$h/2$	0,0108	0,973
$h/4$	0,0055	0,973
$h/8$	0,0028	0,974
$h/16$	0,0017	0,719

FIGURE 2.10 – Erreur et ordre de convergence pour un pas de temps fixé (Dirichlet).

<i>pas</i>	e_h	<i>ordre de convergence</i>
h	0,01	
$h/2$	$4,8 \cdot 10^{-3}$	1,05
$h/4$	$2,3 \cdot 10^{-3}$	1,06
$h/8$	$1,1 \cdot 10^{-3}$	1,06
$h/16$	$7,03 \cdot 10^{-4}$	0,64

FIGURE 2.11 – Erreur et ordre de convergence pour un pas de temps fixé (Robin).

Tant que l'erreur en temps est négligeable devant l'erreur en espace, on voit l'ordre 1. Quand l'erreur en espace devient trop petite, les deux s'additionnent, et on obtient un ordre de convergence inférieure à 1.

Conclusion : Le schéma volume finie pour un problème de diffusion avec des conditions aux limites de Dirichlet (resp. Robin) est d'ordre 1 en espace et en temps.

Chapitre 3

Méthodes de décomposition de domaine appliquées au problème de diffusion 1D en espace

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous étudions la formulation multidomaine pour le problème continu (2.2). Pour cela, nous nous plaçons dans le cadre simplifié de deux sous domaines pour plus de clarté, bien que tout puisse être étendu à un nombre quelconque de sous-domaines. Pour les problèmes de grande taille ou dans le cas de coefficients très hétérogènes, nous avons vu qu'il était souvent souhaitable de se placer dans le cadre de la décomposition de domaines. Dans ce travail, nous considérons une méthode décomposition de domaine globale en temps dont les interfaces entre les sous domaines sont des interfaces espace-temps.

On décompose le domaine de résolution en espace $[0, L]$ en deux sous-domaines, $[0, H[$ et $]H, L]$, séparés par l'interface réduite au point H .

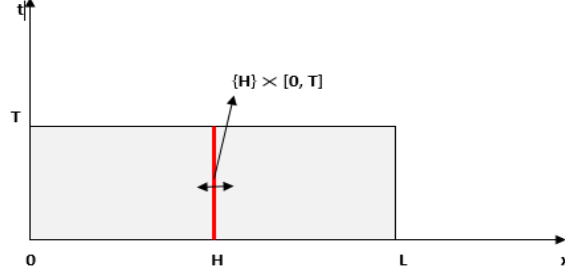


FIGURE 3.1 – Décomposition de domaine $[0, L]$ en deux sous domaines.

Le problème mondomaine doit être remplacé par un système équivalent de sous-problèmes définis sur les des sous-domaines et par des conditions d'interfaces naturelles (3.2), assurant la transmission des données entre les sous-domaines.

Donc, résoudre le problème multidomaine consiste à résoudre deux sous-problèmes locaux en espace et en temps, chacun est défini sur un sous domaine, puis à transférer la solution et le flux associé via les conditions de transmission définies sur l'interface espace-temps $\{H\} \times [0, T]$.

Nous supposons que $(D > 0)$ est constant sur chaque demi-droite $[0, H[$ et $]H, L]$, mais peut être discontinus en H :

$$D = \begin{cases} D_1 & x \in [0, H[, \\ D_2 & x \in]H, L]. \end{cases} \quad (3.1)$$

Sur l'interface espace-temps $\{H\} \times [0, T]$, cette double condition

$$u_1 = u_2 \quad \text{et} \quad \frac{\partial u_1}{\partial x} = \frac{\partial u_2}{\partial x}, \quad (3.2)$$

peut être réécrite [24], moyennant une combinaison linéaire, sous la forme équivalente

$$D_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} + \alpha_1 u_1 = D_2 \frac{\partial u_2}{\partial x} + \alpha_1 u_2, \quad \text{sur } \{H\} \times [0, T], \quad (3.3)$$

et

$$-D_2 \frac{\partial u_2}{\partial x} + \alpha_2 u_2 = -D_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} + \alpha_2 u_1, \quad \text{sur } \{H\} \times [0, T], \quad (3.4)$$

où α_1, α_2 des paramètres réels strictement positifs, en notant $f_1 = f|_{[0, H[}$ (resp. $f_2 = f|_{]H, L]}$) et ξ_2 (resp. ξ_1) le second membre de (3.3) (resp. (3.4)), le problème multidomaine au niveau

continu consiste donc à résoudre

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial u_1}{\partial t} - D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} = f_1, & \text{sur } [0, H[\times [0, T], \\ u_1(x, 0) = u_0, & \text{sur } [0, H[, \\ u_1(0, t) = g_{d1}(t), & \{0\} \times [0, T], \\ D_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} + \alpha_1 u_1 = \xi_2, & \text{sur } \{H\} \times [0, T], \end{array} \right. \quad (3.5)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial u_2}{\partial t} - D_2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} = f_2, & \text{sur } [H, L[\times [0, T], \\ u_2(x, 0) = u_0, & \text{sur } [H, L[, \\ u_2(L, t) = g_{d2}(t), & \{L\} \times [0, T], \\ -D_2 \frac{\partial u_2}{\partial x} + \alpha_2 u_2 = \xi_1, & \text{sur } \{H\} \times [0, T]. \end{array} \right. \quad (3.6)$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi_1 = -D_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} + \alpha_2 u_1, \\ \xi_2 = D_2 \frac{\partial u_2}{\partial x} + \alpha_1 u_2. \end{array} \right. \quad (3.7)$$

Bien que le problème multidomaine continu (3.5) - (3.6) soit équivalent au problème monodomaine (2.2), il faut noter que pour un schéma donné, la solution peut ne pas être identique si on ne prend garde à la discrétisation de la condition d'interface et des équations résolues sur les cellules liées à l'interface.

L'objet de ce chapitre est de définir, pour les problèmes (3.5) - (3.6), le schéma multidomaine correspondant au schéma monodomaine présenté dans le chapitre 2. Nous montrons d'une part que le schéma multidomaine admet une unique solution et d'autre part que cette solution coïncide avec la solution monodomaine.

3.2 Relaxation d'Ondes de Schwarz Optimisées(OSWR)

La méthode de décomposition de domaine utilisée dans le cadre de ce travail est la méthode itérative de Schwarz optimisée de type relaxation d'ondes (OSWR), dont l'efficacité repose sur l'optimisation du taux de convergence de l'algorithme. En effet, la vitesse de convergence de l'algorithme de Schwarz tient à la détermination judicieuse des conditions d'interface. Selon les informations échangées à l'interface, l'algorithme peut

même ne pas converger [20], comme c'est le cas de l'algorithme de Schwarz classique sans recouvrement, avec des conditions de Dirichlet à l'interface.

L'algorithme de Schwarz peut se décliner en deux versions : l'une séquentielle dite de type Gauss-Seidel, l'autre parallèle de type Jacobi. La première consiste à résoudre le problème local dans un sous-domaine en utilisant les informations transmises par le sous-domaine voisin à l'itération précédente et ainsi de suite, en passant d'un sous-domaine à l'autre. Dans la version parallèle, les sous-problèmes locaux sont résolus en même temps et utilisent les informations transmises par les sous-domaines voisins à l'itération précédente. Décrivons ici l'algorithme de Schwarz dans sa version parallèle (Jacobi) avec deux sous-domaines et pour des conditions de Robin.

L'algorithme itérative de (OSWR) appliqué au problème multidomaine est donné par : étant donné $u_1^{(0)}$ et $u_2^{(0)}$, à l'itération $k \geq 0$, on a

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial u_1^{(k+1)}}{\partial t} - D_1 \frac{\partial^2 u_1^{(k+1)}}{\partial^2 x} = f_1, & \text{dans } [0, H[\times [0, T], \\ u_1^{(k+1)}(x, 0) = u_0(x), & \text{sur } [0, H[, \\ u_1^{(k+1)}(0, t) = g_{d1}(t), & \forall t \in [0, T], \\ D_1 \frac{\partial u_1^{(k+1)}}{\partial x}(H) + \alpha_1 u_1^{(k+1)} = D_2 \frac{\partial u_2^{(k)}}{\partial x}(H) + \alpha_1 u_2^{(k)}, & \forall t \in [0, T], \end{array} \right. \quad (3.8)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial u_2^{(k+1)}}{\partial t} - D_2 \frac{\partial^2 u_2^{(k+1)}}{\partial^2 x} = f_2, & \text{dans }]H, L] \times [0, T], \\ u_2^{(k+1)}(x, 0) = u_0(x), & \text{sur }]H, L], \\ u_2^{(k+1)}(L, t) = g_{d2}(t), & \forall t \in [0, T], \\ -D_2 \frac{\partial u_2^{(k+1)}}{\partial x}(H) + \alpha_2 u_2^{(k+1)} = -D_1 \frac{\partial u_1^{(k)}}{\partial x}(H) + \alpha_2 u_1^{(k)}, & \forall t \in [0, T], \end{array} \right. \quad (3.9)$$

où les coefficients $\alpha_i, i = 1, 2$ sont calculés de manière à optimiser le taux de convergence de la méthode, $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}^+$.

La convergence de cet algorithme pour les problèmes de convection-diffusion à été étudiée dans [18].

Comme dans la description discrète du schéma monodomaine, nous présentons le schéma multidomaine avec un schéma d'Euler implicite en temps. Le domaine globale $[0, L]$ est discrétisé en N sous-intervalles de centre x_i et de pas d'espace h . On note

$\{H\} = \{x_{p+1/2}\}$, et $F_{1,p+1/2}^{n+1}$ (resp. $F_{2,p+1/2}^{n+1}$) le flux diffusif au point $x_{p+1/2}$ à l'instant t_{n+1} sur la maille de centre x_p (resp. x_{p+1}) à gauche (resp. à droite) de $(x_{p+1/2})$.

3.3 Le schéma multidomaine

En repartant du schéma monodomaine donné dans le chapitre 2, nous définissons sa formulation multidomaine qui consiste à définir la discrétisation de l'EDP et de la condition d'interface. Le schéma monodomaine peut être appliqué au moins sur toutes les cellules qui ne sont pas liées à l'interface. Il reste à définir la discrétisation de l'EDP sur les cellules liées à l'interface ainsi que celle des conditions d'interface, dans cette partie, nous nous référons à la thèse de Berthe [22].

Nous écrivons le schéma multidomaine discret obtenu après intégration de l'EDP sur la maille de centre x_p ,

$$\frac{h}{\Delta t}(u_p^{n+1} - u_p^n) + F_{1,p+1/2}^{n+1} - F_{1,p-1/2}^{n+1} = hf_{1,p}^{n+1}, \quad (3.10)$$

nous utilisons les approximations du flux

$$F_{1,p+1/2}^{n+1} = -2D_1 \frac{u_{1,p+1/2}^{n+1} - u_p^{n+1}}{h} \quad \text{et} \quad F_{1,p-1/2}^{n+1} = -D_1 \frac{u_p^{n+1} - u_{p-1}^{n+1}}{h}, \quad (3.11)$$

où $u_{1,p+1/2}^{n+1}$ est l'inconnue fictive approchant $u_1^{n+1}(x_{p+1/2})$, continue en $x_{p+1/2}$.

Nous remplaçons $F_{1,p-1/2}^{n+1}$ dans (3.10), nous obtenons

$$\frac{h}{\Delta t}(u_p^{n+1} - u_p^n) + F_{1,p+1/2}^{n+1} + D_1 \frac{u_p^{n+1} - u_{p-1}^{n+1}}{h} = hf_{1,p}^{n+1}, \quad (3.12)$$

en suite, nous discrétisons la condition d'interface

$$\frac{2D_1}{h}(u_{1,p+1/2}^{n+1} - u_p^{n+1}) + \alpha_1 u_{1,p+1/2}^{n+1} = \xi_{2,p+1/2}^{n+1}, \quad (3.13)$$

où $\xi_{2,p+1/2}^{n+1}$ est une approximation de ξ_2 sur $(x_{p+1/2})$ à l'instant t_{n+1} . Après simplifications, on trouve

$$u_{1,p+1/2}^{n+1} = \frac{2D_1 u_p^{n+1} + h\xi_{2,p+1/2}^{n+1}}{2D_1 + \alpha_1 h}, \quad (3.14)$$

on veut exprimer le flux au point $x_{p+1/2}$ en fonction de u_p^{n+1} et $\xi_{2,p+1/2}^{n+1}$, pour cela, nous considérons (3.13)

$$\begin{aligned} F_{1,p+1/2}^{n+1} &= \alpha_1 u_{1,p+1/2}^{n+1} - \xi_{2,p+1/2}^{n+1}, \\ &= \frac{\alpha_1}{2D_1 + \alpha_1 h} (2D_1 u_p^{n+1} + h \xi_{2,p+1/2}^{n+1}) - \xi_{2,p+1/2}^{n+1}, \\ &= \beta_1 (\alpha_1 u_p^{n+1} - \xi_{2,p+1/2}^{n+1}), \end{aligned} \quad (3.15)$$

où $\beta_1 = \frac{2D_1}{2D_1 + \alpha_1 h}$.

Remarque : Avec ce choix de β_1 , le schéma multidomaine coïncide avec le schéma monodomaine, mais si on approche le flux $F_{1,p+1/2}^{n+1}$ par $\alpha_1 u_p^{n+1} - \xi_{2,p+1/2}^{n+1}$ ie $\beta_1 = 1$, comme indiqué dans le chapitre 2, le schéma multidomaine itérative ne converge pas [22].

Nous avons donc, l'équation discrète est sous la forme suivante

$$\frac{h}{\Delta t} (u_p^{n+1} - u_p^n) + \beta_1 (\alpha_1 u_p^{n+1} - \xi_{2,p+1/2}^{n+1}) + \frac{D_1}{h} (u_p^{n+1} - u_{p-1}^{n+1}) = h f_{1,p}^{n+1}, \quad (3.16)$$

en regroupant les termes on obtient :

$$(h + (\beta_1 \alpha_1 + \frac{D_1}{h}) \Delta t) u_p^{n+1} - \Delta t \frac{D_1}{h} u_{p-1}^{n+1} = h f_{1,p}^{n+1} \Delta t + h u_p^n + \beta_1 \xi_{2,p+1/2}^{n+1} \Delta t. \quad (3.17)$$

En reprenant les notations du chapitre 2, nous avons

$$A_{pp} = h + (\frac{D_1}{h} + \beta_1 \alpha_1) \Delta t = h + a_{d_1} + \alpha_1 \beta_1 \Delta t, \quad (3.18)$$

et

$$b_p = h f_{1,p}^{n+1} \Delta t + h u_p^n + \beta_1 \xi_{2,p+1/2}^{n+1} \Delta t. \quad (3.19)$$

D'une manière analogue, pour le sous domaine 2, nous écrivons le schéma multidomaine sur la maille de centre x_{p+1} , située à droite de l'interface $x_{p+1/2}$, comme

$$\frac{h}{\Delta t} (u_{p+1}^{n+1} - u_{p+1}^n) - \frac{D_2}{h} (u_{p+2}^{n+1} - u_{p+1}^{n+1}) - F_{2,p+1/2}^{n+1} = h f_{2,p+1}^{n+1}, \quad (3.20)$$

où

$$F_{2,p+1/2}^{n+1} = -\frac{2D_2}{h} (u_{p+1}^{n+1} - u_{2,p+1/2}^{n+1}). \quad (3.21)$$

La condition de transmission discrétise le flux au point $x_{p+1/2}$ de la même manière que dans le schéma (3.13)

$$-\frac{2D_2}{h} (u_{p+1}^{n+1} - u_{2,p+1/2}^{n+1}) + \alpha_2 u_{2,p+1/2}^{n+1} = \xi_{1,p+1/2}^{n+1}, \quad (3.22)$$

ce qui donne

$$u_{2,p+1/2}^{n+1} = \frac{2D_2 u_{p+1}^{n+1} + h\xi_{1,p+1/2}^{n+1}}{2D_2 + \alpha_2 h}, \quad (3.23)$$

et

$$F_{2,p+1/2}^{n+1} = -\beta_2(\alpha_2 u_{p+1}^{n+1} - \xi_{1,p+1/2}^{n+1}), \quad (3.24)$$

par conséquence, l'équation discrète s'écrit

$$\frac{h}{\Delta t}(u_{p+1}^{n+1} - u_{p+1}^n) - \frac{D_2}{h}(u_{p+2}^{n+1} - u_{p+1}^{n+1}) + \beta_2(\alpha_2 u_{p+1}^{n+1} - \xi_{1,p+1/2}^{n+1}) = hf_{2,p+1}^{n+1},$$

d'où

$$(h + (\beta_2 \alpha_2 + \frac{D_2}{h})\Delta t)u_{p+1}^{n+1} - \Delta t \frac{D_2}{h}u_{p+2}^{n+1} = hf_{2,p+1}^{n+1}\Delta t + hu_p^n + \beta_2 \xi_{1,p+1/2}^{n+1}\Delta t. \quad (3.25)$$

par suite,

$$A_{p+1p+1} = h + (\beta_2 \alpha_2 + \frac{D_2}{h})\Delta t = h + (\beta_2 \alpha_2 \Delta t + a_{d_2})$$

et

$$b_{p+1} = hf_{2,p+1}^{n+1}\Delta t + hu_p^n + \beta_2 \xi_{1,p+1/2}^{n+1}\Delta t.$$

Puisque les lignes de la matrice correspondant aux mailles intérieures et aux mailles qui ne sont pas liées à l'interface ont été analysées dans le chapitre précédent, il reste seulement à considérer les lignes correspondant aux conditions d'interface et de vérifier que A_{pp} (resp. A_{p+1p+1}) est supérieur strictement à A_{pp-1} (resp. A_{p+1p+2}), soit les lignes p et $p+1$. on a

$$A_{pp} = h + a_{d_1} + \alpha_1 \beta_1 \Delta t, \quad \text{et} \quad A_{pp-1} = -a_{d_1}, \quad (3.26)$$

et de même

$$A_{p+1p+1} = h + a_{d_2} + \alpha_2 \beta_2 \Delta t, \quad \text{et} \quad A_{p+1p+2} = -a_{d_2}, \quad (3.27)$$

il est clair que

$$A_{pp} > |A_{pp-1}| \quad \text{et} \quad A_{p+1p+1} > |A_{p+1p+2}|,$$

d'où l'existence et l'unicité de la solution du schéma discret multidomaine puisque la matrice est à diagonale strictement dominante.

3.4 L'équivalence entre la solution multidomaine et monodomaine

Ayant défini le schéma monodomaine dans le chapitre 2 et le schéma multidomaine dans ce qui précède (chapitre 3), et montré l'existence et l'unicité d'une solution monodomaine et multidomaine, il reste à montrer que la solution multidomaine coïncide avec la solution monodomaine. autrement dit, nous montrons l'équivalence entre

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{h}{\Delta t}(u_p^{n+1} - u_p^n) + \beta_1(\alpha_1 u_p^{n+1} - \xi_{2,p+1/2}^{n+1}) + \frac{D_1}{h}(u_p^{n+1} - u_{p-1}^{n+1}) = hf_{1,p}^{n+1}, \\ \frac{2D_1}{h}(u_{p+1/2}^{n+1} - u_p^{n+1}) + \alpha_1 u_{p+1/2}^{n+1} = \xi_{2,p+1/2}^{n+1}, \\ \frac{h}{\Delta t}(u_{p+1}^{n+1} - u_{p+1}^n) - \frac{D_2}{h}(u_{p+2}^{n+1} - u_{p+1}^{n+1}) + \beta_2(\alpha_2 u_{p+1}^{n+1} - \xi_{1,p+1/2}^{n+1}) = hf_{2,p+1}^{n+1}, \\ -\frac{2D_2}{h}(u_{p+1}^{n+1} - u_{p+1/2}^{n+1}) + \alpha_2 u_{p+1/2}^{n+1} = \xi_{1,p+1/2}^{n+1}, \end{array} \right. \quad (3.28)$$

et

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{h}{\Delta t}(u_p^{n+1} - u_p^n) - \frac{D_1}{h}(u_{p+1}^{n+1} - u_p^{n+1}) + \frac{D_1}{h}(u_p^{n+1} - u_{p-1}^{n+1}) = hf_{1,p}^{n+1}, \\ \frac{h}{\Delta t}(u_{p+1}^{n+1} - u_{p+1}^n) - \frac{D_2}{h}(u_{p+2}^{n+1} - u_{p+1}^{n+1}) + \frac{D_2}{h}(u_{p+1}^{n+1} - u_p^{n+1}) = hf_{2,p+1}^{n+1}, \end{array} \right. \quad (3.29)$$

avec

$$\begin{aligned} \xi_{2,p+1/2}^{n+1} &= -F_{2,p+1/2}^{n+1} + \alpha_1 u_{2,p+1/2}^{n+1}, \\ \xi_{1,p+1/2}^{n+1} &= F_{1,p+1/2}^{n+1} + \alpha_2 u_{1,p+1/2}^{n+1}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Nous considérons (3.30)₁ et (3.23)

$$\xi_{2,p+1/2}^{n+1} = \beta_2(\alpha_2 u_{p+1}^{n+1} - \xi_{1,p+1/2}^{n+1}) + \alpha_1 \frac{2D_2 u_{p+1}^{n+1} + h \xi_{1,p+1/2}^{n+1}}{2D_2 + \alpha_2 h},$$

après calcul,

$$\xi_{2,p+1/2}^{n+1} = \frac{1}{2D_2 + \alpha_2 h} \left((\alpha_1 h - 2D_2) \xi_{1,p+1/2}^{n+1} + 2D_2(\alpha_1 + \alpha_2) u_{p+1}^{n+1} \right), \quad (3.31)$$

d'une manière analogue, on trouve

$$\xi_{1,p+1/2}^{n+1} = \frac{1}{2D_1 + \alpha_1 h} \left((\alpha_2 h - 2D_1) \xi_{2,p+1/2}^{n+1} + 2D_1(\alpha_2 + \alpha_1) u_p^{n+1} \right). \quad (3.32)$$

Nous avons donc, un système de deux inconnus à résoudre

$$\begin{aligned} (2D_2 + \alpha_2 h) \xi_{2,p+1/2}^{n+1} &= (\alpha_1 h - 2D_2) \xi_{1,p+1/2}^{n+1} + 2D_2(\alpha_1 + \alpha_2) u_{p+1}^{n+1}, \\ (2D_1 + \alpha_1 h) \xi_{1,p+1/2}^{n+1} &= (\alpha_2 h - 2D_1) \xi_{2,p+1/2}^{n+1} + 2D_1(\alpha_1 + \alpha_2) u_p^{n+1}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Nous résolvons le système , et nous obtenons

$$\begin{cases} \xi_{2,p+1/2}^{n+1} = \frac{\alpha_1}{2}(u_p^{n+1} + u_{p+1}^{n+1}) - \frac{D_1}{h}(u_p^{n+1} - u_{p+1}^{n+1}), \\ \xi_{1,p+1/2}^{n+1} = \frac{\alpha_2}{2}(u_p^{n+1} + u_{p+1}^{n+1}) + \frac{D_2}{h}(u_p^{n+1} - u_{p+1}^{n+1}), \end{cases} \quad (3.34)$$

nous remplaçons ces quantités dans (3.28)₁, (3.28)₃, nous retrouvons le schéma (3.29), d'où l'équivalence [22].

3.4.1 Problème d'interface

Nous montrons comment reformuler le problème (3.8)-(3.9), comme un problème d'interface, et nous définissons les variables d'interface au point H par

$$\begin{aligned} \xi_2(t) &= D_2 \frac{\partial u_2}{\partial x}(H, t) + \alpha_1 u_2(H, t), \quad \forall t \in [0, T], \\ \xi_1(t) &= -D_1 \frac{\partial u_1}{\partial x}(H, t) + \alpha_2 u_1(H, t), \quad \forall t \in [0, T], \end{aligned} \quad (3.35)$$

et les opérateurs $S_i, i = 1, 2$ par :

$$S_1 : (\xi_2, f_1, u_0) \mapsto -D_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} + \alpha_2 u_1 \big|_{x=H}, \quad (3.36)$$

$$S_2 : (\xi_1, f_2, u_0) \mapsto D_2 \frac{\partial u_2}{\partial x} + \alpha_1 u_2 \big|_{x=H}, \quad (3.37)$$

où u_1, u_2 sont respectivement solution du problème

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t} - D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} = f_1, & \text{dans } [0, H[\times [0, T], \\ u_1(x, 0) = u_0(x), & \text{sur } [0, H[, \\ u_1(0, t) = g_{d1}(t), & t \in [0, T], \\ D_1 \frac{\partial u_1}{\partial x}(H) + \alpha_1 u_1(H) = \xi_2, & \forall t \in [0, T], \end{cases} \quad (3.38)$$

et

$$\begin{cases} \frac{\partial u_2}{\partial t} - D_2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} = f_2, & \text{dans }]H, L] \times [0, T], \\ u_2(x, 0) = u_0(x), & \text{sur }]H, L], \\ u_2(0, t) = g_{d2}(t), & t \in [0, T], \\ -D_2 \frac{\partial u_2}{\partial x}(H) + \alpha_2 u_2(H) = \xi_1, & \forall t \in [0, T]. \end{cases} \quad (3.39)$$

On pose $g_i = (f_i, u_0), i = 1, 2$.

A l'itération k , on a

$$\begin{aligned}\xi_2^{(k)} &= D_2 \frac{\partial u_2^{(k)}}{\partial x} + \alpha_1 u_2^{(k)}, \quad \forall t \in [0, T], \\ \xi_1^{(k)} &= -D_1 \frac{\partial u_1^{(k)}}{\partial x} + \alpha_2 u_1(k), \quad \forall t \in [0, T],\end{aligned}\tag{3.40}$$

donc,

$$\begin{aligned}S_1(\xi_2^{(k)}, g_1) &= \xi_1^{(k+1)}, \\ S_2(\xi_1^{(k)}, g_2) &= \xi_2^{(k+1)},\end{aligned}\tag{3.41}$$

les opérateurs $S_i, i = 1, 2$ sont bilinéaires, donc, nous avons l'algorithme itérative suivant donner $\xi_1^{(0)}, \xi_2^{(0)}$, et résoudre

$$\begin{aligned}\xi_1^{(k+1)} &= S_1(\xi_2^{(k)}, 0) + S_1(0, g_1), \\ \xi_2^{(k+1)} &= S_2(\xi_1^{(k)}, 0) + S_2(0, g_2).\end{aligned}\tag{3.42}$$

$\forall k \geq 1$.

On interprète ce nouvel algorithme comme un algorithme du point fixe, ce qui nous amène à résoudre :

$$\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & S_1(., 0) \\ S_2(., 0) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} S_1(0, g_1) \\ S_2(0, g_2) \end{pmatrix}.\tag{3.43}$$

Le problème (3.43) est un système d'équation linéaire, qui peut être résolu par différents méthodes par exemple : Jacobi, GMRES (matrice non symétrique), Gradient-Conjugué...

Conclusion

Ce travail a été motivé par la résolution du problème de diffusion en régime instationnaire dans un milieu poreux dans le but d'étudier la dégradation de l'écosystème causé en parti par le dégagement d'hydrogène gazeux lors du stockage des déchets radioactifs. Dans la première partie, nous avons présenté notre modèle, la notion de pression capillaire et les différentes propriétés qui en découlent. Ensuite nous avons étudié le problème de diffusion linéaire sur un domaine globale, avant de présenter des résultats montrant la convergence du schéma discrétisé.

Ainsi, nous avons défini un schéma multidomaine dont nous avons présenté le caractère bien posé puis son équivalence avec un schéma monodomaine. Enfin nous avons présenté une méthode itérative de Schwarz optimisée de type relaxation d'ondes pour la résolution du problème multidomaine. Il n'a malheureusement pas été possible compte tenu du temps imparti d'obtenir des résultats numériques confirmant la convergence de l'algorithme(OSWR). Dans le temps restant nous nous focaliserons dans un premier temps sur la convergence de cet algorithme et ensuite nous généraliserons notre étude à un problème de diffusion non linéaire. Il faudra tenir compte des conditions de transmission non linéaire, puis résoudre le problème d'interface par une méthode de type point fixe et par une méthode de Newton-Krylov (ou accélération d'Anderson).

Annexe

Fonction pour la construction de la matrice

```
function[L]=construction-matrix(dt,h,nx,rbc,lbc,alpha,beta)
r1=zeros(nx,1);
r2=zeros(nx,1);
v=zeros(nx,1);
L=zeros(nx,nx);
r1(1:nx)=-1/h;
r2(1:nx)=-1/h;
v(1:nx)=2/h+h/dt;
L= spdiags ([r1 v r2],-1:1,nx,nx);
if (rbc.type=='Robin')
L(nx,nx)=L(nx,nx)-1/h+alpha beta;
end
if(lbc.type=='Robin')
L(1,1)=L(1,1)-1/h+alpha beta;
end
end
```

Fonction pour la construction du second membre

```
function b=second-membre(dt,t,h,u,nx,lbc,rbc,beta)
b=h/dt u ;
if(rbc.type=='Robin')
b(nx)=b(nx)+rbc.g(t) beta ;
else
b(nx)=b(nx)+1/h rbc.g(t) ;
end
```

Function résolution locale

```
function [u]=solv-local(nx,a,b,nt,lbc,rbc,u0,alpha,dt,choix)
h=(b-a)/nx ;
if choix==1
beta=1 ;
else
beta=2/(alpha h+2) ;
end
K=construction-matrix(dt,h,nx,rbc,lbc,alpha,beta) ;
[L,U]=lu(K) ;
u(:,1)=u0 ;
u_pre=u(:,1) ;
for i=1 :nt
bb=second-membre(dt,i,h,u_pre,nx,lbc,rbc,beta) ;
u(:,i+1)=U\ (L\ b) ;
u_pre = u(:, i + 1) ;
end
end
```

Fonction monodomaine

```
function u=monodomaine()
lbctype=0;
plotit=0;
clc
T=1;
nt=400;
nx=100;
a=0;b=1;
choix=0;
alpha=15;
dt=T/nt;
if lbctype==1
lbc.type='Direc';
rbc.type='Direc';
lbc.g=zeros(1,nt+1);
t=dt(0 :nt);
rbc.g=exp(-pi^2t./4);
else lbc.type='Robin';
rbc.type='Robin';
t=dt(0 :nt);
lbc.g=-pi/2 exp(-pi^2t/4) - pi exp(-4pi^2t);
rbc.g=pi exp(-4pi^2t) + alpha exp(-pi^2t/4);
end h=(b-a)/nx;
y=h(1/2 :nx);
u0=sin(pi/2 y)+1/2 sin(2 pi y);
uex=zeros(nx,nt+1);
```

```

uex( :,1)=u0;
for i=1 :nt
uex( :,i+1)=exact(y,idt);
end
u=solv-local(nx,a,b,nt,lbc,rbc,u0,alpha,dt,choix);
if plotit==1
for i=1 :nt+1
plot(y,uex( :,i),'r',y,u( :,i),'b');
pause(0.1)
end
end
E=norm(u( :)-uex( :))sqrt(h dt);
end

```

Fonction de la solution exacte

```

function u=exact(x,t)

$$u = \exp(-pi^2 t/4) \sin(pi/2x) + 1/2 \exp(-4pi^2 t) \sin(2pi x);$$

end

```

Bibliographie

- [1] [http : http : www.andra.fr](http://www.andra.fr).
- [2] [http : www.maisondelasimulation.fr](http://www.maisondelasimulation.fr).
- [3] ANDRA. Dossier argile 2005, architecture et gestion du stockage géologique collection des rapports. *Journal de l'Andra, Edition Meuse/Haute-Marne*, pages 1–15, 2005.
- [4] Y. Bachmat and J. Bear. The general equations of hydrodynamic dispersion in homogeneous, isotropic, porous mediums. *J. Geophys. Res.*, 69 :2561–2567, 1964.
- [5] Haï m Brezis. *Analyse fonctionnelle*. Collection Mathématiques Appliquées pour la Maîtrise. [Collection of Applied Mathematics for the Master's Degree]. Masson, Paris, 1983. Théorie et applications. [Theory and applications].
- [6] Clément Cancès. Nonlinear parabolic equations with spatial discontinuities. *NoDEA Nonlinear Differential Equations Appl.*, 15(4-5) :427–456, 2008.
- [7] Guy Chavent, Jérôme Jaffré, and Sophie Jan-Jégou. Estimation of relative permeabilities in three-phase flow in porous media. *Inverse Problems*, 15(1) :33–39, 1999. Conference on Inverse Problems, Control and Shape Optimization (Carthage, 1998).
- [8] Benito M. Chen-Charpentier. Multiphase flow in porous media. *Bol. Soc. Esp. Mat. Apl. SeMA*, (38) :93–113, 2007.
- [9] Robert Dautray and Jacques-Louis Lions. *Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques. Vol. 9*. INSTN : Collection Enseignement.

- [INSTN : Teaching Collection]. Masson, Paris, 1988. Évolution : numérique, transport. [Evolution : numerical methods, transport], Reprint of the 1985 edition.
- [10] Victorita Dolean, Pierre Jolivet, and Frédéric Nataf. *An introduction to domain decomposition methods*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 2015. Algorithms, theory, and parallel implementation.
 - [11] C. J. van Duijn, H. Eichel, R. Helmig, and I. S. Pop. Effective two-phase flow models including trapping effects at the micro scale. In *Progress in industrial mathematics at ECMI 2006*, volume 12 of *Math. Ind.*, pages 333–339. Springer, Berlin, 2008.
 - [12] C. Japhet E. Ahmed and M. Kern. A finite volume schwarz algorithm for two-phase immiscible flow with different rock types. in preparation.
 - [13] C. Japhet M. Kern E. Ahmed, S. Ali-Hassan and M. Vohralik. A posteriori error estimates and stopping criteria for space-time domain decomposition for two-phase flow between different rock types. hal,01529532.
 - [14] Guillaume Enchéry, R. Eymard, and A. Michel. Numerical approximation of a two-phase flow problem in a porous medium with discontinuous capillary forces. *SIAM J. Numer. Anal.*, 43(6) :2402–2422, 2006.
 - [15] Robert Eymard, Thierry Gallouët, and Raphaële Herbin. Finite volume methods. In *Handbook of numerical analysis, Vol. VII*, Handb. Numer. Anal., VII, pages 713–1020. North-Holland, Amsterdam, 2000.
 - [16] Robert Eymard, Raphaële Herbin, Jean-Claude Latché, and Bruno Piar. Convergence analysis of a locally stabilized collocated finite volume scheme for incompressible flows. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 43(5) :889–927, 2009.
 - [17] Thi-Thao-Phuong Hoang, Jérôme Jaffré, Caroline Japhet, Michel Kern, and Jean E. Roberts. Space-time domain decomposition methods for diffusion problems in mixed formulations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 51(6) :3532–3559, 2013.
 - [18] Thi-Thao-Phuong Hoang, Caroline Japhet, Michel Kern, and Jean E. Roberts. Space-time domain decomposition for advection–diffusion problems in mixed formulations. *Math. Comput. Simulation*, 137 :366–389, 2017.

- [19] Feike J. Leij and Martinus Th. Van Genuchten. Analytical modeling of nonaqueous phase liquid dissolution with Green's functions. *Transp. Porous Media*, 38(1-2) :141–166, 2000.
- [20] P.-L. Lions. On the Schwarz alternating method. III. A variant for nonoverlapping subdomains. In *Third International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations (Houston, TX, 1989)*, pages 202–223. SIAM, Philadelphia, PA, 1990.
- [21] Chavant R.Eymard O.Angelini, s.Granet. Etude de schémas numériques pour les écoulements diphasiques en milieu poreux déformable pour des maillages quelconques : application au stockage de déchets radioactifs. 15(1) :25–29, 2010. Mathématiques générales [math.GM]. Université Paris-Est.
- [22] P. Omnes P-M. Berthe, C.Japhet. Méthode de décomposition de domaine de type relaxation d'ondes optimisée pour l'équation de convection-diffusion instationnaire discrétisée par volumes finis. 183 :31–50, 2013.
- [23] D. Pont. Lien entre la perméabilité et l'endommagement dans les bétons à haute température.thèse de doctorat, ecole nationale des ponts et chaussées. Paris.2004.
- [24] Alfio Quarteroni and Alberto Valli. *Domain decomposition methods for partial differential equations*. Numerical Mathematics and Scientific Computation. The Clarendon Press, Oxford University Press, New York, 1999. Oxford Science Publications.
- [25] O. F. Smidts. Point and surface estimations by a non-analog Monte Carlo simulation for the transport of radionuclide chains in porous media. *Monte Carlo Methods Appl.*, 4(4) :289–318, 1998.
- [26] C. J. van Duijn, X. Cao, and I. S. Pop. Two-phase flow in porous media : dynamic capillarity and heterogeneous media. *Transp. Porous Media*, 114(2) :283–308, 2016.