



Contribution à l'étude des écoulements polyphasiques

**Analyse des différents schémas numériques
rencontrés dans la littérature pour la simulation
des écoulements diphasiques eau-huile et eau-gaz**

**mars 1996
R 38808**



Contribution à l'étude des écoulements polyphasiques

**Analyse des différents schémas numériques
rencontrés dans la littérature pour la simulation
des écoulements diphasiques eau-huile et eau-gaz**

M.L. Noyer

**mars 1996
R 38808**

**BRGM
DIRECTION DE LA RECHERCHE
Département Hydrologie, Géochimie et Transferts
BP 6009 - 45060 ORLEANS Cedex 02 - France - Tél.: (33) 38 64 34 34**

Mots clés : Ecoulements polyphasiques, Techniques numériques, Algorithmes de pondérations et linéarisation, Application eau-huile et eau-gaz.

En bibliographie, ce rapport sera cité de la façon suivante :

NOYER M.L (1996) - Contribution à l'étude des écoulements polyphasiques. Analyse des différents schémas numériques rencontrés dans la littérature pour la simulation des écoulements diphasiques eau-huile et eau-gaz. Rap. BRGM R 38808, 100 p., 24 fig., 2 ann.

© BRGM, 1996 : ce document ne peut être reproduit en totalité ou en partie sans l'autorisation expresse du BRGM.

RESUME

On trouvera dans ce rapport une analyse des différents schémas numériques, rencontrés dans la littérature, pour la simulation des écoulements diphasiques eau-huile et eau-gaz.

Une attention particulière a été portée aux méthodes de résolution citées par les pétroliers (SS, IMPES, SEQ, AIM), aux différentes pondérations spatiales et temporelles pour l'utilisation de maillages en différences finies, et aux techniques de linéarisation (en particulier les différentes variantes et/ou simplifications du schéma de Newton-Raphson).

On a essayé autant que possible d'évaluer les performances des algorithmes du point de vue des applications présentées.

Bien que l'on se soit focalisé sur les écoulements diphasiques sans échange de masse entre les phases, le problème est trop complexe pour que l'on puisse prétendre à l'exhaustivité.

Cette étude a été réalisée dans le cadre du projet S11 (1995) de la Direction de la Recherche.

ABREVIATIONS

B.L.	problème classique de BUCKLEY-LEVERETT
CI	conditions initiales
CL	conditions aux limites
DF	différences finies
EF	éléments finis
NAPL	non aqueous phase liquid
DNAPL	dense NAPL (plus dense que l'eau)
LNAPL	light NAPL (moins dense que l'eau)
N. R.	Newton-Raphson
ZNS	zone non saturée
1D	monodimensionnel
2D	bidimensionnel
3D	tridimensionnel
IMPES	(method) implicit pressure - explicit saturation
SS	(method) simultaneous solution
SEQ	(method) sequential solution
AIM	adaptive implicit method
VE	vertical equilibrium

$$\left. \begin{aligned}
 H_i &= \frac{P_i}{\rho_i g} + Z && \text{charge} \\
 HH_i &= \frac{P_i}{\rho_w g} + \frac{\rho_i}{\rho_w} Z && \text{potentiel}
 \end{aligned} \right\} \text{pour le fluide } i$$

$$h_i = \frac{P_i}{\rho_w g} \quad \text{pression en hauteur d'eau équivalente pour le fluide } i$$

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION.....	9
Rappel sur les écoulements polyphasiques en milieu poreux	9
Quelques définitions.....	11
Validité des lois de comportement.....	12
 1. REVUE SYNTHETIQUE DES EXEMPLES D'ECOULEMENT DIPHASIQUES RENCONTRES DANS LA LITTERATURE.....	 15
1.1. Ecoulements diphasiques eau-huile	15
1.1.1. Huyakorn et Pinder (1978)	15
1.1.2. Faust (1985)	16
1.1.3. Faust et al. (1989)	17
1.1.4. Kuppusamy et al. (1987)	18
1.1.5. Forsyth (1988).....	18
1.1.6. Kaluarachchi et Parker (1989)	20
1.1.7. Kueper et Frind (1991a)	21
1.1.8. Abriola et Rathfelder (1993)	22
1.2. Ecoulements diphasiques eau-gaz.....	23
1.2.1. Morel-Seytoux et Billica (1985a et b)	23
1.2.2. Sleep et Sykes (1989)	26
1.2.3. Mordidis et Reddel (1991a, b et c).....	27
1.2.4. Celia et Binning (1992)	28
1.2.5. Forsyth et al. (1995).....	30
 2. Schemas de resolution en diphasique	 31
2.1. Diphasique eau-huile.....	31
2.1.1. Faust (1985)	31
2.1.2. Faust et al. (1989)	34
2.1.3. Forsyth (1988).....	34
2.1.4. Kaluarachchi et Parker (1989)	35
2.1.5. Kueper et Frind (1991)	37
2.1.6. Abriola et Rathfelder (1993)	40
2.2. Diphasique eau-gaz	40
2.2.1. Morel-Seytoux et Billica (1985a et b)	40
2.2.2. Sleep et Sykes (1989).....	43
2.2.3. Mordidis et Reddell (1991)	47

3. METHODES DE RESOLUTION	55
3.1. Méthode "simultaneous solution (SS)"	55
3.2. Méthode "implicit pressure-explicit saturation (IMPES)"	58
3.3. Analyse des méthodes SS et IMPES	59
3.3.1. <i>Stabilité</i>	59
3.3.2. <i>Traitement des non-linéarités</i>	60
3.4. Méthode "sequential solution (SEQ)"	69
3.5. Méthode "adaptive implicit (AIM)"	71
4. PONDERATIONS SPATIALES	73
4.1. Schémas "Upstream weighting"	73
4.2. Schémas "Upstream" à 2 points	75
4.2.1. <i>Caractéristiques</i>	75
4.2.2. <i>Restrictions et contraintes</i>	75
4.2.3. <i>Avantages du schéma à 2 points</i>	77
5. METHODES DE LINEARISATION-ALTERNATIVES A NEWTON-RAPHSON	81
5.1. Schéma de Newton-Raphson	81
5.2. Schéma "Chord slope"	82
5.3. Variations sur Newton-Raphson et Picard	82
5.4. Méthodes "quasi-Newton"	84
5.5. Schéma de TOUGH	85
CONCLUSION	87
REFERENCES	89
ANNEXES	95

LISTE DES FIGURES

- Fig. 1 - Cross-section schematic of a petroleum spill.
- Fig. 2 - Water content profiles in a soil column with an impervious boundary 10 cm below soil surface (two-phase approach).
- Fig. 3 - Water content profiles in a soil column with an impervious boundary 10 cm below soil surface (one-phase approach).
- Fig. 4 - Finite difference grid and associated incidence matrix for example nine-node grid. Nonwetting fluid is moving vertically downward and presently occupying the top row of nodes only.
- Fig. 5 - Convergence of midpoint weighting-almost hyperbolic problem. Test problem N° 1, $t = 1500$ days.
- Fig. 6 - Solution with midpoint weighting for different P_c . Test problem N° 1, $\Delta x = L/40$, $\Delta t = 10$ days, $t = 1500$ days.
- Fig. 7 - Comparison of upstream weighting formulae. Test problem N° 1, $\Delta x = L/40$, $\Delta t = 10$ days, $t = 1500$ days (after Settari and Aziz, 1975).
- Fig. 8 - Stability of the SS Method with explicit transmissibilities for Test problem N° 1 at $t = 1500$ days (from Settari and Aziz, 1975).
- Fig. 9 - Stability of the SS linearised implicit method for Test problem N° 1 at $t = 1500$ days (from Settari and Aziz, 1975).
- Fig. 10 - Stability of the SS semi-implicit tangent method for Test problem N° 1 at $t = 1500$ days (from Settari and Aziz, 1975).
- Fig. 11 - Stability of the SS semi-implicit secant ($\delta S_w = 0.5$) method for Test problem N° 1 at $t = 1500$ days (from Settari and Aziz, 1975).
- Fig. 12 - Stability of the implicit method. Test problem N° 1 at $t = 1500$ days (from Settari and Aziz, 1975).
- Fig. 13 - Stability of SEQ method with linearised tangent slope transmissibilities, Test problem N° 1.
- Fig. 14 - Stability of SEQ method with linearised chord slope transmissibilities, $\delta S_w = 0.32$, Test problem N° 1.
- Fig. 15 - Pressure drop across a one-dimensional system for a unit mobility ratio, miscible displacement.
- Fig. 16 - Oil relative permeability for a one-dimensional miscible displacement.
- Fig. 17 - Relative permeability and fractional flow curves for the Buckley-Leverett problem.
- Fig. 18 - Effect of mobility weighting schemes on the computed saturation profile for the Buckley-Leverett problem (0.32 PV of water injected).
- Fig. 19 - Grid orientations for simulation of displacement in five-spot symmetry elements.

Fig. 20 - Recovery performance for a unit mobility ratio displacement in a confined five-spot pattern.

Fig. 21 - Recovery performance for an unfavorable ($M = 3.0$) displacement in a confined five-spot pattern.

Fig. 22 - Recovery performance for an unfavorable ($M = 3.0$) displacement in a confined five-spot pattern.

Fig. 23 - Changes that take place in the production from a three-phase hydrocarbon system (V denotes volume).

Fig. 24 - Water and total liquid saturation distributions for a vertical equilibrium system.

INTRODUCTION

Rappel sur les écoulements polyphasiques en milieu poreux

Allen (1985) rappelle que, historiquement, les premières notions d'écoulement polyphasique en milieu poreux ont été introduites par l'étude de la zone non saturée où coexistent deux fluides : l'eau et l'air.

Les écoulements dans cette zone apparaissent donc comme les plus simples des phénomènes polyphasiques. Cependant, au cours des années 1945 à 1985, le plus grand effort de recherche a porté sur les gisements de pétrole qui constituent des milieux où, en sus des hydrocarbures, de l'eau est presque toujours présente ainsi que, assez souvent, du gaz naturel.

Plus récemment, les écoulements polyphasiques ont à nouveau suscité l'intérêt des hydrogéologues, préoccupés par la qualité de l'eau souterraine menacée par des infiltrations de polluants non aqueux provenant de sources diverses (sites industriels, décharges, fuites provenant d'usines ou de camions accidentés, etc.).

Abriola et Pinder (1985a) décrivent bien la complexité des phénomènes mis en jeu par l'infiltration d'un polluant chimique dans le milieu souterrain, due par exemple à une fuite d'hydrocarbures (cf. fig. 1 extraite de leur publication) :

"Un polluant constitué d'une ou plusieurs espèces chimiques pénètre dans le sol et migre vers le bas à travers la zone non saturée sous l'influence de la gravité. Dans certains cas, le polluant a pu être introduit dans le milieu souterrain en tant que produit en solution dans la phase aqueuse mais assez souvent aussi, en tant que phase non aqueuse distincte. L'infiltration verticale du polluant est accompagnée d'une migration latérale, sous l'effet des forces capillaires. De plus, une enveloppe gazeuse de vapeurs chimiques peut être présente autour de la phase non aqueuse, si des composants légers se sont volatilisés. Si l'épandage est suffisamment important, le polluant pourra atteindre la surface libre de la nappe où les composants solubles formeront un panache de contamination qui sera transporté par l'écoulement souterrain d'eau. La portion de polluant qui est demeurée à l'état de phase distincte peut se déplacer sous l'effet de ses propres gradients de pression à travers la frange capillaire et finalement déprimer la nappe comme indiqué sur la figure 1. Si la phase non aqueuse est plus dense que l'eau, elle migrera vers le bas, à travers la zone non saturée, jusqu'à rencontre d'une éponte. Il faut noter qu'une part importante de la phase organique restera capturée dans la zone non saturée pendant un temps indéfini, du fait des forces capillaires. Cette phase piégée sera une source de contamination pour l'eau d'infiltration ou en cas de remontée de la nappe. Les composants chimiques de la phase gazeuse pourront aussi se dissoudre dans les eaux d'infiltration."

Pour quantifier quelques-uns des comportements évoqués ci-dessus, différents modèles mathématiques ont été mis au point. La complexité des phénomènes physico-chimiques conduit à des équations qu'il n'est généralement possible de résoudre qu'au moyen de simulations numériques plus ou moins sophistiquées. De ce fait, rares sont les modèles mathématiques prenant en compte l'ensemble des phénomènes envisageables qui comportent, en plus de ceux décrits ci-dessus, des réactions chimiques éventuelles entre espèces ainsi que d'adsorption/désorption sur la matrice rocheuse, de la biodégradation, voire un transport de

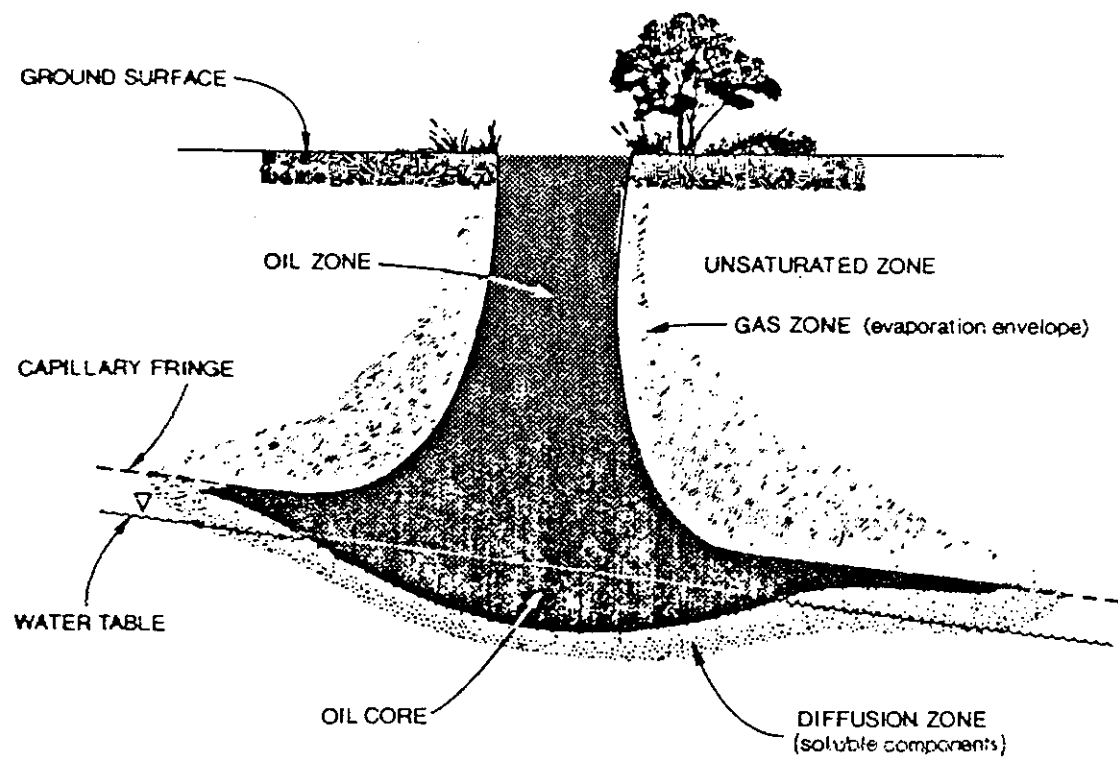


Fig. 1 - Cross-section schematic of a petroleum spill (after Abriola et Pinder, 1985a).

chaleur... Un tel modèle donnant une formulation très générale pour des écoulements triphasiques (eau, gaz, NAPL) dans un réservoir compressible non isotherme avec échange de masse entre phases dû à la solubilité du gaz dans les phases liquides est décrit par Panday et Corapcioglu (1989) ; cette présentation montre très clairement comment passer du plus général (et plus compliqué) au plus simple tel que diphasique pur (problème de Buckley-Leverett Buckley et Leverett (1942)) ou "pseudo-diphasique" (équation de Richards en ZNS) à l'aide d'hypothèses simplificatrices.

Dans la littérature que nous avons dépouillée, on retrouve en gros les types de modèles suivants :

- des modèles simplifiés qui se répartissent en deux catégories :
 - . ceux qui considèrent les écoulements d'eau, de polluant non aqueux, d'air, comme autant de phases immiscibles distinctes (modèles polyphasiques sensu stricto),
 - . ceux qui décrivent le transport de polluants par les phases fluides (en général une seule phase aqueuse transportant une ou plusieurs espèces chimiques en solution) ;
- des modèles plus complexes ("compositional models" dans la littérature anglo-américaine) prenant en compte les 2 aspects ci-dessus au moins en partie, c'est-à-dire l'écoulement simultané de plusieurs phases et le transport d'espèces diverses par ces phases avec plus ou moins de possibilités d'échanges de masse et/ou d'énergie (chaleur) entre phases, et d'éventuelles réactions chimiques.

Un tel modèle sera nécessaire pour simuler, par exemple, la récupération d'hydrocarbures par injection d'un gaz originellement immiscible dans la phase huileuse, tel que le CO_2 , dans le but que la miscibilité du gaz augmente grâce à un processus continu de transfert de masse aboutissant ainsi à une réduction de la pression capillaire entre l'huile et le fluide qui la déplace ; ou encore, autre exemple, la dépollution de nappe aquifère par injection de vapeur (écoulements non isothermes).

Quelques définitions

Dans les situations physiques évoquées au paragraphe précédent, on considère toujours un mélange de constituants qui se superposent dans le milieu poreux. En n'importe quel point du mélange on peut en principe trouver chaque constituant avec ses propres paramètres physiques tels que densité, viscosité... Dans ce cas, la matrice rocheuse est un constituant et chacun des fluides occupant ses pores en est un autre. Dans les discussions sur la physique des milieux poreux, il est important de distinguer un mélange de PHASES d'un mélange d'ESPECES (Allen 1985) ; on est en présence d'un mélange de phases si à une échelle microscopique comparable aux dimensions moyennes des pores, on peut observer des interfaces abrupts entre les propriétés matérielles des constituants, (par exemple, discontinuité de la densité entre la phase rocheuse et une phase fluide).

Dans ce cas, on peut en particulier définir des volumes fractionnaires ϕ_α par phase α tels que $0 \leq \phi_\alpha \leq 1$

et $\int_\Omega \phi_\alpha \, dv$ est la fraction de volume R occupée par la phase α .

En particulier, la somme des volumes fractionnaires fluides dans la matrice poreuse saturée est égale à la porosité de la matrice $\sum_{\alpha} \phi_{\alpha} = \phi$

ou encore $\frac{\phi_{\alpha}}{\phi}$ représente la saturation de la phase α dans le milieu considéré.

En revanche, si on ne peut pas observer d'interface abrupt entre constituants à l'échelle microscopique, on n'a pas un mélange de phases mais un mélange d'espèces chimiques (ex. : eau salée) et on ne peut pas identifier de séparation entre elles si ce n'est peut-être à une échelle intramoléculaire. On ne peut pas non plus définir de volume fractionnaire ni de saturation. Bien sûr, dans la réalité, on a très souvent plusieurs phases fluides, chacune transportant plusieurs espèces chimiques ("compositional model" ou "multiphase multicomponent flow" déjà évoqué cf. supra).

Comme on l'a vu plus haut, chaque espèce transportée peut, au moins en théorie, exister dans chaque phase et passer d'une phase à l'autre par dissolution, vaporisation, condensation, adsorption/désorption etc. en fonction de contraintes thermodynamiques.

Dans l'étude qui suit, on va s'intéresser principalement aux écoulements diphasiques stricto sensu c'est-à-dire sans échange de masse entre les deux phases fluides et sans interaction avec la matrice solide ; comme exemples de tels écoulements on peut citer :

- l'intrusion saline en aquifère côtier (eau salée et eau douce considérées immiscibles) ;
- le déplacement horizontal d'une huile par de l'eau (problème de Buckley-Leverett) ;
- l'écoulement d'eau et d'air en ZNS.

On sera cependant amené à considérer des exemples avec transfert de masse quand ils apportent des informations complémentaires utiles à notre propos.

Validité des lois de comportement

Pour modéliser un écoulement diphasique en milieu poreux, on utilise une équation de Darcy généralisée et une équation de continuité pour chaque phase.

Rappelons la forme de l'équation de Darcy pour le fluide α :

$$\vec{U}_{\alpha} = - \frac{\bar{k}_{\alpha}}{\mu_{\alpha}} (\text{grad } P_{\alpha} + \rho_{\alpha} g \text{ grad } Z)$$

où U_{α} est la vitesse de Darcy du fluide α ,

μ_{α} sa viscosité dynamique,

ρ_{α} sa masse volumique,

P_{α} sa pression,

et où $\bar{k}_{\alpha} = K_{r\alpha} \bar{k}$ est la perméabilité du milieu au fluide α ,

avec $\bar{k}$ tenseur de perméabilité intrinsèque du milieu poreux à saturation,
et $K_{r\alpha}$ perméabilité relative au fluide α .

Parker (1989) rappelle que la validité de l'extension de la loi de Darcy, définie à l'origine pour des écoulements monophasiques, à des écoulements polyphasiques, repose sur l'hypothèse que le mouvement de la phase n'est pas directement affecté par les gradients de pression dans les autres phases, ce qui n'est pas vrai dans l'absolu. Parker (1989) écrit que l'hypothèse est d'autant moins valide que le milieu poreux est de granulométrie plus faible et la saturation de la phase plus faible. Cependant, concède-t-il, dans ces conditions, les perméabilités deviennent tellement basses que cette restriction n'est "probablement pas importante en pratique".

Une autre hypothèse critiquable d'après Parker (1989) est la définition des perméabilités intrinsèque $\bar{k}$ et relative $K_{r\alpha}$ qui suppose une séparation entre les effets sur l'écoulement qui dépendent du fluide α , ($K_{r\alpha}$) de ceux qui dépendent du milieu poreux $\bar{k}$. L'hypothèse que la perméabilité intrinsèque est une grandeur tensorielle unique pour le milieu poreux est raisonnablement justifiée pour des sols granulaires rigides, qui ne sont pas sujets à gonflement ou affaissement en réponse à l'interaction avec les fluides.

Pour les milieux à grains fins, l'hypothèse est là aussi susceptible d'être invalidée car de tels milieux peuvent exhiber des différences dans l'ordre de grandeur de la perméabilité "intrinsèque" quand ils sont saturés avec des fluides différents. De plus, la notion que la nature tensorielle de la conductivité du fluide ne dépend que de la perméabilité intrinsèque alors que la perméabilité relative resterait un scalaire "n'a que peu de justification si ce n'est son côté pratique".

Des études ont montré que, en milieu anisotrope, le caractère tensoriel de la perméabilité effective pourrait varier avec la saturation du fluide (Bear *et al.*, 1987) ; ces auteurs ont réalisé des expériences numériques à l'aide de réseaux de tubes capillaires qui les ont amenés à cette conclusion ; ils ont établi par ailleurs que le concept de perméabilité relative en milieu isotrope non saturé ne peut pas être étendu dans le cas général (directions principales non alignées sur les coordonnées) aux écoulements en milieu non saturé anisotrope. Cette "découverte présente le désavantage de compliquer un problème déjà suffisamment difficile" écrit Parker (1989) !

1. REVUE SYNTHETIQUE DES EXEMPLES D'ECOULEMENTS DIPHASIQUES RENCONTRES DANS LA LITTERATURE

Sans prétendre à l'exhaustivité - beaucoup d'exemples appartiennent à la littérature des pétroliers que nous n'avons pas toujours pu nous procurer - nous avons rassemblé un certain nombre de cas d'étude traitant :

- soit d'écoulements diphasiques sensu stricto ;
- soit d'écoulements diphasiques avec éventuellement transport et échange de masse entre phases ;
- soit d'écoulements triphasiques qui se simplifient en diphasiques, avec ou non transport et échanges, sous certaines conditions.

N.B. : nous avons conservé l'appellation anglo-américaine des schémas, techniques, pondérations... quand les termes français étaient moins connus.

1.1. ECOULEMENTS DIPHASIQUES EAU-HUILE

1.1.1. Huyakorn et Pinder (1978)

- **Problème traité** : écoulement diphasique 2D immiscible eau-huile sans pression capillaire.
- **Schéma numérique** : éléments finis (EF) où les inconnues sont la pression d'eau et la saturation en eau (P_w , S_w).
- **Description algébrique des équations** : oui en EF.
- **Description algébrique des conditions aux limites** : non.
- **Limitations sur CL et/ou CI** : non indiquées.
- **Pondérations spatiales** : pondération amont ("upstream") sur les fonctions de forme (cf. § 4.1.).
- **Pondération temporelle** : schéma DF à 2 niveaux implicite pur (Euler implicite).
- **Méthode de résolution** :
 - linéarisation soit par le schéma "fully implicit chord slope incremental solution" sur les mobilités (cf. § 5.2) soit par Newton-Raphson (cf. § 5.1) ;
 - résolution par un schéma d'élimination gaussienne classique.
- **Tests** :
 - problème de Buckley-Leverett classique (sans pression capillaire) en 1D ;
 - problème équivalent à Buckley-Leverett en 2D avec le schéma classique à "5 puits".

• **Conclusions des auteurs :**

- pour les problèmes considérés, nécessité de diagonaliser la matrice masse (propre aux EF) ;
- en 1D, la technique aboutit à un système d'équations algébriques similaire à celui que donnerait un schéma DF avec pondération upstream à 1 point (cf. § 4.1) ;
- en 2D, la technique de pondération spatiale utilisée donne des résultats beaucoup plus précis que ceux qu'on obtient avec une pondération classique sur les mobilités en EF (analogue au schéma en DF) ; le système d'équations obtenues ressemble beaucoup à celui que donnerait un schéma DF à 9 points (qui est supérieur au classique schéma à 5 points en ce qu'il permet de limiter les effets d'orientation de la grille DF).

• **Nos remarques :**

- cette étude en EF nous intéresse surtout parce qu'elle met en évidence la nécessité de la pondération upstream pour résoudre les problèmes à pression capillaire nulle ; on verra plus loin (cf. § 3.3.2a) que ceci est vrai aussi en DF ;
- en 2D, pour le problème des 5 puits, la pondération "upstream" rend les résultats insensibles à l'orientation de la grille par rapport à l'écoulement; ceci est à rapprocher des remarques de (Todd *et al.*, 1972) qui montrent qu'en DF, il est avantageux pour obtenir le même résultat de choisir le schéma "upstream" à 2 points (cf. § 4.2) ;
- cependant, D. Thiéry nous signale qu'il n'a pas de problème d'orientation dans le problème à 5 puits avec son code MARTHE, avec ou sans "upstream".

1.1.2. Faust (1985)

• **Problème traité :** écoulement 2D triphasique immiscible (eau, air, NAPL) en zone saturée et non saturée ; les équations se simplifient en problème diphasique eau-NAPL parce que l'on considère que la phase d'air est immobile, à la pression atmosphérique ; cependant, les relations caractéristiques prennent en compte les 3 phases.

• **Schéma numérique :** différences finies (DF) "block centered" où les inconnues sont la pression d'huile et la saturation d'eau (P_o , S_w).

• **Description algébrique des équations :** oui (cf. § 2.1.1)

• **Description algébrique des conditions aux limites :** oui (cf. § 2.1.1).

• **Limitations sur CL et/ou CI :** non indiquées.

• **Pondérations spatiales :**

- "upstream weighting" sur les perméabilités relatives (cf. § 4.1) ;
- moyenne harmonique sur les perméabilités intrinsèques et les autres termes spatio-dépendants (cf. § 2.1.1).

• **Pondération temporelle :** schéma DF à 2 niveaux implicite pur (Euler implicite).

• **Méthode de résolution :**

- linéarisation par Newton-Raphson (cf. § 5.1) ;
- résolution par une méthode directe (décomposition de Gauss-Doolittle pour matrice bande) ;
- méthode "Simultaneous Solution " ou SS (cf. § 3.1).

- **Tests :**

- problème de Buckley-Leverett avec pression capillaire ;
- écoulement 2D d'eau en ZNS (pseudo-diphasique) ;
- contamination en ZNS par LNAPL puis DNAPL avec perméabilités relatives triphasiques.

- **Conclusions des auteurs :**

- modèle numérique stable applicable à une grande variété de problèmes ;
- pour les contaminants plus denses que l'eau (DNAPL), les simulations verticales 1D peuvent suffire dans certains cas ; en l'absence de grosses hétérogénéités, l'écoulement est essentiellement vers le bas ;
- pour les contaminants moins denses que l'eau (LNAPL), les simulations 1D ne seront jamais suffisantes, une migration latérale peut se produire même dans la zone non saturée (cf. supra).

- **Nos remarques :** problème clairement posé ; résultats intéressants bien explicités ; facile à lire.

1.1.3. Faust et al. (1989)

- **Problème traité :** comme (FAUST, 1985) mais en 3D ou cylindrique 2D.

- **Schéma numérique :** différences finies (DF) où les inconnues sont la pression d'huile et la saturation d'eau (P_o , S_w).

- **Description algébrique des équations :** oui.

- **Description algébrique des conditions aux limites :** oui.

- **Limitations sur CL et/ou CI :** non indiquées.

- **Pondérations spatiales :**

- "upstream weighting" sur les perméabilités relatives ;
- moyenne harmonique sur les perméabilités intrinsèques.

- **Pondération temporelle :** schéma DF à 2 niveaux implicite pur (Euler implicite).

- **Méthode de résolution :**

- linéarisation par Newton-Raphson ;
- résolution par : "Slice Successive Overrelaxation" (SSOR) pour problème 3D ; une méthode directe en 1D ou 2D (cf. Faust, 1985) ;
- méthode "Simultaneous Solution" (SS).

- **Tests :**

- simulation 1D de barrières capillaires et hydrodynamiques ;
- simulation cylindrique 2D de récupération de fluides immiscibles ;
- écoulement 3D de DNAPL dans l'eau souterraine.

- **Conclusions des auteurs :**

- modèle appliqué à 3 exemples à l'échelle du terrain, quelques uns des résultats prédits par le modèle ont été confirmés par des mesures de terrain postérieures ;
- le concept d'équilibre vertical (cf. ann. 2) ne peut en général pas s'appliquer aux problèmes envisagés, en tout cas pas au problème 3D traité ici ;
- la technique de résolution itérative SSOR peut être avantageusement modifiée pour s'adapter à une architecture d'ordinateur parallèle.

- **Nos remarques :** n'apporte pas grand chose par rapport aux travaux de Faust (1985).

1.1.4. Kuppusamy et al. (1987)

- **Problème traité :** comme (Faust, 1985 et 1989), écoulement 2D triphasique immiscible (eau-air-NAPL) simplifié en diphasique (eau-NAPL) en considérant la phase air immobile.

- **Schéma numérique :** EF où les inconnues sont les potentiels HH_o , HH_w .

- **Description algébrique des équations :** oui en EF.

- **Description algébrique des conditions aux limites :** non.

- **Limitations sur CL et/ou CI :** non indiquées.

- **Pondérations spatiales :** non indiquées.

- **Pondération temporelle :** schéma DF à 2 niveaux implicite pur (Euler implicite).

- **Méthode de résolution :**

- linéarisation par Picard modifié, c'est-à-dire Picard avec sous-relaxation ;
- méthode "Simultaneous Solution " (SS).

- **Tests :** comparaison à des expériences de laboratoire.

- **Conclusions des auteurs :** analyse de sensibilité montrant que le modèle paramétrique utilisé pour les équations caractéristiques, modèle de Parker et al. (1987) nécessiterait quelques améliorations pour que les résultats du modèle numérique correspondent mieux aux mesures de laboratoire.

1.1.5. Forsyth (1988)

- **Problème traité :** écoulement triphasique 2D (eau-air-NAPL) avec transport d'un contaminant qui peut se répartir entre les trois phases ; on suppose une pression de gaz uniforme ce qui ramène le schéma à du diphasique eau-NAPL avec transfert de masse ;
- le transport est convectif dans les phases eau et NAPL, diffusif seulement dans la phase gazeuse ;
- les relations caractéristiques sont triphasiques.

- **Schéma numérique** : DF "cell-centered" avec en plus un changement de variables :
 - si $S_o > 0$ dans la maille i , on résout en P_o, S_w ;
 - si S_o devient nul, on change (cf. § 2.1.3).
- **Description algébrique des équations** : oui (cf. § 2.1.3).
- **Description algébrique des conditions aux limites** : oui (cf. § 2.1.3).
- **Limitations sur CL et/ou CI** : non indiquées.
- **Pondérations spatiales** :
 - "upstream weighting" sur les mobilités ainsi que les termes concentration x mobilités dans l'équation de transport ;
 - moyenne harmonique sur les perméabilités intrinsèques et les coefficients de diffusion dans l'équation de transport.
- **Pondération temporelle** :
 - méthode implicite "adaptive" c'est à dire purement implicite ou implicite en pression-explicite en saturation dite IMPES (cf. § 3) selon les cas.
- **Méthode de résolution** :
 - linéarisation par "full" Newton-Raphson (cf. § 5.1) ;
 - solveur de type gradients conjugués avec préconditionnement (factorization LU et accélération par ORTHOMIN).
- **Tests** :
 - test de Faust (1985) : contamination en ZNS par un NAPL sans transfert de masse ; bon accord avec les résultats de FAUST ;
 - un test avec transfert de masse.
- **Conclusions des auteurs** :
 - la méthode "implicit adaptive" fonctionne bien pour du diphasique sans échange de masse, 40% de CPU serait gagné par rapport au schéma implicite pur ;
 - avec transfert de masse, les conditions de stabilité nécessitent une simulation de type implicite pur dans la plupart des mailles ;
 - la méthode du changement de variable retenue permet de résoudre rigoureusement les équations d'écoulement là où S_o est pratiquement nul ; elle bascule automatiquement sur la formulation adéquate quand la phase non aqueuse apparaît dans une maille ; cette méthode conduit à un bon bilan de masse ; elle fait disparaître le problème d'avoir à spécifier des conditions initiales pour les phases inexistantes ;
 - une description complète de la manière de prendre en compte les conditions aux limites à l'aide de termes sources est donnée (cf. § 2.1.3).
- **Nos remarques** : publication intéressante pour le changement de variable introduit quand le NAPL disparaît (cf. § 2.1.3).

1.1.6. Kaluarachchi et Parker (1989)

- **Problème traité** : écoulement triphasique 2D (eau-air-NAPL) avec encore des gradients de pression négligeables dans la phase gazeuse, ce qui revient à considérer du diphasique eau-NAPL ; les relations caractéristiques sont triphasiques.
- **Schéma numérique** : EF Galerkin où les inconnues sont les pressions en hauteur d'eau équivalente (h_w , h_o).
- **Description algébrique des équations** : oui en EF.
- **Description algébrique des conditions aux limites** : oui en EF.
- **Limitations sur CL et/ou CI** :
 - si une CI est $S_o = 0$, on impose une valeur initiale $h_o = h_o^{cr}$ hauteur d'huile critique ;
 - passage automatique de diphasique à triphasique quand $h_o > h_o^{cr}$ (le passage inverse n'est pas autorisé).
- **Pondérations spatiales** : "upstream weighting" utilisant des fonctions de pondération asymétriques.
- **Pondération temporelle** :
 - implicite "recommandé" ;
 - 3 schémas différents pour pondérer le terme de capacité provenant du choix des pressions comme variables indépendantes (cf. § 2.1.4) : "time weighted analytical scheme"; "mean head analytical scheme" ; "modified chord slope scheme".
- **Méthode de résolution** :
 - linéarisation par Picard ou Newton-Raphson avec "lumping" de la matrice masse ;
 - mise à jour des pressions nodales à chaque itération par la méthode de Cooley (1983) ;
 - ajustement automatique du pas de temps ;
 - méthode SS.
- **Tests** :
 - infiltration et redistribution 1D d'huile dans un sol homogène puis hétérogène (stratifié à 3 couches) ;
 - infiltration et redistribution d'huile en 2D pour différentes valeurs des propriétés des fluides.
- **Conclusions des auteurs** :
 - bonne convergence de Picard même pour les problèmes fortement non linéaires grâce au schéma de relaxation de Cooley et à la pondération "upstream";
 - quel que soit le schéma de représentation du terme de capacité, le bilan de masse obtenu est toujours meilleur durant la phase d'infiltration que celle de redistribution ; dans les deux cas, le meilleur bilan de masse est produit par le schéma "chord slope" pour la représentation du terme de capacité mais son utilisation nécessite, en milieu homogène, un accroissement du temps de calcul d'environ 10% par rapport aux schémas analytiques ;
 - en milieu stratifié, le problème est assez difficile à cause des variations brutales de S_w avec la profondeur à la fin de la phase d'infiltration ; Picard est sensiblement aussi performant que Newton quand il converge ; en absence de "upstream weighting", Picard ne converge pas

- durant la phase de redistribution et Newton converge péniblement ; à même précision de résultats, le temps de calcul avec Newton peut être de 1/3 supérieur à celui avec Picard ;
- les tests en 2D ont montré une très grande sensibilité du déplacement du NAPL et de la forme du panache par rapport aux variations de viscosité et densité relatives.

- **Nos remarques** : publication intéressante pour la comparaison des différents schémas de pondération du terme de capacité.

1.1.7. Kueper et Frind (1991a)

- **Problème traité** : écoulement diphasique 2D immiscible (eau-DNAPL), en coupe verticale, en zone saturée uniquement mais milieu hétérogène ; relations caractéristiques diphasiques (Van Genuchten ou Brooks et Corey).

- **Schéma numérique** : DF "block-centered" avec pour inconnues la pression et la saturation de l'eau (P_w , S_w).

- **Description algébrique des équations** : oui (cf. § 2.1.5).

- **Description algébrique des conditions aux limites** : oui (cf. § 2.1.5).

- **Limitations sur CL et/ou CI** :

- il faut indiquer une CI pour S_w ; si P_w initial est aussi donné, il n'y a pas besoin de définir des CL en P_w nulle part dans le modèle, seulement en S_w ;
- le choix de P_w , S_w comme variables primaires et la formulation retenue (cf. § 2.1.5) permettent la prise en compte des relations caractéristiques $K_r(S_w)$ et $P_c(S_w)$ soit sous forme de valeurs tabulées, soit sous forme analytique (relations de Van Genuchten ou Brooks et Corey) ; de même, l'hystérésis de ces relations peut être plus facilement prise en compte directement dans la formulation (la démonstration n'en est pas donnée).

- **Pondérations spatiales** :

- "upstream weighting" sur les perméabilités relatives ;
- moyenne harmonique sur les perméabilités intrinsèques.

- **Pondération temporelle** : implicite pur.

- **Méthode de résolution** :

- linéarisation par "full" Newton-Raphson ;
- méthode SS ;
- solveur : "block Dupont Kendall Rachford ORTHOMIN" (DKR).

- **Tests** :

- vérification par comparaison avec les solutions analytiques de Mc Worther et Sunada (1990) qui diffèrent de Buckley-Leverett en ce qu'elles prennent en compte une pression capillaire entre les fluides ;
- validation sur des résultats expérimentaux de Kueper *et al.* (1989) ; bon accord entre résultats observés et simulés.

• **Conclusions des auteurs :**

- la formulation P_w, S_w est bien adaptée à la solution de problèmes impliquant la propagation d'un liquide organique dans un aquifère initialement indemne de contamination parce qu'il n'est pas nécessaire de spécifier une saturation fictive pour le fluide non aqueux dans les zones saturées en eau ;
- Newton-Raphson converge rapidement et le schéma itératif DKR avec accélération par Orthomin est très efficace, on a donc la possibilité de traiter des modèles avec beaucoup de mailles en milieu hétérogène ;
- modèle vérifié sur une solution analytique 1D avec un excellent accord et validé sur des résultats expérimentaux en 2D et milieu hétérogène avec un très bon accord visuel.

• **Nos remarques :** premier modèle rencontré vraiment validé par comparaison des résultats numériques avec des expériences de laboratoires en milieu hétérogène ; dans un "companion paper", Kueper et Frind (1991b), le modèle est utilisé pour examiner l'influence des hétérogénéités sur un écoulement diphasique en condition de drainage primaire.

1.1.8. Abriola et Rathfelder (1993)

• **Problème traité :** écoulement diphasique 2D immiscible (eau-NAPL).

• **Schéma numérique :**

- comparaison entre différents schémas du point de vue du bilan de masse ;
- habituellement les schémas EF en P_w, P_o donnent un mauvais bilan de masse et le bilan est bien meilleur avec un schéma P, S (tous deux avec la méthode SS) ; en effet, avec le schéma P P, les variables sont continues, quels que soient les degrés de saturation des fluides ou les hétérogénéités du sol, mais des problèmes peuvent surgir du fait de la discretization du terme de capacité capillaire ; avec le schéma P S, le bilan est mieux garanti ($P_o S_w$ ou $P_w S_w$).

• **Description algébrique des équations :** oui, 3 types en 1D (cf. § 2.1.6)

- DF pour le schéma $P_w P_o$;
- EF pour le schéma $P_w P_o$;
- DF pour le schéma P S.

• **Description algébrique des conditions aux limites :** non.

• **Limitations sur CL et/ou CI :** avec le schéma P_w, P_o , il est nécessaire de définir des pressions initiales, un problème se pose si l'un des fluides est absent au départ : par ex., dans un aquifère vierge de contamination n'importe quelle valeur de P_c pourrait convenir, il y a indétermination sur P_o initial; on montre qu'il est mieux de prendre P_o initial = P_w initial ($P_c = 0$) plutôt que P_o initial = 0 quand $S_o = 0$ (approche qui pourrait être envisagée par analogie avec le non saturé où on prend toujours $P_c = - P_w$).

• **Pondérations spatiales :** non indiquées.

• **Pondération temporelle :**

- elle est liée à l'évaluation du terme de capacité dans le schéma $P_w P_o$;
- test de l'approximation SCS (standard chord slope cf. § 2.1.6) qui donne un bon bilan de masse en DF mais moins bon en EF ;

- approximation retenue : "modified chord slope" similaire à SCS avec des pressions moyennées sur le temps (cf. § 2.1.6).

- **Méthode de résolution :**

- linéarisation par Newton-Raphson pour les schémas DF, par Picard pour le schéma EF (pas d'explication sur la raison de cette différence de traitement) ;
- méthode SS.

- **Tests :**

- vérification des modèles par comparaison aux solutions analytiques de Mc Whorter et Sunada (1990), bon accord pour les 3 modèles ;
- test sur écoulement diphasique horizontal 1D en milieu homogène avec maillage uniforme, pas de temps variable ajusté en fonction du nombre d'itérations nécessaires à la convergence ;
- influence des propriétés du sol sur le bilan de masse testée par comparaison de deux systèmes milieu/contaminant (avec des sols à granulométries différentes) ; tests de bilans de masse sur les différents schémas et simulateurs.

- **Conclusions des auteurs :** lorsque S_o initial est nul, un bon bilan de masse n'est possible que si la distribution P_o initiale est prise égale à P_w (pression capillaire nulle) ; ce résultat a été obtenu avec le code DF en pressions.

- **Nos remarques :** bonne étude des CI montrant qu'il n'est pas raisonnable de choisir P_o initial nul quand $S_o = 0$ et qu'il convient de prendre P_o initial = P_w initial soit P_c initial = 0.

1.2. ECOULEMENTS DIPHASIQUES EAU-GAZ

1.2.1. Morel-Seytoux et Billica (1985a et b)

- **Problème traité :** écoulement diphasique 1D (eau-air) pour traiter les problèmes d'infiltration d'eau dans les sols ; comparaison avec un écoulement monophasique classique en ZNS. Les auteurs montrent que l'approche diphasique est paradoxalement non seulement plus physique mais aussi moins coûteuse numériquement que l'approche monophasique et absolument nécessaire dans certains cas.

- **Schéma numérique :**

- . schéma h_a, h_w où h_a et h_w sont les pressions d'air et d'eau en hauteur d'eau équivalente ;
- . "fractional flow approach" (cf. § 2.2.1).

- **Description algébrique des équations :** oui.

- **Description des conditions aux limites :** oui.

- **Tests :**

- comparaison des résultats obtenus avec la formulation classique monophasique et avec la formulation diphasique, pour des tests d'infiltration sous condition de pluie stationnaire ou variable, dans le cas d'une colonne semi-infinie (Morel-Seytoux et Billica, 1985a) puis d'une colonne finie imperméable à la limite inférieure (Morel-Seytoux et Billica, 1985b) ; on constate que :

- *dans le cas de la colonne semi-infinie*, (1) *pour le cas de la pluie stationnaire*, les profils de teneur en eau quoique légèrement différents aux fortes teneurs restent assez semblables lorsque les pluies sont peu importantes ; cependant, la zone de transition au voisinage de la surface est mieux restituée en diphasique qu'en monophasique ; (2) *en cas de pluie variable*, un phénomène de débordement ("ponding") se produit pendant un certain temps en diphasique mais pas en monophasique, en dehors de cette période, les profils sont assez proches ; dans le cas monophasique, les variations d'infiltration suivent celles de la pluie mais pas dans le cas diphasique ;
- *dans le cas de la colonne finie*, imperméable à la base, que la pluie soit stationnaire ou variable, les profils de teneur en eau sont assez différents selon le schéma monophasique ou diphasique (cf. fig. 2 et 3 extraites de la publication) ; ceci vient de ce que la compressibilité et la viscosité de l'air jouent cette fois-ci un rôle important non pris en compte dans le schéma classique monophasique ; en particulier, le débordement, qui ne se produit que lorsque le sol est saturé en monophasique, apparaît beaucoup plus tôt en diphasique alors que le sol est encore très sec ; en diphasique, avant débordement, c'est l'écoulement d'air à contre-courant de l'écoulement d'eau qui limite la capacité d'infiltration et après, c'est essentiellement la compression de l'air, lequel doit dans tous les cas se frayer un chemin jusqu'à la surface du sol ; le bilan de masse est en général meilleur avec l'approche diphasique ; lorsque la pluie n'est pas stationnaire, les profils sont encore assez différents même avec une longueur de colonne 10 fois plus grande que dans le cas précédent ; cette fois, le schéma numérique diphasique est légèrement plus coûteux que le schéma monophasique mais son accord avec la réalité est bien meilleur de même que sa précision (meilleur bilan de masse).
- **Conclusions des auteurs :**
 - comme il est très facile avec cette approche numérique, de basculer du monophasique au diphasique et réciproquement, il est possible de combiner les avantages des deux approches en utilisant la plus traditionnelle quand la teneur en eau du sol est faible et l'approche diphasique aux grandes teneurs ; il apparaît au vu des résultats présentés que même dans le cas d'une colonne semi-infinie où la compressibilité de l'air est négligée dans l'une et l'autre approche, l'effet de résistance visqueuse de l'air à l'écoulement d'eau n'est pas négligeable lorsqu'on est proche de la saturation ; l'approche diphasique est alors non seulement plus réaliste mais aussi moins coûteuse que l'autre contrairement à l'opinion généralement répandue ;
 - la présence d'une limite inférieure imperméable affecte grandement le phénomène d'infiltration et dans ce cas, l'approche monophasique conduit à des résultats fortement erronés ; comme on ne peut pas corriger l'approche traditionnelle en prenant simplement en compte la compressibilité de l'air dans l'équation de Richards (qui ne permet pas de restituer l'échappement de l'air à la surface), l'approche diphasique est tout indiquée et permet aussi de prendre en compte la viscosité de l'air.
- **Nos remarques :** étude intéressante parce qu'elle montre bien, même si ce n'est que sur des colonnes de laboratoire, l'apport du traitement diphasique de la ZNS par rapport à l'approche traditionnelle ; la méthode numérique "fractional flow" semble cependant difficilement extensible à plus de une dimension ce qui en limite donc considérablement la portée pratique.

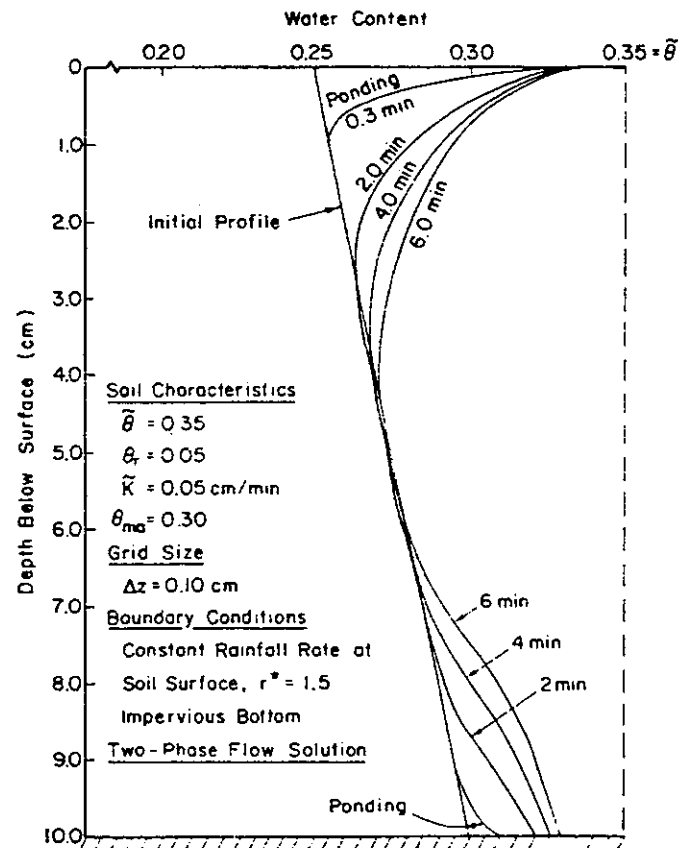


Fig. 2 - Water content profiles in a soil column with an impervious boundary 10 cm below soil surface (two-phase approach).

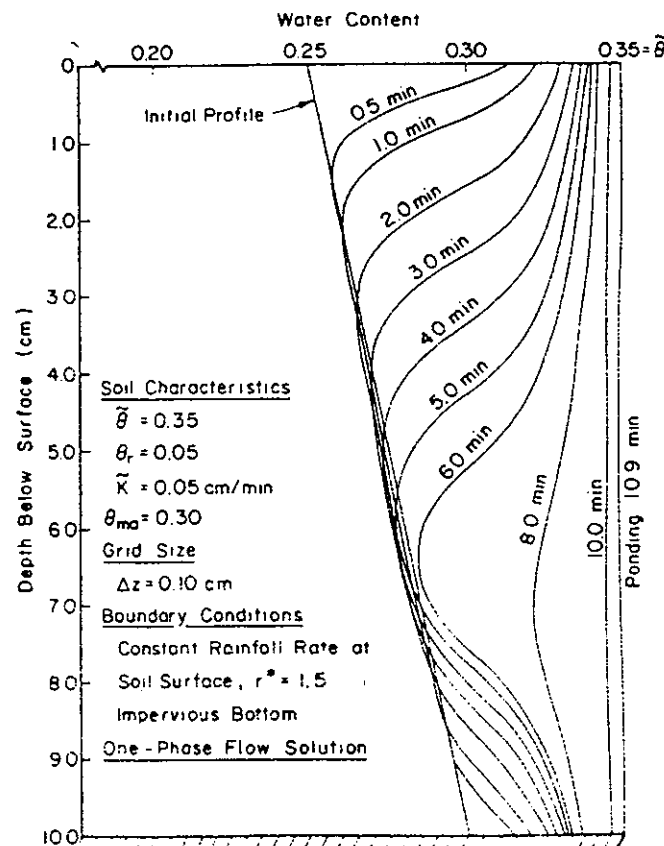


Fig. 3 - Water content profiles in a soil column with an impervious boundary 10 cm below soil surface (one-phase approach).

1.2.2. Sleep et Sykes (1989)

• **Problème traité** : écoulement diphasique 2D (eau-air) en milieu à saturation variable avec transport d'une substance organique volatile immobilisée; l'écoulement de gaz dépend de la densité, il est partiellement découplé de l'écoulement d'eau parce que l'on suppose que la pression capillaire entre les phases aqueuse et gazeuse est nulle. Le transfert de masse du NAPL entre phases se fait hors équilibre avec prise en compte de phénomènes de dissolution dans la phase aqueuse, vaporisation dans la phase gazeuse et partition selon la loi de Henry entre phases aqueuse et gazeuse.

• **Schéma numérique** : EF Galerkin en 2D (coupe verticale) ; les variables sont la pression en hauteur d'eau, $h_w = \frac{P_w}{\rho_w g}$, pour l'écoulement d'eau et la hauteur d'air équivalente pour le gaz d'air avec vapeurs de NAPL, $h_a^* = \frac{P_g}{\rho_a g} + Z$, pour l'écoulement du gaz (cf. § 2.2.2).

• **Description algébrique des équations** : non.

• **Description algébrique des conditions aux limites** : non.

• **Limitations sur CL et/ou CI** : non indiquées.

• **Pondérations spatiales** : non indiquées.

• **Pondération temporelle** : non indiquée.

• **Méthode de résolution** :

- "modified Newton-Raphson avec accélération de Aitken pour résoudre l'équation d'écoulement d'eau en ZNS ;
- itérations de Picard pour résoudre successivement, au même Δt : l'écoulement du gaz, le transport par l'eau, le transport par le gaz ;
- un calcul de bilan de masse est incorporé au modèle.

• **Tests** : sur un exemple simple en 2D, on teste l'importance respective des paramètres suivants :

- le transport par la phase gazeuse, (la convection se révèle importante pour des DNAPL volatiles) ;
- le type de CL à la surface ;
- l'effet de gaz venting.

• **Conclusions des auteurs** :

- il est indispensable de prendre en compte les phénomènes de vaporisation, de partition gaz-liquide et d'advection par la phase gazeuse pour prévoir correctement le sort de composés organiques volatiles en milieu à saturation variable ; ces phénomènes peuvent être plus importants que la simple dissolution par l'eau pour dissiper du NAPL résiduel immobile dans la ZNS ;
- le modèle n'a pu être validé faute de données.

• **Nos remarques** : les équations aux dérivées partielles prises en compte sont détaillées au § 2.2.2 car il nous a semblé instructif de les présenter, même s'il s'agit d'un problème un peu en marge de notre centre d'intérêt, les approximations introduites sont aussi clairement indiquées ; par contre, le schéma discretisé n'est pas donné dans la publication.

1.2.3. Moridis et Reddell (1991a, b et c)

• **Problème traité** : écoulement diphasique immiscible 3D (eau-air) pour simuler la récupération par injection d'air de l'eau stockée dans la ZNS d'aquifères épuisés ("secondary recovery") :

- 3 étapes calquées sur les techniques des pétroliers sont envisagées et simulées : étape d'injection d'air dans la ZNS ; étape d'attente pendant laquelle l'eau de la ZNS est déplacée dans l'aquifère ; étape de pompage ; on utilise un puits unique qui sert à la fois à injecter l'air et à récupérer l'eau ;
- le concept de l'opération est basé sur l'existence de l'hystérésis de la pression capillaire et des perméabilités relatives aux fluides ; on espère que de ce fait, l'eau poussée dans la zone saturée par l'air injecté ne va pas pouvoir revenir dans la zone non saturée parce que sa mobilité aura décréu.

• **Schéma numérique** : DF classiques ("block centered") en 3D avec pour variables dépendantes la pression d'air P_a et la variation de saturation en air ΔS_a sur un Δt , en coordonnées cartésiennes ou cylindriques.

• **Description algébrique des équations** : oui (cf. § 2.2.3).

• **Description des conditions aux limites** : oui (cf. § 2.2.3).

• **Limitations sur CL et/ou CI** : non indiquées.

• **Pondérations spatiales** :

distinction entre faibles et fortes non linéarités : les variables qui ne dépendent que de la pression d'une phase sont considérées comme faiblement non linéaires ; les propriétés des fluides et du milieu qui dépendent de la saturation (K_r , P_c et leurs dérivées) sont considérées comme fortement non linéaires ; la grande compressibilité du gaz introduit aussi de fortes non linéarités. En conséquence, on prend la moyenne harmonique sur les coefficients d'échange ou "transmissibilités" (cf. ann. 1) mais une pondération upstream sur les perméabilités relatives.

• **Pondération temporelle** :

- soit méthode implicite linéarisée (cf. § 2.2.3) ;
- soit méthode semi-implicite de Nolen et Berry (cf. § 2.2.3).

• **Méthode de résolution** :

- plusieurs méthodes sont présentées : IMPES, SEQ, SS explicite par rapport aux coefficients d'échange, SS implicite par rapport aux coefficients d'échange (cf. § 2.2.3) ;
- on montre que pour des problèmes multidimensionnels en coordonnées cylindriques (puits unique), la méthode SS implicite est la plus fiable car plus stable que IMPES et SEQ ;

- le problème à traiter ici est extrêmement non linéaire du fait de fronts abrupts en pression et saturation, de grandes différences entre les coefficients d'écoulement de l'eau et de l'air, d'un taux d'injection d'air très élevé, de pressions capillaires élevées ; de plus, des difficultés "sérieuses" se présentent qui sont dues à : une discontinuité physique de la phase air au niveau de la surface libre, des discontinuités mathématiques de la pression capillaire et des dérivées de K_r dues à l'hystérésis, des changements brusques du sens d'écoulement dus à l'arrêt de l'injection d'air ;
- pour toutes ces raisons la méthode SS est préconisée ; SS explicite est d'abord essayée, mais comme la mobilité de l'air est beaucoup plus grande que celle de l'eau (viscosité beaucoup plus faible), l'air s'écoule à grande vitesse d'où des problèmes de stabilité qui apparaissent, créés par le passage de l'étape d'air immobile à mobile ;
- finalement, seule SS implicite s'avère convenir.

• **Tests :**

- testé sur le problème classique de Buckley-Leverett 1D (où l'huile remplace l'air comme phase non mouillante), très bon accord constaté avec la solution analytique et une solution numérique décrite dans Settari et Aziz (1975) (papier que nous n'avons pas) ;
- testé ensuite sur un problème de percolation de gaz dans l'huile (qui remplace l'eau comme phase mouillante), problème incluant capillarité et compressibilité : très bon accord avec la solution de référence par Mc Creary (1971) (papier que nous n'avons pas) ;
- validation sur un scénario de "recovery" pour lequel un cas de référence est défini ;
- résultats de simulations comparés à des observations de terrain : temps d'exécution énormes malgré une optimisation automatique du pas de temps.

• **Conclusions des auteurs :** le modèle numérique ne développe aucune instabilité alors qu'il a affaire à des comportements extrêmement compliqués et non-linéaires associés au problème physique envisagé, et ceci quelles que soient les valeurs des paramètres utilisés (taux d'injection, pressions d'injection etc.) ; de plus il est capable de maintenir à tout instant un très bon bilan de masse.

• **Nos remarques :** problème physiquement compliqué, extrêmement bien détaillé du point de vue de la formulation numérique, très intéressant, mais de l'aveu même des auteurs, très coûteux en temps de calcul.

1.2.4. Celia et Binning (1992)

• **Problème traité :** écoulement diphasique immiscible (eau-air) ; extension de l'équation de Richards en ZNS à un véritable écoulement d'air comme (Morel-Seytoux et Billica, 1985). Les résultats numériques montrent dans quelles conditions l'équation de Richards monophasique est valide ; ils montrent aussi l'importance potentielle de l'advection par l'air quand on considère le transport de contaminants dans la ZNS.

• **Schéma numérique :** EF avec matrice masse diagonalisée ("lumped mass matrix") ; les variables indépendantes sont :

$$h_a \text{ et } h_w \text{ où } h_a = \frac{P_a}{\rho_w g} \text{ et } h_w = \frac{P_w}{\rho_w g}, \text{ pressions en hauteur d'eau équivalente.}$$

- **Description algébrique des équations** : oui en EF.
- **Description des conditions aux limites** : non.
- **Limitations sur CL et/ou CI** : non indiquées.
- **Pondérations spatiales** : non indiquées.
- **Pondération temporelle** : "Fully" implicite.
- **Méthode de résolution** :
 - "Modified Picard", soit Picard appliqué à la forme mixte de l'équation de Richards et développement au 1er ordre de Taylor de θ en fonction de la pression capillaire h_c .
 - Méthode SS avec pour variables les incréments entre 2 itérations m et $m+1$ sur h_a et h_w soit :

$$\delta h_{\alpha}^{n+1, m} = h_{\alpha}^{n+1, m+1} - h_{\alpha}^{n+1, m}$$

qui résultent de la procédure de linéarisation choisie.

- **Tests** :
 - comparaison à des tests de laboratoire 1D, avec un bon accord ;
 - des expériences numériques sont menées dans différentes conditions d'écoulement de l'eau dans la colonne de sol pour étudier le mouvement de l'air.
- **Conclusions des auteurs** :
 - l'assertion classique selon laquelle l'approximation de l'écoulement monophasique en ZNS repose sur l'immobilité de la phase d'air est fautive ; la réalité est au contraire que la mobilité de l'air est tellement grande devant celle de l'eau que la pression de l'air s'équilibre instantanément avec la pression atmosphérique, sauf lorsque l'air ne peut pas facilement s'écouler parce qu'il est confiné dans la colonne de sol (déjà observé par Morel-Seytoux et Billica, 1985) ; par conséquent, en cas de transport de contaminant dans la ZNS par la phase gazeuse, le traitement du transport gazeux comme purement diffusif qui découle de l'hypothèse de l'immobilité de la phase d'air, peut être insuffisant, et il faut tenir compte de l'advection par les 2 phases ;
 - si, en 1D, l'approche du "fractional flow" (cf. § 1.2.1) peut être plus performante du fait que le système diphasique est décrit par une seule équation, par contre, en 2 ou 3D, cette approche devient complexe en particulier si les effets gravitaires et capillaires sont pris en compte ; l'algorithme "modified Picard" présenté ci-dessus est applicable sans problèmes à plus d'une dimension en incluant tous les phénomènes physiques en jeu (compressibilité, gravité, capillarité) et garantit de bons bilans de masse.
- **Nos remarques** : ce papier n'apporte aucune information inédite sur la technique de résolution qui est peu décrite et sans originalité particulière par rapport à des publications antérieures ; par contre, il nous intéresse pour l'analyse des résultats numériques en vue d'une meilleure compréhension du phénomène physique de l'écoulement de l'air ; il donne des résultats de calcul de référence.

1.2.5. Forsyth et al. (1995)

• **Problème traité** : écoulement diphasique immiscible (eau-air) pour traiter les écoulements en ZNS en particulier les problèmes d'infiltration en sol très sec pour lesquels les modélisations monophasiques sont difficiles. Comparaison avec deux approches du schéma monophasique.

• **Schéma numérique** :

- soit EF Galerkin avec matrice masse diagonalisée ("lumped mass matrix") et "influence coefficient technique" (cf. Forsyth et Shao, 1991), soit volumes finis ;
- on compare les 3 schémas suivants :
 - . vrai diphasique avec P_w et S_w pour variables primaires,
 - . monophasique avec P_w comme variable en zone saturée et non saturée,
 - . monophasique avec changement de variable (P_w en zone saturée et S_w en zone non saturée).

• **Description algébrique des équations** : oui.

• **Pondérations spatiales** :

- soit moyenne arithmétique, soit "upstream" sur les termes

$$\rho_\alpha \lambda_\alpha = \rho_\alpha K_{r\alpha} / \mu_\alpha \quad (\alpha = a, w) ;$$

(mais avec "upstream", on est "plus sûr de converger vers la solution physique").

• **Pondération temporelle** : "Fully" implicite.

• **Méthode de résolution** : "Full" Newton-Raphson pour linéariser.

• **Tests** :

- problème d'infiltration 1D pour tester la méthode ;
- plusieurs problèmes réputés difficiles en 2D et 3D (milieu très sec et/ou hétérogène).

• **Conclusions des auteurs** :

- en monophasique, l'utilisation du changement de variable précité permet de réduire le nombre d'itérations de Newton d'un ordre de grandeur (par rapport à la méthode sans changement de variable) en conditions de sol sec; si on utilise une méthode numérique pour construire le Jacobien (cf. § 5.5), il est très facile d'introduire le changement de variable ;
- en diphasique, le nombre d'itérations de Newton est comparable au nombre requis par l'approche monophasique avec changement de variable ;
- le traitement diphasique du problème, plus correct physiquement, permet aussi une convergence beaucoup plus aisée quand les conditions sont difficiles (sol très sec).

• **Nos remarques** : papier très intéressant pour la description des résultats obtenus avec les différentes approches des problèmes 2D et 3D présentés, dont certains sont connus pour être difficiles à résoudre en monophasique (exemple de Kirkland *et al.*, 1992).

2. SCHEMAS DE RESOLUTION EN DIPHASIQUE

Dans ce chapitre, on a rassemblé ce qui nous a semblé intéressant du point de vue numérique au fur et à mesure de l'analyse des schémas de résolution présentés au chapitre 1 ; les points retenus peuvent varier d'un auteur à l'autre en fonction de ce qui est décrit dans les publications respectives.

2.1. DIPHASIQUE EAU-HUILE

2.1.1. Faust (1985)

• Schéma de discrétisation

Cet auteur présente un schéma 2D en DF classiques (block-centered) en P_o et S_w .

- Equation de Faust.

$$\nabla \left(\frac{\bar{k} K_{r\alpha} \rho_\alpha}{\mu_\alpha} (\nabla P_\alpha + \rho_\alpha g \nabla Z) \right) = \frac{\partial}{\partial t} (\omega \rho_\alpha S_\alpha) + \rho_\alpha q_\alpha$$

avec $\alpha = w, o$ ou a (water, oil, air).

Hypothèses de Faust :

- directions principales du tenseur $\bar{k}$ alignées avec les coordonnées X, Y ;
- air à pression atmosphérique $P_a = 0$;
- μ_α et ρ_α indépendants de la pression donc constants.

On pose

$$\begin{aligned} P_c &= P_o - P_w \\ S_o &= 1 - S_a - S_w \end{aligned}$$

Faust obtient 2 équations pour l'eau et le NAPL

$$\nabla \left(\frac{\bar{k} K_{rw} \rho_w}{\mu_w} (\nabla P_w + \rho_w g \nabla Z) \right) - \nabla \left(\frac{\bar{k} K_{rw} \rho_w \nabla P_c}{\mu_w} \right) = \frac{\partial}{\partial t} (\omega \rho_w S_w) + \rho_w q_w \quad (2.1.1.1)$$

$$\nabla \left(\frac{\bar{k} K_{ro} \rho_o}{\mu_o} (\nabla P_o + \rho_o g \nabla Z) \right) = \frac{\partial}{\partial t} (\omega \rho_o (1 - S_w - S_a)) + \rho_o q_o \quad (2.1.1.2)$$

En divisant les 2 membres par ρ_o ou ρ_w constant et en utilisant les notations souhaitées, soit :

$$h_\alpha = \frac{P_\alpha}{\rho_\alpha g} \quad (\alpha = w, o)$$

$$d_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{\rho_w} \quad (\alpha = w, o)$$

$$h_c = h_o - h_w = \frac{P_c}{\rho_w g}$$

$$\overline{\overline{K}}_\alpha = \frac{\overline{k} \rho_\alpha g}{\mu_\alpha} \quad (\alpha = w, o)$$

on peut expliciter le schéma de Faust. On obtient :

$$\nabla \left(\frac{\overline{\overline{K}}_w K_{rw}}{d_w} \nabla (h_o + d_w Z) \right) - \nabla \overline{\overline{K}}_w K_{rw} h_c = \frac{\partial (\omega S_w)}{\partial t} + q_w \quad (2.1.1.3)$$

$$\nabla \left(\frac{\overline{\overline{K}}_o K_{ro}}{d_o} \nabla (h_o + d_o Z) \right) = \frac{\partial (\omega (1 - S_w - S_a))}{\partial t} + q_o \quad (2.1.1.4)$$

Aux 2 équations 2.1.1.3 et 2.1.1.4 écrites en notations souhaitées, il faut ajouter 5 relations caractéristiques :

- $K_{rw} = f_1 (S_w)$
- $K_{ro} = f_2 (S_w, S_a)$
- $h_a - h_o = h_{cao} (S_a) \Rightarrow S_a = f_3 (h_o)$ car $P_a = 0$
- $h_c = h_o - h_w = f_4 (h_o)$
- $\omega = f_5 (h_o)$

Faust utilise un schéma DF implicite pur ; les coefficients d'échange sont évalués classiquement à l'interface entre 2 mailles ; les équations 2.1.1.3 et 2.1.1.4 montrent que ces termes s'écrivent :

$$T_\alpha = \frac{\overline{\overline{K}}_\alpha K_{r\alpha}}{d_\alpha} \text{ avec } \alpha = w, o \quad (d_w = 1)$$

Les T_α sont pondérés de la façon suivante :

- "upstream" sur $K_{r\alpha}$;
- moyenne harmonique entre 2 mailles voisines sur les termes $K_\alpha S/l$ où S est la section de la maille perpendiculaire au gradient considéré et l la dimension de la maille dans la direction du gradient (similaire aux pondérations de MARTHE).

Par analogie avec les notations de MARTHE et en se limitant à une dimension, on peut écrire l'équation 2.1.1.3 au temps $t + \Delta t$

$$\begin{aligned}
 & THW_i(ho_{i-1} - ho_i) + TBW_i(ho_{i+1} - ho_i) \\
 & - THW_i(hc_{i-1} - hc_i) - TBW_i(hc_{i+1} - hc_i) \\
 & + THW_i(Z_{i-1} - Z_i) + TBW_i(Z_{i+1} - Z_i) \\
 & = Q_w \Delta X_i \Delta Y_i \Delta Z_i + \frac{\Delta X_i \Delta Y_i \Delta Z_i}{\Delta t} \omega (S_{wi} - S_{wip})
 \end{aligned}
 \tag{2.1.1.3bis}$$

avec $S_{wi} = S_{wi}(t + \Delta t)$
 $S_{wip} = S_{wi}(t)$

et l'équation 2.1.1.4 au même temps $t + \Delta t$

$$\begin{aligned}
 & THO_i(ho_{i-1} - ho_i) + TBO_i(ho_{i+1} - ho_i) \\
 & + THO_i do_i(Z_{i-1} - Z_i) + TBO_i do_i(Z_{i+1} - Z_i) \\
 & = Q_o \Delta X_i \Delta Y_i \Delta Z_i + \omega \frac{\Delta X_i \Delta Y_i \Delta Z_i}{\Delta t} (S_{wip} - S_{wi} + S_{aip} - S_{ai})
 \end{aligned}
 \tag{2.1.1.4bis}$$

avec $S_{ai} = S_{ai}(t + \Delta t)$
 $S_{aip} = S_{ai}(t)$

et pour $\alpha = w$ ou o ,

$$\begin{aligned}
 TH\alpha_i &= \frac{2UP(Kr\alpha_{i-1}, Kr\alpha_i)}{d\alpha_i} \frac{Kx_i Kx_{i-1} \Delta Y_i \Delta Z_i \Delta Z_{i-1}}{Kx_i \Delta Z_i \Delta X_{i-1} + Kx_{i-1} \Delta Z_{i-1} \Delta X_i} \\
 TB\alpha_i &= \frac{2UP(Kr\alpha_i, Kr\alpha_{i+1})}{d\alpha_i} \frac{Kx_i Kx_{i+1} \Delta Y_i \Delta Z_i \Delta Z_{i+1}}{Kx_i \Delta Z_i \Delta X_{i+1} + Kx_{i+1} \Delta Z_{i+1} \Delta X_i}
 \end{aligned}$$

où $UP(K_1, K_2)$ désigne la valeur "upstream" sur les 2 termes K_1, K_2 (cf. § 4.1) et $d\alpha_i$ est la valeur pondérée des $d\alpha_i$, non précisée dans la publication.

• Résolution

Les équations 2.1.1.4 et 2.1.1.5 sont résolues à l'aide des relations caractéristiques a) à e) et avec la technique de linéarisation de Newton-Raphson (N.R.).

• Conditions initiales

Les valeurs de h_o et S_w doivent être données dans tout le domaine au temps initial.

• Conditions de débit

S'il y a recharge ou injection, il faut préciser les termes sources Q_w et Q_o .

S'il y a production, la masse totale produite M_t étant donnée, les fractions d'eau et de NAPL qui sont pompées sont déterminées par le rapport des mobilités des fluides

$$M_w = \alpha_w M_T = \rho_w Q_w$$

$$M_o = (1 - \alpha_w) M_T = \rho_o Q_o$$

avec

$$\alpha_w = \frac{K_{rw} \rho_w}{\mu_w} / \left(\frac{K_{rw} \rho_w}{\mu_w} + \frac{K_{ro} \rho_o}{\mu_o} \right)$$

2.1.2. Faust et al. (1989)

Pour mémoire, même schéma que Faust (1985) mais en 3D.

2.1.3. Forsyth (1988)

Même problème que les précédents avec, en plus, échange de masse entre phases.

Forsyth résout donc :

- une équation de bilan de masse pour la phase d'eau (identique à celle de Faust) ;
- une équation de bilan de masse pour le polluant qui apparaît dans les 3 phases eau, air, NAPL (avec termes de diffusion). Les pondérations spatiales sont similaires à celles utilisées par Faust.

• *Changement de variables*

Les concentrations en polluant dans les phases air et eau qui interviennent dans l'équation de bilan de masse pour le polluant sont :

$$\begin{aligned} C_o^a &= \beta_o^a \\ C_o^w &= \beta_o^w \end{aligned} \quad (o = \text{oil} = \text{polluant})$$

où les β_o^α sont les concentrations à saturation dans la phase α ; si le NAPL disparaît en tant que phase distincte, soit si S_o devient nul, les formules ci-dessus pour les concentrations ne s'appliquent plus ; de précédents auteurs utilisaient alors un pseudo β donné par β' tel que :

$$\beta_o'^w = \left(\frac{S_o}{S_o + 10^{-4}} \right) \beta_o^w$$

$$\beta_o'^a = \left(\frac{S_o}{S_o + 10^{-4}} \right) \beta_o^a$$

avec une petite valeur de S_o partout, ce qui empêchait la disparition complète de la phase de NAPL puisque la dissolution ou vaporisation complète de polluant était interdite (β' toujours $< \beta$) ; cette méthode utilisée dans les simulations de réservoir peut nécessiter de devoir choisir des tolérances extrêmement faibles pour obtenir de bons bilans de masse.

Une approche plus rigoureuse, retenue ici, est la suivante :

- si $S_o > 0$, on retient comme variables primaires P_o et S_w avec $C_o^w = \beta_o^w$ et $C_o^a = \beta_o^a$
- si au cours des itérations de Newton, on obtient $S_o < 0$ dans une maille, les variables primaires sont basculées sur P_o , C_o^w dans cette maille avec les contraintes suivantes

$$S_o = 0$$

$$C_o^a = \left(\frac{\beta_o^a}{\beta_o^w} \right) C_o^w$$

où la 2ème contrainte est une sorte de loi de Henry :

- si au cours des itérations, C_o^w devient $> \beta_o^w$, alors les variables primaires rebasculent sur P_o et S_w .

Cette approche permet à la saturation en NAPL de devenir nulle.

• Conditions aux limites

Pour s'assurer que les bonnes conditions aux limites sont imposées, la procédure suivante est utilisée : toutes les limites sont considérées comme à flux nul et on utilise des termes source pour simuler l'injection ou la production de fluide, par exemple si on veut imposer la pression P_w^* sur une limite, on mettra dans la maille voisine un terme source de la forme $W(P_w^* - P_{wi})$ avec W très grand (ex 10^{20}) et donc le terme $P_w^* - P_{wi}$ pourra être très petit pour assurer $P_{wi} = P_w^*$.

D. Thiéry nous fait remarquer que cette approche, qui ne semble pas optimale, empêche de plus d'effectuer des bilans sur les entrées/sorties (même problème avec TOUGH).

2.1.4. Kaluarachchi et Parker (1989)

L'objectif déclaré des auteurs est de montrer les effets des différentes techniques numériques utilisées sur d'une part les performances de calcul en EF, d'autre part la précision des résultats, en particulier du point de vue du bilan de masse. Comme le schéma numérique est en pressions, il est important de bien représenter les termes de capacité qui apparaissent quand on choisit ce schéma ; trois représentations différentes ont donc été testées.

• "Time weighted analytical scheme"

La relation $P_c(S_w)$ étant donnée analytiquement par le modèle de Van Genuchten, les termes de capacité :

$$C_{pq} = \omega \partial S_p / \partial h_q \quad (p, q = o, w)$$

sont aussi calculés analytiquement et pondérés entre les valeurs au pas de temps précédent k et à l'itération $k + 1$ en cours selon la formule :

$$C_{pq}^* = (1 - \Omega) C_{pq}^k + \Omega C_{pq}^{k+1}$$

où Ω est un facteur de relaxation.

• **"Mean head analytical scheme"**

$$C_{pq}^* = C_{pq}(h_w^*, h_o^*) \quad (p, q = o, w)$$

avec $h_w^* = \frac{1}{2}(h_w^k + h_w^{k+1})$

$$h_o^* = \frac{1}{2}(h_o^k + h_o^{k+1})$$

• **"Modified chord slope scheme"**

La formule SCS ou standard chord slope est donnée par :

$$C_{pq}^{k+1} = \omega \frac{\partial S_p}{\partial h_q} \Big|_{k+1} = \omega \left[\frac{S_p(h_p^{k+1}, h_q^{k+1}) - S_p(h_p^{k+1}, h_q^k)}{h_q^{k+1} - h_q^k} \right] \quad (p, q = o, w).$$

Cette formule ne permet pas une bonne convergence si les non linéarités sont très fortes, le schéma ci-dessus a donc été remplacé par le suivant ("modified") :

$$C_{pq}^* = \frac{1}{2} [C_{pq}^{k+1} + C_{pq}^k]$$

$$= \frac{\omega}{2} \left[\frac{S_p(h_p^{k+1}, h_q^{k+1}) + S_p(h_p^k, h_q^{k+1}) - S_p(h_p^{k+1}, h_q^k) - S_p(h_p^k, h_q^k)}{h_q^{k+1} - h_q^k} \right]$$

qui s'est avéré meilleur sur les tests effectués (D. Thiéry nous fait remarquer que c'est le schéma utilisé par MARTHE 5.5 en DF).

• **Mise à jour des pressions nodales h_p^r à chaque itération r**

On utilise le schéma de Cooley (1983) aussi bien avec Picard qu'avec NR, en prenant en compte à chaque itération l'erreur de convergence maximale sur le maillage soit :

$$e_p^{r+1} = \max_i |\delta_p^{r+1}| \quad i = 1, N \text{ mailles}$$

avec $\delta_p^{r+1} = h_p^{r+1} - h_p^r \quad (p = w, o)$

on pose alors

$$h_p^{r+1} = \Omega_p^{r+1} \delta_p^{r+1} + h_p^r \text{ avec } \Omega_p^{r+1} \text{ défini comme suit :}$$

- a) on pose $s_p = e_p^{r+1}/(\Omega_p^r e_p^r)$ si $k > 0$
 $s_p = 1$ si $k = 0$ (1er pas de temps)
- b) on pose $\Omega_p^* = (3 + s_p)/(3 + |s_p|)$ si $s_p \geq -1$
 $\Omega_p^* = 1/(2|s_p|)$ si $s_p < -1$
- c) alors $\Omega_p^{r+1} = \Omega_p^*$ si $|\Omega_p^* e_p^{r+1}| \leq e_p^{\max}$ donné
 $\Omega_p^{r+1} = e_p^{\max}/|e_p^{r+1}|$ si $|\Omega_p^* e_p^{r+1}| > e_p^{\max}$.

• **Schéma de Newton-Raphson**

Un exemple de développement des équations résultantes selon ce schéma, décrit au § 5.1, est donné en détails (équations 18 à 21 de la publication).

2.1.5. Kueper et Frind (1991)

• **Schéma de discrétisation**

Ces auteurs présentent un schéma 2D en DF "block-centered" en P_w , S_w .

- Equations données :

$$\nabla \left(\frac{\bar{k} K_{r\alpha}}{\mu_\alpha} (\nabla P_\alpha + \rho_\alpha g \nabla Z) \right) = \omega \frac{\partial S_\alpha}{\partial t} \quad \text{avec } \alpha = w, o$$

En posant $P_c = P_o - P_w$
 $S_o + S_w = 1$

les auteurs obtiennent 2 équations en P_w , S_w :

$$\nabla \left(\frac{\bar{k} K_{rw}}{\mu_w} (\nabla P_w + \rho_w g \nabla Z) \right) = \omega \frac{\partial S_w}{\partial t} \quad (2.1.5.1)$$

$$\nabla \left(\frac{\bar{k} K_{ro}}{\mu_o} (\nabla (P_c + P_w) + \rho_o g \nabla Z) \right) = -\omega \frac{\partial S_w}{\partial t} \quad (2.1.5.2)$$

La discrétisation du membre de gauche des équations ci-dessus est obtenue en posant :

$$\nabla P_\alpha + \rho_\alpha g \nabla Z = \Psi_\alpha$$

et donc, selon les directions horizontale X et verticale Z :

$$\Psi_{\alpha_{i+1/2,j}} = \frac{P_{\alpha_{i+1,j}} - P_{\alpha_{i,j}}}{\Delta X_{i+1/2}}$$

$$\Psi_{\alpha_{i,j+1/2}} = \frac{P_{\alpha_{i,j+1}} - P_{\alpha_{i,j}}}{\Delta Z_{j+1/2}} + \rho_{\alpha} g$$

$$\text{avec } \Delta X_{i+1/2} = X_{i+1} - X_i$$

$$\Delta Z_{j+1/2} = Z_{j+1} - Z_j$$

ce qui devrait donner une formulation de la forme :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta X_i} \left[\left(\frac{\bar{k} K_{r\alpha}}{\mu_{\alpha}} \right)_{i+1/2} \Psi_{\alpha_{i+1/2,j}} - \left(\frac{\bar{k} K_{r\alpha}}{\mu_{\alpha}} \right)_{i-1/2} \Psi_{\alpha_{i-1/2,j}} \right] \\ & + \frac{1}{\Delta Z_j} \left[\left(\frac{\bar{k} K_{r\alpha}}{\mu_{\alpha}} \right)_{j+1/2} \Psi_{\alpha_{i,j+1/2}} - \left(\frac{\bar{k} K_{r\alpha}}{\mu_{\alpha}} \right)_{j-1/2} \Psi_{\alpha_{i,j-1/2}} \right] \end{aligned}$$

avec ΔX_i , ΔZ_j dimensions de la maille (i, j).

Or les auteurs obtiennent la formulation suivante :

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\bar{k} K_{r\alpha}}{\mu_{\alpha}} \right)_{i+1/2} \frac{\Psi_{\alpha_{i+1/2,j}}}{\Delta X_{i+1/2}} - \left(\frac{\bar{k} K_{r\alpha}}{\mu_{\alpha}} \right)_{i-1/2} \frac{\Psi_{\alpha_{i-1/2,j}}}{\Delta X_{i-1/2}} \\ & + \left(\frac{\bar{k} K_{r\alpha}}{\mu_{\alpha}} \right)_{j+1/2} \frac{\Psi_{\alpha_{i,j+1/2}}}{\Delta Z_{j+1/2}} - \left(\frac{\bar{k} K_{r\alpha}}{\mu_{\alpha}} \right)_{j-1/2} \frac{\Psi_{\alpha_{i,j-1/2}}}{\Delta Z_{j-1/2}} \end{aligned}$$

qui nous paraît bizarre pour des DF "block centered".

Le schéma est implicite pur avec des pondérations "upstream" sur les perméabilités relatives et harmoniques sur les perméabilités intrinsèques.

• Résolution

Les équations discrétisées comme indiqué ci-dessus sont linéarisées par la technique "full" N.R. La matrice résultante est de la forme :

$$[J]^k (X)^{k+1} = B^k$$

$[J]^k$ est la matrice jacobienne carrée, d'ordre $2N$ pour N mailles, NON symétrique, calculée à l'itération précédente,

(X) est le vecteur d'ordre $2N$ des inconnues ΔP_w et ΔS_w (cf. § 5.1).

La matrice jacobienne a une structure de bloc pentadiagonale comme indiqué sur la figure 4 (extraite de la publication) :

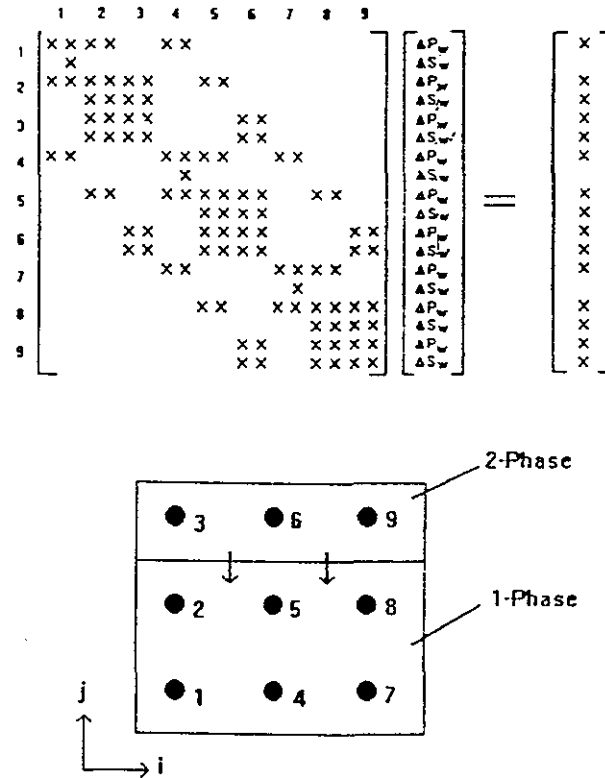


Fig. 4 - Finite difference grid and associated incidence matrix for example nine-node grid. Nonwetting fluid is moving vertically downward and presently occupying the top row of nodes only.

Le schéma d'ordonnancement situant l'équation pour le fluide mouillant avant celle pour le fluide non mouillant permet de n'avoir que des termes non nuls sur la diagonale, que les deux fluides soient présents en même temps ou non.

Dans l'exemple ci-dessus, la première ligne donne l'équation du fluide mouillant au centre de la maille 1 en fonction de ΔP_{w1} , ΔS_{w1} , ΔP_{w2} , ΔS_{w2} , ΔP_{w4} , ΔS_{w4} , la deuxième ligne, correspondant à l'équation du fluide non mouillant *absent de la maille 1* se réduit à $\Delta S_{w1} = 0$, quel que soit le coefficient sur la diagonale qui peut donc être > 0 .

• **Conditions initiales**

Il faut définir S_w et P_w au temps initial partout dans le modèle que la phase NAPL soit présente ou non.

• **Conditions aux limites**

Il faut donner au moins une CL en pression ou débit pour chaque variable indépendante, sur les limites du domaine de simulation ; la définition de P_w et S_w entraîne celle de P_o et P_c sur les mêmes frontières.

2.1.6. Abriola et Rathfelder (1993)

Ces auteurs traitent aussi du diphasique 2D immiscible eau-NAPL, pour lesquels ils testent 2 schémas de type DF :

- un schéma en P_w , P_o avec moyenne arithmétique sur les coefficients d'échanges ;
- un schéma en P_o , S_w avec encore moyenne arithmétique sur les coefficients, sinon comme Faust (1985).

Dans le premier schéma, la dérivée $\frac{\partial S_\alpha}{\partial t}$ est approchée par la formule SCS ("standard chord slope" cf. § 2.1.4).

$$\frac{\partial S_\alpha}{\partial t} = \frac{\partial S_\alpha}{\partial P_c} \frac{\partial P_c}{\partial t}$$

$$\frac{\partial S_\alpha}{\partial P_c} \simeq \frac{S_\alpha^{t+\Delta t} - S_\alpha^t}{P_c^{t+\Delta t} - P_c^t}$$

De nouveaux schémas sont développés pour les EF.

Les bilans de masse obtenus pour les tests en milieu homogène 1D à maillage uniforme, avec les schémas qui préservent le développement du terme de capacité donnent des bilans de masse qualifiés de bons, mais qui peuvent quand même atteindre 5%.

2.2. DIPHASIQUE EAU-GAZ

2.2.1. Morel-Seytoux et Billica (1985a et b)

• **Schéma de résolution**

L'approche du "fractional flow" est présentée ici brièvement malgré son peu d'intérêt pratique ; partant de l'équation de Darcy pour chaque fluide, l'eau et l'air ($\alpha = w, a$)

$$V_\alpha = - \frac{\bar{k} K_{r\alpha}}{\mu_\alpha} \left(\frac{\partial P_\alpha}{\partial Z} - \rho_\alpha g \varepsilon \right) \quad (\bar{Z} \text{ orienté vers le bas})$$

où $\varepsilon = \sin \beta$ angle de l'écoulement d'eau avec l'horizontale,

on définit comme variables indépendantes :

$$h_\alpha = \frac{P_\alpha}{\rho_w g} \quad (\alpha = w, a)$$

qui sont les pressions d'air et d'eau en hauteur d'eau équivalente :

$$\text{on a alors} \quad v_w = \bar{K} K_{rw} \left(\varepsilon - \frac{\partial h_w}{\partial Z} \right) \text{ avec } \bar{K} = \frac{\bar{k} \rho_w g}{\mu_w}$$

$$\text{et} \quad v_a = \bar{K} \frac{\mu_w}{\mu_a} K_{ra} \left(\varepsilon \frac{\rho_a}{\rho_w} - \frac{\partial h_a}{\partial Z} \right) \cong - \bar{K} \frac{\mu_w}{\mu_a} K_{ra} \frac{\partial h_a}{\partial Z}$$

car la masse spécifique de l'air étant faible par rapport à celle de l'eau, le terme de gravité peut être négligé ; la vitesse totale est alors $v = v_w + v_a$

$$\text{soit } -\bar{K} \left(K_{rw} + \frac{\mu_w}{\mu_a} K_{ra} \right) \frac{\partial h_a}{\partial Z} + \bar{K} K_{rw} \frac{\partial h_c}{\partial Z} + \varepsilon \bar{K} K_{rw}$$

avec $h_c = h_a - h_w$

$$\text{On définit } f_w = \frac{K_{rw} / \mu_w}{K_{rw} / \mu_w + K_{ra} / \mu_a} \text{ et la viscosité relative totale } \mu_r = \frac{f_w}{K_{rw}}$$

ainsi que la "fractional flow function" F , ratio de la vitesse de l'eau à la vitesse totale $F_w \approx \frac{v_w}{v}$

alors

$$\frac{v_w}{\bar{K} K_{rw}} \approx \frac{v F_w}{\bar{K} K_{rw}} = \varepsilon - \frac{\partial h_w}{\partial Z}$$

$$\frac{v_a}{\bar{K} K_{rw} \frac{\mu_w}{\mu_a}} = \frac{(1 - F_w)v}{\bar{K} K_{ra} \frac{\mu_w}{\mu_a}} = - \frac{\partial h_a}{\partial Z}$$

"after some algebra", on obtient :

$$F_w = f_w + \frac{\bar{K}}{v} K_{rw} (1 - f_w) \left(\varepsilon + \frac{\partial h_c}{\partial Z} \right)$$

on définit maintenant la "gravity function" $G(\theta) = \varepsilon \bar{K} K_{rw} (1 - f_w) = \varepsilon K(\theta) (1 - f_w)$

où $K(\theta)$ est la conductivité hydraulique classique en non saturé, $\bar{K}$ étant la valeur à saturation

et la "capillary function" $E(\theta) = -K(\theta) \frac{\partial h_c}{\partial \theta} (1 - f_w) = D(\theta) (1 - f_w)$

où $D(\theta)$ est l'habituelle diffusivité en non saturé ; alors on a :

$$F_w = f_w + \frac{G}{v} - \frac{E}{v} \frac{\partial \theta}{\partial Z}$$

$$\text{et } v_w = v F_w = -K(\theta) \frac{\partial h_a}{\partial Z} + \varepsilon K(\theta) - D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial Z}$$

- *Equation de conservation de la masse pour l'eau*

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial v_w}{\partial Z} = 0 \text{ (en négligeant la compressibilité de l'eau)}$$

- *Equation de conservation de la masse pour l'air*

$$\frac{\partial(\rho_a \theta_a)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_a v_a)}{\partial Z} = 0$$

* Si le sol est indéformable et l'air non confiné, c'est-à-dire dans le cas d'une colonne semi-infinie, le terme $\frac{\partial v}{\partial Z}$ est nul ;

si de plus le sol est homogène, on arrive pour v , vitesse totale, à une expression de la forme suivante (en intégrant entre 2 niveaux 1 et 2)

$$v = \overline{K} \left(h_{a1} - h_{a2} + H_c(\theta_1, \theta_2) + \varepsilon \int_1^2 f_w dz \right) \left(\int_1^2 \mu_r dz \right)^{-1} \text{ où } H_c(\theta_1, \theta_2) = \int_1^2 f_w dh_c \quad (2.2.1.1)$$

par substitution de l'expression pour la vitesse de l'eau dans l'équation de continuité, on obtient :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial Z} \left(v f_w + G - E \frac{\partial \theta}{\partial Z} \right) = 0 \quad (2.2.1.2)$$

équation aux dérivées partielles avec pour inconnues v et θ qui dépend de v .

Pour une colonne non déformable semi-infinie, v ne dépend que du temps et la résolution simultanée de 2.2.1.1 et 2.2.1.2 donne le profil de teneur en eau pour un temps donné.

* Dans le cas d'une colonne finie à fond imperméable, v n'est plus uniforme :

$$\frac{\partial v}{\partial Z} \neq 0 \quad (v = 0 \text{ au bas de la colonne, } v \neq 0 \text{ en haut})$$

on doit résoudre simultanément :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial Z} \left(v f_w + G - E \frac{\partial \theta}{\partial Z} \right) = 0 \quad (2.2.1.2)$$

$$\frac{\partial v}{\partial Z} = -\frac{1}{h_a} \left(\theta_a \frac{\partial h_a}{\partial t} + v_a \frac{\partial h_a}{\partial Z} \right) \quad (2.2.1.3)$$

Les détails sont donnés dans la publication (Morel-Seytoux et Billica (1985b)).

• **Description algébrique des équations**

Le schéma DF est donné, il est possible de choisir une pondération explicite, implicite ou Crank-Nicolson, la méthode itérative utilisée n'est pas précisée.

• **Description algébrique des CL**

Elle est donnée ainsi que le traitement des différentes conditions physiques à la surface (pluie, évaporation, etc.) que nous ne détaillerons pas ici.

• **Passage à l'approche monophasique**

Le schéma numérique diphasique peut être utilisé pour résoudre le cas monophasique habituel ; en effet si $f_w(\theta) = 0$ (mobilité de l'air $\rightarrow \infty$)

$$\begin{aligned} \text{alors } G(\theta) &\rightarrow \varepsilon K(\theta) \\ E(\theta) &\rightarrow D(\theta) \end{aligned}$$

$$v_w = \varepsilon K(\theta) - D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial Z} = K(\theta) \left(\varepsilon - \frac{\partial h_c}{\partial Z} \right)$$

et l'équation pour la vitesse de l'eau devient l'équation familière en ZNS.

2.2.2. Sleep et Sykes (1989)

• **Schéma de résolution**

On considère 2 équations d'écoulement, pour les phases aqueuse et gazeuse, la phase NAPL étant immobile.

- Pour l'eau, l'approche ZNS classique est utilisée c'est-à-dire qu'on suppose que les variations de pression de la phase gazeuse et la viscosité de l'écoulement de l'air n'ont que peu d'effet sur l'écoulement de l'eau (opposé aux conclusions de Morel-Seytoux et Billica (1985a et b) ci-dessus) ; on suppose également que malgré la dissolution d'huile, la densité est constante et on obtient donc l'équation de Richards.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[K_{w_{ij}} K_{rw} \left(\frac{\partial h_w}{\partial x_j} + \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \right] + q'_w = C' \frac{\partial h_w}{\partial t} \quad (2.2.2.1)$$

dans laquelle l'inconnue est $h_w = \frac{P_w}{\rho_w g}$ la pression en hauteur d'eau, $C' = \omega \frac{\partial S_w}{\partial h_w}$ est la capacité capillaire et $K_{w_{ij}}$ est la conductivité hydraulique.

- Pour le gaz, on suppose que les pressions sont indépendantes des variations de pression d'eau c'est-à-dire que les 2 équations d'écoulement ne sont couplées que par la relation sur les saturations :

$$S_w + S_g + S_o = 1$$

Les concentrations de polluant dans la phase gazeuse sont suffisamment importantes pour qu'on ne puisse pas considérer la masse volumique ρ_g comme constante ; on prend pour variable indépendante la hauteur d'air équivalente pour le gaz (air + vapeurs de NAPL) soit :

$$h_a^* = P_g / (\rho_a g) + Z$$

on obtient une équation d'écoulement faisant apparaître le terme $\rho_r = \rho_g / \rho_a - 1$.

La viscosité est supposée peu différente de celle de l'air et la conductivité hydraulique de l'air $K_{a_{ij}}$ est introduite dans l'équation d'écoulement :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[K_{a_{ij}} K_{rg} \rho_g \left(\frac{\partial h_a^*}{\partial x_j} + \rho_r \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \right] + q'_g = \omega \left(S_g \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \rho_g \frac{\partial S_g}{\partial t} \right)$$

On suppose maintenant que les variations de masse volumique de la phase gazeuse dues à la compressibilité du gaz sont faibles devant celles dues aux concentrations de vapeur organique :

$$\rho_g \cong \rho_a + c_g \left(1 - \frac{\rho_a}{\rho_v} \right)$$

où ρ_v est la masse volumique de la vapeur organique pure, on obtient donc l'équation d'écoulement suivante :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[K_{a_{ij}} K_{rg} \rho_g \left(\frac{\partial h_a^*}{\partial x_j} + \rho_r \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \right] + \omega S_g \lambda_v (C_{gm} - C_g) \quad (2.2.2.2)$$

$$+ \omega S_g \lambda_H (H_{cw} - C_g) + q'_g = \omega \left(S_g \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \rho_g \frac{\partial S_g}{\partial t} \right)$$

où les λ_i sont des coefficients de transfert.

Transport par l'eau : la densité étant supposée constante, on obtient l'équation linéaire suivante pour la concentration de polluant en solution :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\omega S_w D_{ij} \frac{\partial C_w}{\partial x_j} \right] - v_{wi} \frac{\partial C_w}{\partial x_i} + q'_w (C_w^* - C_w) = \omega S_w \frac{\partial C_w}{\partial t} \quad (2.2.2.3)$$

où C_w^* est la concentration de soluté dans le terme source et D_{ij} le tenseur de dispersion classique.

Transport par le gaz : on obtient une équation non linéaire puisque la masse volumique ρ_g est fonction de la concentration de polluant C_g volatilisé :

$$\frac{\rho_g}{\rho_a} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\omega S_g D_{ij} \frac{\partial C_g}{\partial x_j} \right] - v_{gi} \frac{\partial C_g}{\partial x_i} + q'_g (C_g^* - C_g) = \omega S_g \frac{\partial C_g}{\partial t}$$

Comme les coefficients de diffusion moléculaire des gaz sont de 4 ou 5 ordres de grandeur plus élevés que ceux des liquides, la diffusion moléculaire est importante pour les substances organiques volatiles.

Si l'on peut admettre que $\rho_g \neq \rho_a$, on peut linéariser l'équation ci-dessus :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\omega S_g D_{ij} \frac{\partial C_g}{\partial x_j} \right] - v_{gi} \frac{\partial C_g}{\partial x_i} + q'_g (C_g^* - C_g) = \omega S_g \frac{\partial C_g}{\partial t} \quad (2.2.2.4)$$

Des sources importantes de NAPL proviennent des processus de dissolution/vaporisation avec partition entre les 2 phases ; la valeur de C_w^* dans 2.2.2.3 est la concentration de source du liquide organique pur qui est beaucoup plus grande que la concentration C_w dans la phase aqueuse ; on peut donc écrire :

$$q'_w (C_w^* - C_w) \cong q'_w C_w^* = \omega S_w \lambda_D (C_{wm} - C_w) + \omega S_g \lambda_H (C_g - H_{cw})$$

maintenant si q'_w représente le terme source dû uniquement à un pompage ou une injection, on obtient l'équation suivante pour le transport par l'eau :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\omega S_w D_{ij} \frac{\partial C_w}{\partial x_j} \right) - v_{wi} \frac{\partial C_w}{\partial x_i} + \omega S_w \lambda_D (C_{wm} - C_w) \\ & + \omega S_g \lambda_H (C_g - H_{cw}) + q'_w (C_w^* - C_w) = \omega S_w \frac{\partial C_w}{\partial t} \end{aligned}$$

Un raisonnement similaire conduit à une équation similaire pour le transport par le gaz :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\omega S g D_{ij} \frac{\partial C_g}{\partial x_j} \right) - v_{gi} \frac{\partial C_g}{\partial x_i} + \omega S g \lambda_v (C_{gm} - C_g) \\ + \omega S g \lambda_H (H_{cw} - C_g) + q'_g (C_g^* - C_g) = \omega S g \frac{\partial C_g}{\partial t} \end{aligned}$$

Les 2 équations de transport ci-dessus sont couplées par les termes de partition du NAPL entre phases aqueuse et gazeuse.

• **Conditions initiales**

Elles sont fixées par les valeurs initiales des 4 variables pressions et concentrations :

$$\begin{aligned} h_w(x_i, 0) &= h_{wo}(x_i) \\ h_a^*(x_i, 0) &= h_{ao}^*(x_i) \\ c_w(x_i, 0) &= c_{wo}(x_i) \\ c_g(x_i, 0) &= c_{go}(x_i). \end{aligned}$$

• **Conditions aux limites**

Elles sont de type Dirichlet ou Neuman sur les pressions

$$\begin{aligned} h_w(\Gamma_1, t) &= h_{wc} \text{ sur limite } \Gamma_1 \\ h_a^*(\Gamma_1, t) &= h_{ac}^* \text{ sur limite } \Gamma_1 \end{aligned}$$

ou :

$$-\left[K_{w_{ij}} K_{rw} \left(\frac{\partial h_w}{\partial x_j} + \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \right] n_i = v_{wn} \text{ sur limite } \Gamma_2$$

$$-\left[K_{a_{ij}} K_{ra} \left(\frac{\partial h_a^*}{\partial x_j} + \rho_r \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \right] n_i = v_{an} \text{ sur limite } \Gamma_2$$

et de type Dirichlet ou Cauchy sur les concentrations :

$$\begin{aligned} C_w(\Gamma_3, t) &= C_{wc} \text{ sur limite } \Gamma_3 \\ C_g(\Gamma_3, t) &= C_{gc} \text{ sur limite } \Gamma_3 \end{aligned}$$

ou

$$\left(-\omega S w D_{ij} \frac{\partial C_w}{\partial x_j} + v_{wi} C_w \right) n_i = v_{wn} C_{wo} \text{ sur limite } \Gamma_4$$

$$\left(-\omega S g D_{ij} \frac{\partial C_g}{\partial x_j} + v_{gi} C_g \right) n_i = v_{gn} C_{go} \text{ sur limite } \Gamma_4$$

Le schéma en EF correspondant à la formulation Galerkin standard n'est pas donné par les auteurs.

2.2.3. Moridis et Reddell (1991)

• Schéma de résolution

Précisons quelques termes :

- $\lambda_\ell = \frac{K_{r\ell} \bar{k}}{\mu_\ell B_\ell}$ est le coefficient d'échange (la "transmissibility" des pétroliers) pour chaque fluide, $\ell = w, a$
- B_ℓ est la compressibilité (le " formation volume factor" des pétroliers) de chaque fluide, $\ell = w, a$
- β_ℓ son inverse $1/B_\ell$ pour chaque fluide, $\ell = w, a$.

On obtient alors pour un écoulement diphasique isotherme, immiscible, à l'équilibre chimique et thermodynamique entre phases, avec la porosité indépendante de la pression, les équations d'écoulement suivantes :

$$\nabla(\lambda_a(\nabla P_a - \gamma_a \nabla Z)) = \left(S_a \omega \frac{\partial \beta_a}{\partial P_a} \right) \frac{\partial P_a}{\partial t} + \omega \beta_a \frac{\partial S_a}{\partial t} + q_a \quad \text{en } P_a, S_a \text{ pour l'air} \quad (2.2.3.1a)$$

$$\begin{aligned} \nabla(\lambda_w(\nabla P_a - \nabla P_c - \gamma_w \nabla Z)) = & \left((1 - S_a) \omega \frac{\partial \beta_w}{\partial P_w} \right) \frac{\partial P_a}{\partial t} - \\ & \left(\left((1 - S_a) \omega \frac{\partial \beta_w}{\partial P_w} \right) \frac{\partial P_c}{\partial S_a} + \omega \beta_w \right) \frac{\partial S_a}{\partial t} + q_w \quad \text{en } P_a, P_c, S_a \text{ pour l'eau} \end{aligned} \quad (2.2.3.1b)$$

de ces 2 équations, celle de l'air est plus fortement non linéaire que l'autre du fait de la grande sensibilité des propriétés de l'air aux variations de pression.

• Discrétisation temporelle

La discrétisation temporelle des membres de droite des équations ci-dessus amène à définir :

$$\bar{S}_a = \frac{1}{2}(S_a^{n+1} + S_a^n) \quad \bar{\beta}_a = \frac{1}{2}(\beta_a^{n+1} + \beta_a^n)$$

$$\beta'_a = \frac{\beta_a^{n+1} - \beta_a^n}{P_a^{n+1} - P_a^n} \quad (\text{chord slope}) \text{ et de même pour } \beta_w \beta'_w$$

$$\text{et} \quad ANP = \frac{\omega}{\Delta t^{n+1}} \bar{S}_a \beta'_a$$

$$ANS = \frac{\omega}{\Delta t^{n+1}} \bar{\beta}_a$$

$$AWP = \frac{\omega}{\Delta t^{n+1}} (1 - \bar{S}_a) \beta'_w$$

$$AWS = - \frac{\omega}{\Delta t^{n+1}} \left((1 - \bar{S}_a) \beta'_w P'_c + \bar{\beta}_w \right)$$

avec $P'_c = \frac{P_c^{n+1} - P_c^n}{S_a^{n+1} - S_a^n}$ (chord slope),

les membres de droite des équations 2.2.3.1a et 2.2.3.1b devenant donc respectivement :

$$ANP (\Delta P_a^{n+1}) + ANS (\Delta S_a^{n+1})$$

$$AWP (\Delta P_a^{n+1}) + AWS (\Delta S_a^{n+1})$$

• **Discretisation spatiale**

On travaille en DF "block-centered" ; on pose donc :

$$\phi_{ai} = (P_a - \gamma_a h)_i \quad (h \text{ épaisseur de l'aquifère})$$

$$\Delta \phi_{ai}^\pm = (\phi_a)_{i\pm 1} - \phi_{ai}$$

si λX est le coefficient d'échange selon X, on obtient selon cette direction :

$$\frac{\partial}{\partial X} \left(\lambda X_a \left(\frac{\partial P_a}{\partial X} - \frac{\partial h \gamma_a}{\partial X} \right) \right) = APNX_i \Delta \phi_{ai}^- + CPNX_i \Delta \phi_{ai}^+$$

où $APNX_i = \frac{(\lambda X_a)_{i-1/2}}{\Delta X_i \Delta X_{i-1/2}}, CPNX_i = APNX_i \frac{\Delta X_{i+1}}{\Delta X_i}$

(et de façon similaire en Y et Z) ;

si on appelle GNX, GNY et GNZ les termes de gravité avec par exemple :

$$GNX_i = \frac{1}{2} \left[\left(\gamma_a \Delta X \frac{\partial h}{\partial X} \right)_{i-1} + \left(\gamma_a \Delta X \frac{\partial h}{\partial X} \right)_i \right]$$

on obtient finalement les équations pour chaque phase mouillante et non mouillante qui ne dépendent que des coefficients qui viennent d'être définis (équations 66 et 67 de M. et R. 91a) :

$$\begin{aligned} & APWX [(P_a - P_c)_{i-1} - (P_a - P_c)_i + GWX_i]^{n+1} \\ & + CPWX [(P_a - P_c)_{i+1} - (P_a - P_c)_i - GWX_{i+1}]^{n+1} \\ & + APWY [(P_a - P_c)_{j-1} - (P_a - P_c)_j + GWY_j]^{n+1} \\ & + CPWY [(P_a - P_c)_{j+1} - (P_a - P_c)_j - GWY_{j+1}]^{n+1} \\ & + APWZ [(P_a - P_c)_{k-1} - (P_a - P_c)_k + GWZ_k]^{n+1} \\ & + CPWZ [(P_a - P_c)_{k+1} - (P_a - P_c)_k - GWZ_{k+1}]^{n+1} \\ & = AWP (P_a^{n+1} - P_a^n) + AWS (S_a^{n+1} - S_a^n) + q_w \end{aligned} \quad (2.2.3.2a)$$

$$\begin{aligned}
 & \text{APNX} [(P_a)_{i-1} - (P_a)_i + \text{GNX}_i]^{n+1} \\
 & + \text{CPNX} [(P_a)_{i+1} - (P_a)_i - \text{GNX}_{i+1}]^{n+1} \\
 & + \text{APNY} [(P_a)_{j-1} - (P_a)_j + \text{GNY}_j]^{n+1} \\
 & + \text{CPNY} [(P_a)_{j+1} - (P_a)_j - \text{GNY}_{j+1}]^{n+1} \\
 & + \text{APNZ} [(P_a)_{k-1} - (P_a)_k + \text{GNZ}_k]^{n+1} \\
 & + \text{CPNZ} [(P_a)_{k+1} - (P_a)_k - \text{GNZ}_{k+1}]^{n+1} \\
 & = \text{ANP}(P_a^{n+1} - P_a^n) + \text{ANS}(S_a^{n+1} - S_a^n) + q_a
 \end{aligned} \tag{2.2.3.2b}$$

où les variables indépendantes sont P_a^{n+1} et $\Delta S_a^{n+1} = S_a^{n+1} - S_a^n$.

• **Pondérations spatiales**

On différencie les faibles et fortes non-linéarités (cf. § 3.3.2) ; l'analyse des auteurs, suivant celle de Aziz et Settari (1979) aboutit à prendre les moyennes harmoniques sur les coefficients d'échange et la pondération upstream sur les perméabilités relatives.

• **Pondérations temporelles**

- Les non-linéarités dues à la pression capillaire sont introduites par des termes de la forme

$$\text{APp}d^{n+1}(P_c^{n+1}) \quad (d = X, Y, Z, p = N, W)$$

ces non-linéarités peuvent devenir très prononcées au voisinage de l'interface immiscible eau-air (surface libre) ;

- les non-linéarités dues aux termes d'accumulation sont introduites par des termes de la forme :

$$\text{ApP}(\Delta P_a^{n+1}), \text{ApS}(\Delta S_a^{n+1}) \quad (p = N, W)$$

les dérivées β'_a, β'_w, P'_c représentées par des cordes entre les pas de temps n et $n+1$ sont traitées par simple itération qui évalue leur valeur à l'itération v du pas de temps $n+1$ quand l'itération courante est $v+1$:

$$\beta'_\ell = \frac{(\beta_\ell^{n+1})^{v+1} - \beta_\ell^n}{(P_\ell^{n+1})^{v+1} - P_\ell^n} \cong \frac{(\beta_\ell^{n+1})^v - \beta_\ell^n}{(P_\ell^{n+1})^v - P_\ell^n} \quad (\ell = a, w)$$

et de même pour $P'_c = \partial P_c / \partial S_a$

P'_c peut poser des problèmes pour les grands ΔS_a (peut converger très lentement) ;

les termes $\bar{S}_a, \bar{\beta}_\ell$ sont habituellement donnés par :

$$\bar{\beta}_\ell = \frac{1}{2} \left[(\beta_\ell^{n+1})^{v+1} + \beta_\ell^n \right] \cong \frac{1}{2} \left[(\beta_\ell^{n+1})^v + \beta_\ell^n \right] \quad (\ell = a, w)$$

$$\text{et} \quad \bar{S}_a = \frac{1}{2} \left[(S_a^{n+1})^{v+1} + S_a^n \right] \cong \frac{1}{2} \left[(S_a^{n+1})^v + S_a^n \right]$$

expressions valables pour des pressions et des ΔS_a pas trop grands ainsi que pour de faibles compressibilités ; les auteurs introduisent de nouvelles approximations de la forme :

$$\bar{\beta}_\ell = \frac{1}{2} \left[2\beta_\ell^n + \beta'_\ell (P_\ell^{n+1} - P_\ell^n) \right] \quad (\ell = a, w)$$

$$\bar{S}_a = \frac{1}{2} \left[2S_a^n + \Delta S_a^{n+1} \right]$$

qui se sont révélées à l'usage plus performantes pour le problème considéré. On introduit ces expressions dans les termes ANP, ANS, AWP, AWS des équations 2.2.3.2a et 2.2.3.2b ; on obtient donc des non-linéarités qu'il faut traiter avec précaution de façon à maintenir un bon bilan de masse ; pour ce faire on emploie la méthode semi-implicite de Nolen et Berry (cf. § 3.3.2b).

• *Traitement des CL*

- au puits d'injection d'air et de pompage d'eau : l'écoulement simultané des 2 phases ne peut se produire que si la pression capillaire décroît à la valeur dans le puits, habituellement proche de 0 ; ce phénomène s'appelle le "outlet effect" ; la saturation doit atteindre la valeur S_{a0} qui correspond à $P_c = 0$; la zone influencée par le "outlet effect", petite devant la taille du réservoir, peut devenir importante quand l'écoulement est principalement déterminé par les pressions capillaires, ce qui est le cas pendant la phase d'attente du processus de "secondary recovery" décrit ici. Pour simuler correctement le "outlet effect" durant la phase de récupération, le puits est représenté par des mailles à très grande perméabilité verticale ce qui permet de simuler de façon satisfaisante les grandes vitesses des fluides dans le puits ; les perméabilités horizontales des mailles de puits sont les mêmes que celles de la formation poreuse mais les courbes caractéristiques utilisées dans le puits sont différentes de celles de la formation de façon que la pression capillaire reste nulle quelle que soit la valeur de S_a dans le puits ; après cessation de l'injection d'air, le puits est mis en contact avec une pression constante (atmosphérique), à saturation constante ($S_a = 1$) ; pour ce faire, une porosité très grande ($10^{15} - 10^{20}$) est imposée à la maille supérieure de puits en même temps que la pression atmosphérique et la saturation $S_a = 1$ sont imposées ; durant l'injection, la maille qui porte les CL est isolée du reste du système en imposant les perméabilités à 0 dans toutes les directions ; quand cesse l'injection, la communication est rétablie en redonnant leurs vraies valeurs aux perméabilités de la maille limite. L'injection d'air à un taux constant ne présente pas de difficulté particulière et est simulée par un terme source q_a en une (ou plusieurs) maille(s) du puits ;
- aux limites externes : des limites à flux nul sont imposées à toutes les limites du modèle ; là encore, on introduit une très grande porosité artificielle pour simuler l'absence de flux à la limite.

• *Traitement des CI*

A l'instant initial, l'aquifère est en équilibre statique pour les deux phases dont les pressions ne dépendent donc que de la profondeur $dP_\ell/dZ = \gamma_\ell$ ($\ell = a, w$)

Les CI sont déterminées par la séquence de calculs suivante :

- les différences sur le terme de gravité entre les mailles sur une verticale sont évaluées en utilisant les expressions :

$$GNZ = \frac{1}{2} [(\gamma_a \Delta Z)_{k-1} + (\gamma_a \Delta Z)_k]$$

et GWZ similaire.

Pour la phase aqueuse continue sur toute l'épaisseur considérée, il n'y a pas de problème car la saturation est une fonction continue et on peut utiliser l'expression ci-dessus telle quelle ; pour la phase gazeuse, c'est plus compliqué car la saturation en air passe brutalement à 0 au niveau de la surface libre ; au-dessus l'air est un continuum et GNZ peut être utilisé, en-dessous, où il n'y a pas d'air, on suppose que la "pseudo densité" de la phase gazeuse correspond à celle de l'eau et pour la maille contenant l'interface, on utilise une expression pondérée entre la vraie densité et la "pseudo densité" de l'air c'est-à-dire que :

- pour les mailles au-dessus de l'interface $GNZ = GNZ$;

- à l'interface $GNZ = \overline{GNZ}$

$$\text{avec} \quad \overline{GNZ}_k = \frac{1}{2} [(\gamma_a \Delta Z)_{k-1} + (\gamma_a \Delta Z_T + \gamma_w \Delta Z_B)_k]$$

où ΔZ_T et ΔZ_B représentent les portions de ΔZ pour la maille interface qui sont respectivement au-dessus et au-dessous de celui-ci ;

- pour les mailles au-dessous de l'interface $GNZ = GWZ$;
- la distribution de pression est déterminée en partant de l'interface eau-air où la pression est atmosphérique pour un aquifère non captif ; on intègre donc l'expression :

$$P_\ell = P_{atm} + \int_{Z_i}^Z \gamma_\ell(Z) dZ \quad (\ell = a, w)$$

où Z_i est la cote de l'interface; sachant qu' à l'interface $P_c = 0$, on a les valeurs suivantes pour les 2 phases

$$P_{\ell int} = P_{atm} + \gamma_w \Delta Z_B - \gamma_a \Delta Z_T \quad \text{pour } \ell = a$$

$$P_{\ell int} = P_{atm} + \gamma_w (\Delta Z_B - \Delta Z_T) \quad \text{pour } \ell = w$$

à partir de ces formules, on définit :

- en dessous de l'interface

$$(P_\ell)_k = (P_\ell)_{k-1} + GpZ_k$$

- et au-dessus :

$$(P_\ell)_k = (P_\ell)_{k+1} - GpZ_{k+1}$$

avec $\ell = a$ pour $p = N$ dans GpZ
 $\ell = w$ pour $p = W$ dans GpZ

la dépendance de la pression par rapport à la densité, à travers les termes GNZ et GWZ est particulièrement prononcée pour l'air et nécessite 2 ou 3 itérations pour assurer la convergence ;

- la différence $P_a - P_w$ étant par définition la pression capillaire, la relation $P_c(S_a)$ fournie de façon univoque par la courbe de drainage permet de calculer les saturations initiales dans l'aquifère.

Cette approche garantit, d'après les auteurs, des conditions initiales stables.

• Résolution

La première approche consiste à laisser les coefficients non-linéaires être en retard d'un pas de temps ou d'une itération du nouveau pas de temps (ou les deux) sur l'itération en cours du pas de temps de calcul, c'est-à-dire que :

- pour les coefficients d'échange, on prend :

$$(APpd)^{n+1} = ((APpd)^{n+1})^v$$

$$CPpd = (CPpd)^n$$

(p = N, W et d = X, Y, Z)

- pour les pressions capillaires, on prend :

$$(P_c^{n+1})^{v+1} = (P_c^{n+1})^v$$

- pour les termes de gravité, on prend :

$$(Gdp^{n+1})^{v+1} = (Gdp^{n+1})^v$$

On arrive donc à un système en P_a et ΔS_a , correspondant à une formulation explicite en coefficients d'échange (cf. § 3.3.2b).

Les auteurs constatent que la complexité numérique et les très fortes non linéarités liées à l'injection de l'air nécessitent de passer à une méthode SS implicite, la meilleure technique utilisable pour représenter les coefficients implicites s'avère être celle de Nolen et Berry (cf. § 3.3.2b) ; on donne ci-après les grandes lignes du développement numérique qui est fort bien détaillé dans les publications référencées et correspond à la prise en compte de 3 niveaux d'"implicitness" ;

- coefficients d'écoulement implicites : le traitement est différent pour la phase non mouillante (air) de ce qu'il est pour la phase mouillante (eau) du fait des différences de compressibilité.

a/ phase non mouillante

les termes de la forme $APNX^{n+1}$ sont développés à partir de $APNX^n$ en série de Taylor à l'ordre 1 (cf. M. et R., 91, b) ;

$$APNX^{n+1} = APNX^n + DNXDS (\Delta S_{ai}^{n+1}) + DNXDSM (\Delta S_{ai-1}^{n+1}) \\ + DNXDP (P_a^{n+1} - P_a^n)_i + DNXDPM (P_a^{n+1} - P_a^n)_{i-1}$$

$$\text{avec, par exemple, } DNXDS = \left(\frac{\partial(APNX)}{\partial S_a} \right)_i = C_F (f_1^a)^n \left(\frac{dKra}{dS_a} \right)_i$$

le coefficient $APNX^n$ au pas de temps précédent étant évalué à partir de la valeur upstream de K_{ra} en considérant la maille qui est upstream au temps $n+1$; cette formulation permet d'éliminer les problèmes sérieux qui peuvent se poser en cas de changement de sens de l'écoulement durant la simulation ; de même le terme de gravité est calculé par simple itération, en retard d'une itération sur le calcul en cours

$$(GNX_i^{n+1})^{v+1} \# (GNX_i^{n+1})^v$$

b/ phase mouillante

sa compressibilité étant beaucoup plus faible, la dépendance de ses propriétés par rapport à la pression ne crée pas de gros problèmes ; on peut donc négliger les dérivées des coefficients d'écoulements par rapport à la pression, il ne reste dans le développement de Taylor que les dérivées par rapport à ΔS_a ; par exemple, le terme $APWX^{n+1}$ se développe comme suit :

$$APWX^{n+1} = APWX^n + DWXDS (\Delta S_{ai}^{n+1}) + DWXDSM (\Delta S_{ai-1}^{n+1})$$

le reste des calculs s'effectuant comme dans le cas de la phase mouillante ;

- pressions capillaires implicites : il s'agit d'évaluer le terme P_c dans les expressions précédemment calculées ; on utilise encore Taylor

$$P_c^{n+1} = P_c^n + \frac{\partial P_c}{\partial S_a} \Delta S_a^{n+1} = P_c^n + DPCDS (\Delta S_a^{n+1})$$

et on introduit ce développement dans les termes précédemment calculés ;

- termes de stockage implicites :

a/ phase non mouillante : il s'agit du membre de droite de l'équation 2.2.3.2b

$$ANP^{n+1} (P_a^{n+1} - P_a^n) + ANS^{n+1} (S_a^{n+1} - S_a^n) \\ = \frac{\omega}{\Delta t^{n+1}} (\bar{S}_a \beta'_a (P_a^{n+1} - P_a^n) + \bar{\beta}_a \Delta S_a^{n+1})$$

dans lequel on introduit les expressions

$$\bar{S}_a, \beta'_a \text{ et } \bar{\beta}_a \text{ calculées plus haut}$$

et où on utilise l'approximation de Nolen et Berry (cf. § 3.3.2b)

$$\begin{aligned} \Delta S_a^{n+1} (P_a^{n+1} - P_a^n) &= (\Delta S_a^{n+1})^v [(P_a^{n+1})^v - P_a^n] \\ &+ [(\Delta S_a^{n+1})^{v+1} - (\Delta S_a^{n+1})^v] [(P_a^{n+1})^v - P_a^n] \\ &+ (\Delta S_a^{n+1})^v [(P_a^{n+1})^{v+1} - P_a^n] \end{aligned}$$

b/ *phase mouillante* : le membre de droite de l'équation 2.2.3.2a est développé en prenant cette fois encore l'approximation de Nolen et Berry à partir de :

$$\begin{aligned} &AWP^{n+1} (P_a^{n+1} - P_a^n) + AWS^{n+1} (S_a^{n+1} - S_a^n) \\ &= \frac{\omega}{\Delta t^{n+1}} \left[\left[(1 - \bar{S}_a) \beta'_w (P_a^{n+1} - P_a^n) \right] (1 - \bar{S}_a) \beta'_w P'_c + \bar{\beta}_w \right] \Delta S_a^{n+1} \end{aligned}$$

Au final, on obtient une formulation SS implicite complète qui peut s'écrire sous la forme matricielle suivante :

$$T_{PS}^{n+1} X^{n+1} = D$$

où T_{PS}^{n+1} est la matrice des coefficients d'écoulement

X^{n+1} est le vecteur des inconnues, de la forme $[X_1, X_2 \dots X_N]^T$

$$\text{avec } X_i = \begin{pmatrix} P_a \\ \Delta S_a \end{pmatrix}_i$$

• *Traitement de l'hystérésis*

Connaissant les courbes de drainage et d'humidification pour la pression capillaire et la perméabilité relative en fonction de la saturation en eau qui définissent les limites pour un cycle d'hystérésis complet, les auteurs exposent une méthode de calcul de courbes intermédiaires, lorsque des renversements dans le sens des processus se produisent avant que les saturations résiduelles ne soient atteintes (comme ces considérations débordent quelque peu du sujet traité ici, on se reportera pour les détails à la publication de Moridis et Reddell, 1991b).

• *Double concept d'interface en présence d'hystérésis*

Il est montré que, pour le problème traité, il faut distinguer deux types d'interface :

- l'interface à $S_a = 0$ qui correspond à la discontinuité physique de la phase air et à l'apparition de la discontinuité mathématique pour S_a , P_a et P_c dans les équations ; cet interface coïncide avec la surface libre classique où $P_c = 0$; c'est la limite inférieure de la zone à $P_c = 0$;
- l'interface à $P_c = 0$ qui correspond aussi à une discontinuité mathématique de P_a et de P_c mais pas de S_a et définit la limite supérieure de la zone à $P_c = 0$.

Dans le cas où l'on ignore l'hystérésis, les deux interfaces sont confondues mais la prise en compte de l'hystérésis de la pression capillaire dans le modèle nécessite de leur affecter des traitements différents qui entraînent des ajustements dans les coefficients d'écoulement de la phase non mouillante (pour les détails, on se reportera à la publication de Moridis et Reddell, 1991b).

3. METHODES DE RESOLUTION

Pour la rédaction de ce chapitre, différentes références ont été utilisées : Douglas *et al.* (1959), Aziz et Settari (1979), Huyakorn et Pinder (1983), Allen (1985), Thomas et Thurnau (1983), Forsyth et Sammon (1986).

3.1. METHODE "SIMULTANEOUS SOLUTION (SS)"

Considérons le système d'équations habituel pour l'écoulement diphasique eau-huile (eau-air) immiscible :

$$\nabla(\lambda_\ell(\nabla P_\ell - \gamma_\ell \nabla Z)) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\omega \frac{S_\ell}{B_\ell} \right) + q_\ell \quad (3.1.1a)$$

avec $\ell = w$ phase mouillante
 $\ell = o$ phase non mouillante

$$\lambda_\ell = \frac{K_{r\ell} \bar{k}}{\mu_\ell B_\ell} \quad \text{coefficient d'échange (cf. annexe 1)}$$

$$B_\ell \quad \text{compressibilité de la phase } \ell$$

$$\gamma_\ell = \rho_\ell g$$

$$\text{De plus } S_w = 1 - S_o, \quad P_c = P_o - P_w. \quad (3.1.1b)$$

Au tout début, Douglas *et al.* (1959), la méthode a été mise au point de façon à transformer le système ci-dessus où les variables sont S_w S_o P_w P_o en un système dépendant seulement des pressions P_w P_o et de la pression capillaire P_c . On peut en faire une analyse rapide en 1D.

$$\text{En développant le terme } \frac{\partial}{\partial t} \left(\omega \frac{S_\ell}{B_\ell} \right) \text{ en } \omega S_\ell b'_\ell \frac{\partial P_\ell}{\partial t} + \omega \frac{S'_\ell}{B_\ell} \frac{\partial P_c}{\partial t} \text{ (si } \omega \text{ indépendant de } t)$$

$$\text{avec } b'_\ell = d(1/B_\ell)/dP_\ell$$

$$S'_\ell = dS_\ell/dP_c$$

$$\text{En posant } \Delta_t \left(\frac{\omega S_\ell}{B_\ell} \right) = \omega \left(\frac{S_\ell}{B_\ell} \right)^{n+1} - \omega \left(\frac{S_\ell}{B_\ell} \right)^n$$

$$\text{on obtient } \Delta_t \left(\omega \frac{S_\ell}{B_\ell} \right) = \omega S_\ell^n b'_\ell \Delta_t(P_\ell) + \omega b_\ell^{n+1} S'_\ell \Delta_t(P_c)$$

L'équation conserve la masse si le développement de termes tels que $S'_\ell \Delta_t (P_c)$ est exact c'est-à-dire si :

$$S'_\ell = \frac{S_\ell^{n+1} - S_\ell^n}{P_c^{n+1} - P_c^n} \quad (3.1.1c)$$

A l'exception du cas où la pression capillaire serait une fonction linéaire de la saturation, l'expression ci-dessus est implicite et nécessite donc un calcul itératif. Des coefficients implicites similaires résultent du développement de termes en b'_ℓ (et ω' dans l'équation ci-dessus pour le cas général d'un milieu et/ou de fluides compressibles).

Le système 3.1.1 peut finalement s'écrire sous la forme suivante, si ω est constant :

$$\Delta T_w (\Delta P_w - \gamma_w \Delta Z)^{n+1} = d_{11} \Delta_t (P_w) + d_{12} \Delta_t (P_o) + Q_w \quad (3.1.2)$$

$$\Delta T_o (\Delta P_o - \gamma_o \Delta Z)^{n+1} = d_{21} \Delta_t (P_w) + d_{22} \Delta_t (P_o) + Q_o$$

$$\text{où} \quad \Delta T_\ell (\Delta P_\ell - \gamma_\ell \Delta Z)_i = T_{i+1/2} [P_{i+1} - P_i - \gamma_{i+1/2} (Z_{i+1} - Z_i)]$$

$$+ T_{i-1/2} [P_i - P_{i-1} - \gamma_{i-1/2} (Z_i - Z_{i-1})]$$

et

$$d_{11} = \frac{V}{\Delta t} [\omega S_w^n b'_w - \omega b_w^{n+1} S'_w]$$

$$d_{21} = \frac{V}{\Delta t} [\omega b_o^{n+1} S'_w], \quad d_{12} = \frac{V}{\Delta t} [\omega b_w^{n+1} S'_o]$$

$$d_{22} = \frac{V}{\Delta t} [\omega (1 - S_w)^n b'_o - \omega b_o^{n+1} S'_w]$$

Les 2 équations 3.1.2 doivent être résolues **simultanément** en chaque maille de calcul d'où le nom de la méthode, "SS". Si on range les pressions inconnues dans un vecteur unique :

$$P = (P_{1w}, P_{1o}, P_{2w}, P_{2o}, \dots, P_{Nw}, P_{No})^T$$

les équations aux différences finies peuvent maintenant être représentées sous forme matricielle :

$$TP^{n+1} = D (P^{n+1} - P_n) + G + Q = D \Delta_t (P) + G + Q \quad (3.1.3)$$

où T est la matrice d'échange (transmissibility matrix),
 D est la matrice de stockage (accumulation matrix),
 G est le vecteur des termes de gravité considéré comme pouvant être représenté de façon explicite au pas de temps n ,
 Q est le vecteur source.

La structure des matrices et vecteurs est la suivante, pour chaque maille i :

* T est tridiagonale, le i ème bloc étant donné par

$$\begin{bmatrix} Tw_{i-1/2} & 0 & -(Tw_{i-1/2} + Tw_{i+1/2}) & 0 & Tw_{i+1/2} & 0 \\ 0 & To_{i-1/2} & 0 & -(To_{i-1/2} + To_{i+1/2}) & 0 & To_{i+1/2} \end{bmatrix}$$

* Le i ème bloc de la matrice D est une sous-matrice d'ordre 2, $D_i = \begin{bmatrix} d_{11i} & d_{12i} \\ d_{21i} & d_{22i} \end{bmatrix}$

* Les i èmes composantes des vecteurs G et Q sont respectivement :

$$G_i = \begin{bmatrix} (\Delta T_w \gamma_w \Delta Z)_i \\ (\Delta T_o \gamma_o \Delta Z)_i \end{bmatrix} \quad Q_i = \begin{bmatrix} Q_{wi} \\ Q_{oi} \end{bmatrix}$$

L'équation 3.1.3 peut aussi être écrite sous forme de résidu, plus pratique d'un point de vue du calcul numérique itératif ; si on pose :

$$R^k = TP^k - D(P^k - P^n) - G \quad (3.1.4)$$

alors l'équation 3.1.3 devient : $R^{n+1} = Q$

soit $(T-D)(P^{n+1} - P^n) = -R^n + Q$

Si P^k correspond à la dernière approximation itérative de P^{n+1} au pas de temps $n+1$, alors on peut écrire :

$$(T - D)(P^{n+1} - P^k) = -R^k + Q \quad (3.1.5)$$

N. B. sur cette méthode :

- telle que présentée ci-dessus, la méthode SS nécessite une pression capillaire P_c non nulle à cause de la définition de S'_w (cf. équation 3.1.1c) ;
- lorsque la pente de la pression capillaire décroît, la matrice D devient dominante et le système d'équations singulier ; par conséquent, si l'on souhaite simuler un exemple à pression capillaire nulle, il est nécessaire d'introduire une "petite" valeur de P_c artificielle ; par chance, la valeur de dP_c/dS minimale pour que la méthode SS soit applicable est suffisamment faible pour ne pas affecter les résultats (affirmation non démontrée) ;
- après résolution du système pour un pas de temps, la valeur de S_w doit être mise à jour (à la fin du pas de temps) ; ceci implique le traitement des non-linéarités ainsi qu'il est décrit au § 3.3.2 ;
- comme pour N mailles de calcul, il y a $2N$ inconnues à calculer ($3N$ en triphasique), la méthode devient vite très exigeante en temps de calcul quand on passe de 1 à plusieurs dimensions.

Cette méthode SS a été ensuite appliquée à d'autres jeux de variables primaires que les pressions ; à titre d'exemple, Faust (1985) l'applique à un schéma en P_o , S_w et Kueper et Frind (1991) à un schéma en P_w , S_w , comme on l'a vu au chapitre 1.

Dans le cas d'un schéma en P et S , la formulation obtenue est applicable au cas d'une pression capillaire nulle avec P^c identiquement nul (cf. Aziz et Settari, 1979).

3.2. METHODE "IMPLICIT PRESSURE-EXPLICIT SATURATION (IMPES)"

Reprenant les équations de base 3.1.1 en 1D, on obtient les formulations aux différences finies suivantes en 1D en choisissant comme variables primaires une pression, par exemple P_o , et les saturations, et en posant : $P_c = P_o - P_w$

$$\Delta [T_w (\Delta P_o^{n+1} - \gamma_w \Delta Z - \Delta P_c^n)] = C_{1p} \Delta_t (P_o) + C_{1w} \Delta_t (S_w) + Q_w$$

$$\Delta [T_o (\Delta P_o^{n+1} - \gamma_o \Delta Z)] = C_{2p} \Delta_t (P_o) + C_{2o} \Delta_t (S_o) + Q_o \quad (3.2.1)$$

où les C_{ij} sont donnés dans Aziz et Settari (1979).

Cette méthode repose sur l'hypothèse fondamentale que la pression capillaire varie peu au cours d'un pas de temps (hypothèse non justifiée par les auteurs) ; dans ce cas, les termes faisant intervenir P_c peuvent être évalués de façon explicite au pas de temps précédent (n) et $\Delta_t P_w \neq \Delta_t P_o$. L'idée de base est de combiner les équations de départ pour obtenir une seule équation en une des deux pressions, on divise donc par 2 la taille du système à résoudre.

Après quelques manipulations algébriques que nous ne détaillerons pas ici, on arrive à une équation matricielle de la forme suivante :

$$TP^{n+1} = D(P^{n+1} - P^n) + G + Q \quad (3.2.2)$$

avec $P = (P_{10}, P_{20}, \dots, P_{N0})^T$

où T est une matrice tridiagonale,
 D est une matrice diagonale,
 G un vecteur comportant les termes de gravité et capillarité.

L'équation en pression est résolue de façon implicite ce qui permet de mettre à jour les saturations de manière explicite à chaque pas de temps. Quand les S_j^{n+1} sont connus, on en déduit les nouvelles pressions capillaires P_c^{n+1} qui seront utilisées de façon explicite au pas de temps suivant ; à noter que comme dans le cas de la méthode SS, plusieurs coefficients du membre de droite de l'équation 3.2.1 sont implicites et que là encore, il est nécessaire d'itérer.

La méthode IMPES présente l'avantage énorme de n'avoir à résoudre qu'une seule équation implicite à chaque pas de temps, mais elle n'est pas inconditionnellement stable contrairement à une méthode totalement implicite.

3.3. ANALYSE DES METHODES SS ET IMPES

3.3.1. Stabilité

Nous passerons sur les conditions d'existence et d'unicité des solutions, qui sont détaillées dans la littérature précitée ; par contre, il nous a paru intéressant de donner ici quelques indications sur les paramètres qui influent sur la stabilité respective de ces méthodes.

La stabilité peut être influencée, voire limitée, de deux manières :

- soit par le traitement explicite des variables primaires ;
- soit par le traitement explicite des coefficients d'échanges ("transmissibilités").

• **Stabilité par rapport au traitement des variables**

La méthode SS traite toutes les variables primaires de façon implicite, elle est donc inconditionnellement stable de ce point de vue.

La méthode IMPES traite la pression capillaire de façon explicite et est donc sujette à une limitation de stabilité dépendant de la grandeur de dP_c/dS . Aziz et Settari (1979) montrent que en 1D, la méthode IMPES voit croître le pas de temps maximal admissible quand les écoulements sont compressibles mais "dans la plupart des cas le gain est négligeable".

En 2D, il semblerait d'après les mêmes auteurs que la limitation de stabilité de la méthode IMPES soit beaucoup plus contraignante pour un écoulement en coupe verticale que pour un écoulement horizontal.

• **Stabilité par rapport aux coefficients d'échange**

Les plus fortes non-linéarités sont produites par ces coefficients ; quand ils sont traités de façon explicite, ils limitent la stabilité des 2 méthodes de la même manière. Aziz et Settari (1979) montrent qu'en 1D, la condition de stabilité est donnée par :

$$u_s \Delta t < \Delta X$$

où Δt est le pas de temps, Δx le pas d'espace et u_s la vitesse du front de saturation

$$u_s = \left(\frac{\partial x}{\partial t} \right)_{S_w = \text{Cste}} \quad (\text{cf. Aziz et Settari, 1979, p. 145}) ; \text{ on notera l'analogie de cette condition}$$

avec un critère de Courant. En 2D, une analyse similaire montre que la condition de stabilité est cette fois donnée par :

$$\Delta t \left(\frac{u_{xs}}{\Delta X} + \frac{u_{ys}}{\Delta Y} \right) \leq 1$$

Elle est donc toujours plus contraignante que pour le cas 1D correspondant.

Toutes les approximations utilisées dans les méthodes ci-dessus sont consistantes avec les équations de départ ; dans le cas d'un problème linéaire correctement posé, la stabilité du processus suffirait donc à entraîner sa convergence. Malheureusement, comme nous ne sommes pas dans ce cas de figure, la convergence n'est pas automatiquement assurée par la stabilité ; on verra en particulier dans ce qui suit qu'un schéma de pondération "très raisonnable" tend, quand on affine les pas de temps et d'espace, vers une solution différente de la solution analytique.

3.3.2. Traitement des non-linéarités

Les non-linéarités apparaissent dans les matrices T et D et dans le vecteur R de l'équation 3.1.5. Un terme de la matrice T peut s'écrire sous la forme

$$T_\ell = T_\ell[f_1(P_\ell), f_2(S_w)] = C f_1 f_2 \quad (3.3.2.1)$$

où C est une constante,

$$f_1 = 1/\mu_\ell B_\ell, \quad f_2 = K_{r\ell}$$

les fonctions f_1 et f_2 pouvant être représentées spatialement entre les mailles i et $i+1$ et temporellement entre les pas de temps n et $n+1$ de différentes manières :

$$T_{\ell i+1/2}^{n+1} \cong T_\ell \left[\begin{pmatrix} f_{i1}^{k1} \\ f_{i2}^{k2} \end{pmatrix} \right]$$

Le choix des i_1, i_2 pour définir les paramètres à l'interface $i+1/2$ est un problème de pondération : le choix des k_1, k_2 est un problème de linéarisation.

Les non-linéarités des équations définies aux paragraphes précédents se répartissent en 2 groupes, les faibles non-linéarités et les fortes non-linéarités.

• Faibles non-linéarités

Les paramètres qui sont fonction seulement de la pression d'une phase sont sujets à de faibles non-linéarités; il s'agit de B_ℓ les compressibilités et leurs dérivées, de la masse volumique et de la viscosité des fluides. Même en cas de pression variable, il est en général suffisant d'évaluer ces paramètres de façon explicite en fonction de P_ℓ^n et non de P_ℓ^{n+1} ; de même, leur pondération spatiale n'est pas critique, c'est-à-dire que l'on peut choisir :

$$f_{i+1/2} \cong \frac{1}{2} (f_{i1} + f_{i+1})$$

c'est-à-dire une moyenne arithmétique (avec pondération par la dimension des mailles si ΔX n'est pas constant).

• Fortes non-linéarités

Elles sont liées aux termes qui dépendent de la saturation ou de la pression capillaire c'est à dire K_{r1} et les dérivées dS/dP_c . Dans le cas où l'un des fluides est un gaz, les comportements non-linéaires peuvent être accentués (cf. § 3.3.2d). Dans tous les cas, c'est le comportement de K_{r1} qui est le plus marqué.

Aziz et Settari (1979) ont réalisé une étude systématique de l'impact des différentes méthodes de pondération et de linéarisation sur les résultats du problème test de Buckley-Leverett. Les paramètres du problème sont les suivants :

Longueur	$L = 1000$ pieds
Compressibilités	$B_w = B_o = 1$
Viscosités	$\mu_w = \mu_o = 1$ cp

Perméabilité intrinsèque $k = 300 \text{ md}$
 Porosité $\omega = 0.2$

Le débit de la phase non mouillante en $x = L$ est de 426.5 pieds/jour ; la phase mouillante est injectée en $x = 0$ avec le même débit.

Le réservoir est horizontal, sa section est de 10 000 pieds, sa saturation initiale constante, $S = 0.16$. Puisqu'avec la méthode SS classique, il est nécessaire de prendre une pression capillaire non nulle, la fonction P_c nulle est remplacée par une fonction P_c linéaire définie par $P_c = 0.1$ pour $S_w = 0.16$ et $P_c = 0$ pour $S_w = 0.8$; cette petite valeur de la pression capillaire n'a pas d'influence sur la solution calculée.

Nous résumons ici les principales conclusions de leur étude.

a) Pondération de la perméabilité relative

Il s'agit de calculer $K_{rl+1/2}$ à partir de S_{wi} et S_{wi+1} . La pondération qui pourrait spontanément être envisagée serait une moyenne arithmétique ("midpoint weighting") sous l'une ou l'autre des 2 formes suivantes :

$$K_{rl+1/2} = \frac{1}{2} [K_{rl}(S_{wi}) + K_{rl}(S_{wi+1})]$$

ou

$$K_{rl+1/2} = K_{rl} \left(\frac{1}{2} (S_{wi} + S_{wi+1}) \right)$$

Bien que ces deux approches soient d'ordre 2 en Δx , elles conduisent tous deux à des résultats faux. La figure 5 (extraite de Aziz et Settari, 1979) ainsi que toutes les suivantes jusqu'à la figure 14) présente les résultats obtenus pour le problème de Buckley-Leverett et des maillages différents avec le premier schéma ci-dessus; on voit que la convergence du schéma numérique se fait vers une solution mathématiquement possible mais différente de la vraie, représentée par le trait continu; ceci est une conséquence de la nature hyperbolique de l'équation qui correspond lorsque $P_c = 0$ à un problème différentiel mal posé qui n'a pas de solution unique (cf. discussion sur ce point dans Allen M. B. III (1985) p 169). Quand on augmente la valeur de P_c , les résultats numériques se rapprochent de la solution correcte (cf. fig. 6), cependant la "bonne" valeur de P_c dépend de la discrétisation.

Pour ces raisons le schéma communément adopté est le "upstream weighting" ou pondération amont, sur lequel nous revenons en détails au chapitre 4. Le schéma upstream à 1 point qui donne une approximation d'ordre 1 seulement en Δx se révèle bien meilleur que la moyenne arithmétique. Un autre schéma upstream, dit "à 2 points", introduit par Todd *et al.* (1972) et présenté en détails au chapitre 4 offre lui une précision d'ordre 2 ; pour le problème test (B.L.), ce schéma n'est que légèrement meilleur que le schéma d'ordre 1 ainsi qu'on peut le voir sur la figure 7.

Finalement, on constate que le problème du choix des pondérations spatiales est un bon exemple d'un cas où l'examen de l'erreur de troncature peut conduire à des conclusions erronées : les erreurs de troncature des schémas "midpoint" et "upstream" à 2 points diffèrent seulement par le coefficient du terme en Δx mais leurs performances ne sont pas du tout comparables.

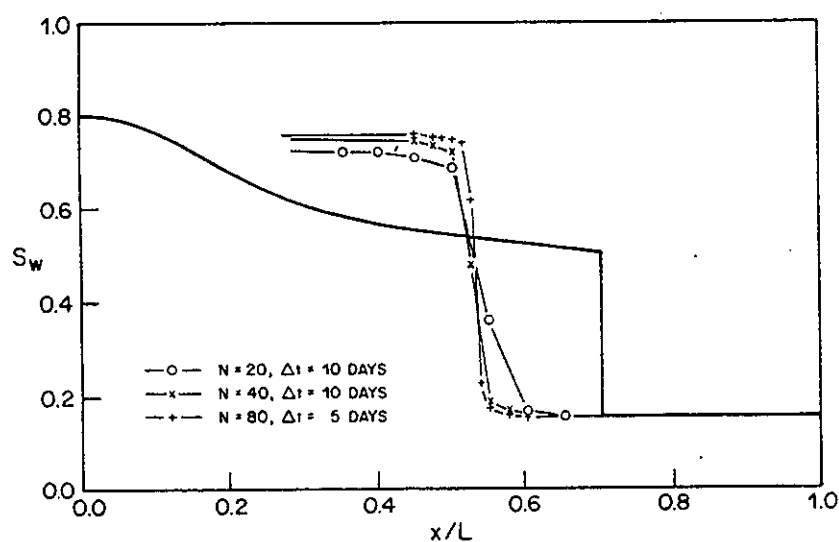


Fig. 5 - Convergence of midpoint weighting-almost hyperbolic problem. Test problem N° 1, $t = 1500$ days.

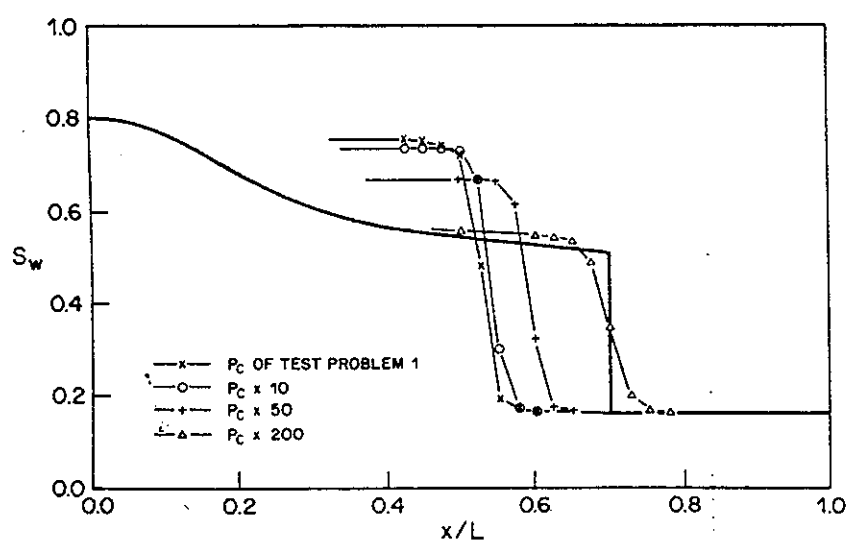


Fig. 6 - Solution with midpoint weighting for different P_c . Test problem N° 1, $\Delta x = L/40$, $\Delta t = 10$ days, $t = 1500$ days.

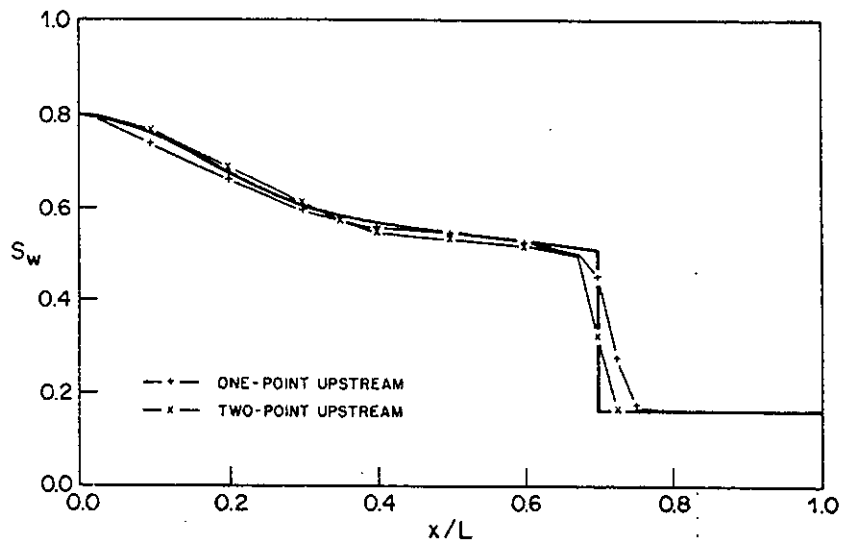


Fig. 7 - Comparison of upstream weighting formulae. Test problem N° 1, $\Delta x = L/40$, $\Delta t = 10$ days, $t = 1500$ days (after Settari and Aziz, 1975).

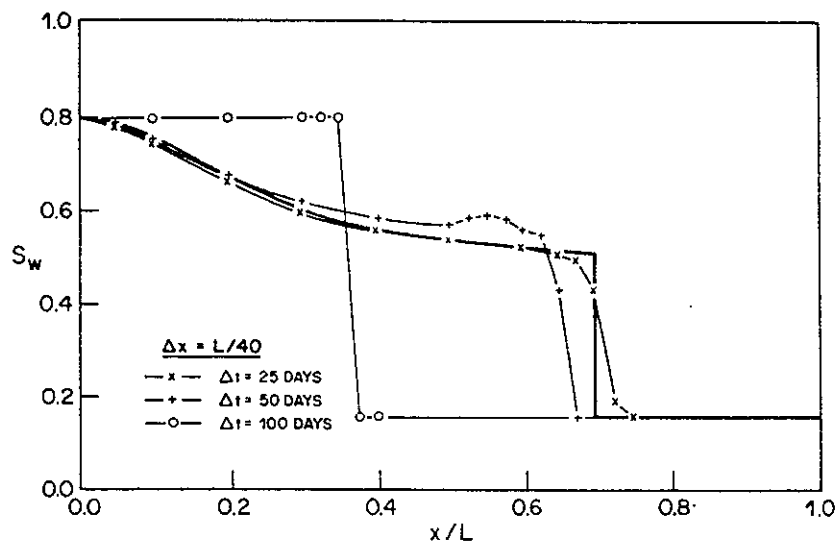


Fig. 8 - Stability of the SS Method with explicit transmissibilities for Test problem N° 1 at $t = 1500$ days (from Settari and Aziz, 1975).

b) Problème de linéarisation

Il est bien connu que le choix de la pondération temporelle est crucial pour la stabilité des équations en différences finies et que l'approximation $T^{n+1} \approx T(f_2^n)$ est seulement conditionnellement stable et impose une limitation sur le pas de temps ; il a été prouvé que les problèmes de stabilité proviennent essentiellement du traitement explicite de ces termes d'échange, ou "transmissibilités". Plusieurs techniques existent pour obtenir des approximations linéaires ou non linéaires de l'expression complètement implicite des termes d'échanges ; parmi ces techniques, plusieurs sont directement liées à la méthode de Newton, examinée plus en détail avec ses alternatives au chapitre 5.

Le traitement des termes de production fait intégralement partie de ces méthodes ; ces termes doivent être approchés de la même manière que les termes d'échanges entre mailles.

Des deux méthodes de base, (SS et IMPES), seule la méthode SS convient au traitement implicite des coefficients d'échange puisque la méthode IMPES implique par définition le traitement explicite de P_c et des saturations ; cependant, on verra au § 3.4 qu'on peut définir une alternative implicite à la méthode IMPES appelée SEQ (sequential method).

Nous rappellerons brièvement ici l'analyse effectuée par Aziz et Settari (1979), intéressante par les illustrations qu'elle présente des différentes techniques recensées, illustrations données par les comportements respectifs de la solution au problème de B.L. en 1D. La méthode de résolution utilisée est la méthode SS en pressions, avec pondération "upstream" à 1 point sur les K_{rel} .

Le vecteur résidu 3.1.4 est maintenant écrit sous la forme :

$$R_m^k = T^m P^k - D^m (P^k - P^n) - G^m \quad (3.3.2.2)$$

où m est le niveau d'évaluation des coefficients (implicite $m = n+1$, explicite $m = n$) et l'équation 3.1.5 s'écrit au niveau m :

$$(T^m - D^m) (P^{n+1} - P^n) = -R_m^n - Q \quad (3.3.2.3)$$

Les principales techniques passées en revue sont alors les suivantes :

* *Termes d'échanges explicites* : (pour mémoire) illustré par la figure 8 ; à noter que dans ce cas la vitesse du front étant de 0.5 pied/jour et la longueur L de 1000 pieds, $\Delta x = L/40 = 25$ pieds et la limite de stabilité donnée par la formule $U_s \Delta t < \Delta X$, est bien vérifiée puisqu'elle est atteinte pour $\Delta t = 50$ jours $= \Delta x / u_s$.

* *Termes d'échanges implicites linéarisés* : on extrapole T_ℓ au niveau temporel $n+1$ par la formule suivante :

$$T_\ell^{n+1} \approx T_\ell(f_2^n) + \frac{\partial T_\ell}{\partial P_c} (P_c^{n+1} - P_c^n)$$

où $\frac{\partial T_\ell}{\partial P_c} = cf_1 \frac{df_2}{dS_w} \frac{dS_w}{dP_c}$ est la dérivée par rapport au point amont; ces valeurs extrapolées sont

introduites dans les termes non linéaires tels que $T_{\ell i + \frac{1}{2}}^{n+1} (P_{\ell i+1} - P_{\ell i})^{n+1}$

qui est linéarisé de la façon suivante :

$$(P_{\ell i+1} - P_{\ell i})^{n+1} \frac{\partial T_\ell}{\partial P_c} (P_c^{n+1} - P_c^n) \cong (P_{\ell i+1} - P_{\ell i})^n \frac{\partial T_\ell}{\partial P_c} (P_c^{n+1} - P_c^n) \quad (3.3.2.4)$$

Cette technique est équivalente à la première itération de la méthode de Newton (cf. § 5.1). Les résultats pour le problème de B.L. sont présentés sur la figure 9 ; on constate que, en 1D, cette technique est environ 2 fois plus stable que la technique explicite ; en 1D, la limite de stabilité pour la technique explicite est atteinte quand le front de saturation avance d'une maille par pas de temps mais en 2D ou 3D, en particulier au voisinage des puits, l'instabilité de l'équation explicite se produisant pour des Δt beaucoup plus petits, l'amélioration apportée par la méthode linéarisée sera bien plus importante.

* *Technique semi-implicite* : celle qui est décrite par Aziz et Settari, (1979) correspond à la version de Nolen et Berry (1972) ; Nolen et Berry gardent la forme non linéaire de l'expression 3.3.2.4 avec les dérivées T' encore évaluées au niveau temporel n , la formulation matricielle devient :

$$(T^n + T_n^{n+1} - D)(P^{n+1} - P^n) = -R_n^n + Q$$

ce qui représente un système non linéaire. La non linéarité de l'expression $T_n^{n+1} (P^{n+1} - P^n)$ est résolue par itérations de Newton, ce qui revient à itérer sur le membre de gauche de l'équation 3.3.2.4 comme suit :

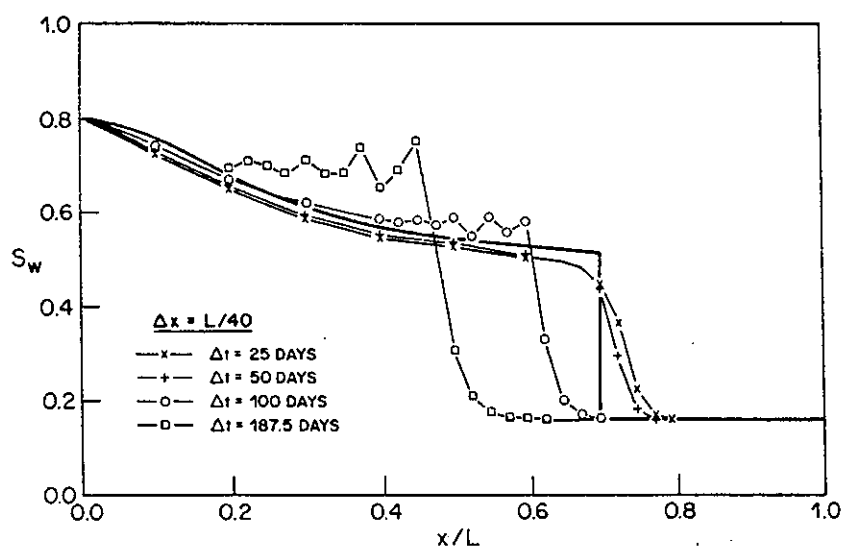


Fig. 9 - Stability of the SS linearised implicit method for Test problem N° 1 at $t = 1500$ days (from Settari and Aziz, 1975).

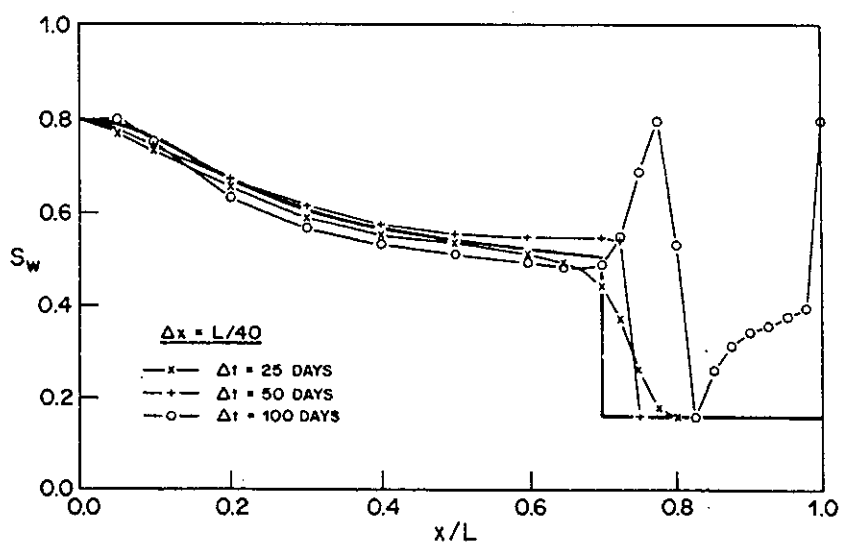


Fig. 10 - Stability of the SS semi-implicit tangent method for Test problem N° 1 at $t = 1500$ days (from Settari and Aziz, 1975).

$$\begin{aligned}
 (P_{\ell i+1} - P_{\ell i})^{(v+1)} \frac{\partial T_{\ell}}{\partial P_c} (P_c^{(v+1)} - P_c^n) &= (P_{\ell i+1} - P_{\ell i})^{(v)} \frac{\partial T_{\ell}}{\partial P_c} (P_c^{(v+1)} - P_c^{(v)}) \\
 + \left[(P_{\ell i+1} - P_{\ell i})^{(v+1)} - (P_{\ell i+1} - P_{\ell i})^{(v)} \right] \frac{\partial T_{\ell}}{\partial P_c} (P_c^{(v)} - P_c^n) & \quad (3.3.2.5) \\
 + (P_{\ell i+1} - P_{\ell i})^{(v)} \frac{\partial T_{\ell}}{\partial P_c} (P_c^{(v)} - P_c^n) &
 \end{aligned}$$

où v est l'ordre d'itération, 0, 1, 2,...

- Si une seule itération est effectuée et $P^{(0)} = P^n$, la méthode de Nolen et Berry devient la méthode implicite linéarisée décrite plus haut ;
- si les fonctions $K_H(S_w)$ sont linéaires, la méthode de Nolen et Berry donne la solution des équations totalement implicites.

Le traitement des dérivées $\partial T_{\ell} / \partial P_c$ est crucial pour la convergence des itérations de 3.3.2.5 ; ceci apparaît clairement à l'examen des figures 10 et 11. La première figure montre les résultats lorsque $\partial T_{\ell} / \partial P_c$ est approché par la tangente en P^n ; dans ce cas, il y a divergence à partir de $\Delta t = 100$ jours. De meilleurs résultats sont obtenus lorsque la dérivée est approchée par la sécante entre P^n et "une estimation raisonnable de P^{n+1} " dénotée P^k .

La figure 11 présente les résultats pour une valeur $\delta S_w = S_w^k - S_w^n = 0.5$; ils sont meilleurs que tout ce qui a été montré jusqu'à présent.

* *Technique totalement implicite* : l'équation matricielle correspondante s'écrit

$$(T^{n+1} - D^{n+1})(P^{n+1} - P^n) = -R_{n+1}^n + Q \quad (3.3.2.6)$$

et toutes les techniques ci-dessus n'en utilisent que des approximations ; pour résoudre l'équation 3.3.2.6, on peut utiliser Newton (cf. § 5). Les résultats sont présentés sur la figure 12. Ils sont stables à tous les pas de temps mais nettement plus dispersés que les résultats correspondant de la figure 11.

Un développement similaire peut être obtenu quand les variables primaires sont P et S ; les dérivées sont alors effectuées directement par rapport à S_w et non P_c .

* *Conclusion des auteurs Aziz et Settari (1979)* : l'examen des résultats montre que la stabilité augmente avec le degré d'"implicitness" de la méthode mais que, par contre, les erreurs de troncature augmentent aussi et, pour la méthode "fully implicit", elles croissent de façon monotone quand le pas de temps croît (cf. fig. 12). Par ailleurs, les approches par la corde ont été comparées aux approches par la tangente, pour la représentation des dérivées ; "seule la méthode semi-implicite de Nolen et Berry a tiré bénéfice de l'usage de la corde".

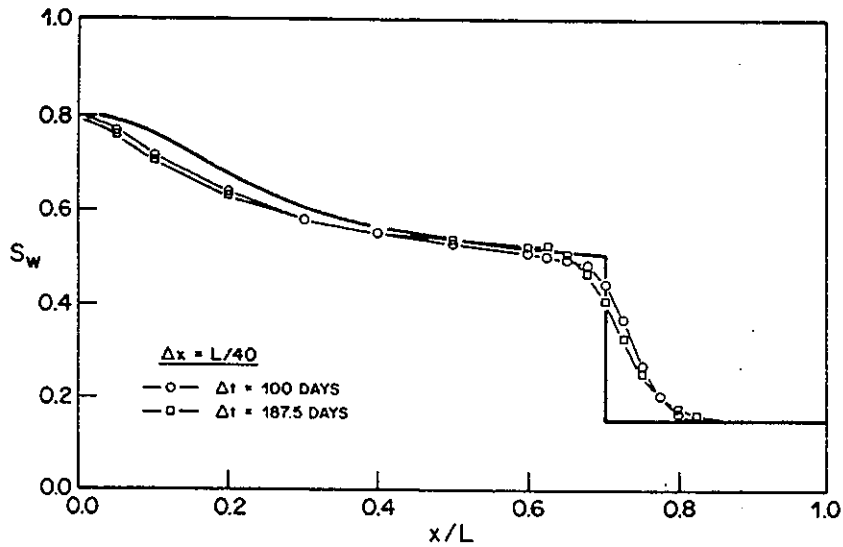


Fig. 11 - Stability of the SS semi-implicit secant ($\delta S_w = 0.5$) method for Test problem N° 1 at $t = 1500$ days (from Settari and Aziz, 1975).

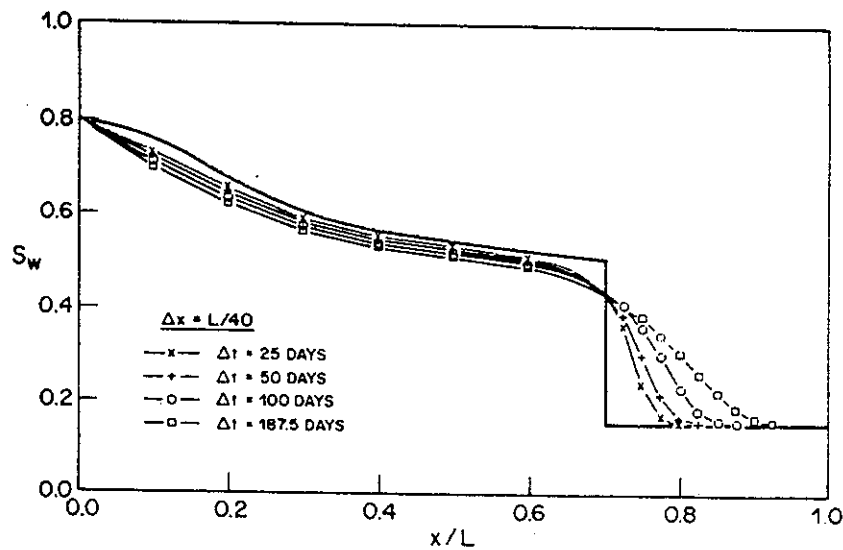


Fig. 12 - Stability of the implicit method. Test problem N° 1 at $t = 1500$ days (from Settari and Aziz, 1975).

Pour les problèmes pratiques en 2D ou 3D, les auteurs recommandent l'utilisation de la méthode linéarisée parce que "les équations complètement implicites produisent de grandes erreurs de troncature et que le gain en stabilité ne peut pas toujours être mis à profit, la taille des pas de temps étant limitée par d'autres considérations; la méthode semi-implicite présente de plus faibles erreurs de troncature, mais est sensible au choix des cordes, ce qui la rend moins adaptée en cas de modifications imprévisibles de la saturation (changement de sens de l'écoulement, etc...)".

c) Non linéarité due à P_c

Quand la fonction $S_w = f(P_c)$ n'est pas linéaire, ce qui est le cas général, les éléments de la matrice D deviennent aussi implicites. Pour que S'_w satisfasse la condition 3.1.1.c, une méthode itérative doit être utilisée sur S'_w . Dans le cas où une méthode itérative est utilisée pour calculer les termes d'échanges implicites de T, les itérations sur D peuvent être constituées de sous-itérations de la première méthode.

d) Percolation du gaz

Dans le cas où l'un des fluides est un gaz, du gaz libre se forme dès que la pression décroît en-dessous du point de bulle; puisque la viscosité du gaz est très faible, sa mobilité est grande et le gaz peut percoler avec une vitesse relativement grande, et donc de sérieux problèmes de stabilité peuvent apparaître (également en cas de déplacement du gaz vers le bas par gravité). Là encore, les instabilités sont essentiellement dues au traitement explicite des termes d'échange, elles sont simplement accentuées du fait de grandes différences de densité entre huile et gaz ou eau et gaz et de non-linéarités plus fortes des fonctions dépendant de la pression du gaz. Plusieurs chercheurs ont montré, d'après Aziz et Settari (1979) que les méthodes linéarisées ou semi-implicites pouvaient résoudre les problèmes de stabilité associés à la percolation de gaz.

3.4. METHODE "SEQUENTIAL SOLUTION (SEQ)"

Cette méthode est basée sur la tentative d'améliorer la stabilité de la méthode IMPES par un traitement implicite des saturations, mais sans la résolution simultanée en pressions et saturations de la méthode SS. La méthode comporte 2 étapes :

- on obtient d'abord une solution en pression de façon implicite, de la même manière qu'avec la méthode IMPES ;
- ensuite, on obtient une solution implicite en saturation par linéarisation des coefficients d'échange implicites.

La formulation, assez complexe, ne sera pas détaillée ici ; on trouvera les détails dans Aziz et Settari (1979).

Reprenant l'exemple 1D de B.L. déjà utilisé aux paragraphes précédents, on présente ci-après quelques résultats donnés par la méthode SEQ, avec la pondération "upstream" à 1 point et $P_c = 0$; il faut noter qu'il n'est plus nécessaire d'avoir une valeur non nulle de P_c pour utiliser la

méthode SEQ, contrairement à ce qui se passait avec la méthode SS. Toutes les non-linéarités dues aux coefficients d'échange sont traitées par la méthode implicite linéarisée qui correspond à une itération de Newton (cf. § 3.3.2b). Les figures 13 et 14, extraites de la publication, présentent les résultats avec les approximations de la tangente et de la corde, respectivement; pour le plus grand Δt , la méthode de la corde est plus stable. L'écart de stabilité entre les 2 approches n'est pas aussi grand que dans le cas de la méthode SS avec traitement semi-implicite des coefficients d'échange (cf. fig. 10 et 11); la plus grande stabilité de l'approche de la corde s'accompagne de plus grandes erreurs de troncature (cf. résultats à $\Delta t = 25$ jours).

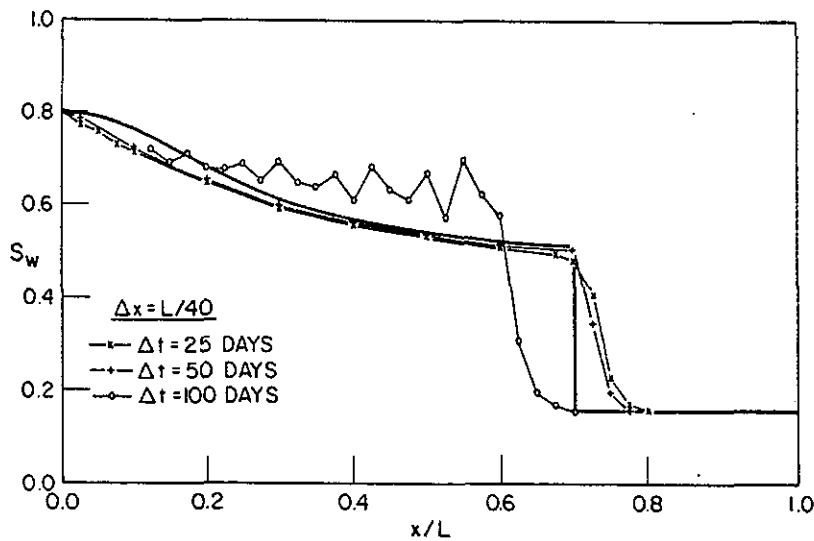


Fig. 13 - Stability of SEQ method with linearised tangent slope transmissibilities, Test problem N° 1.

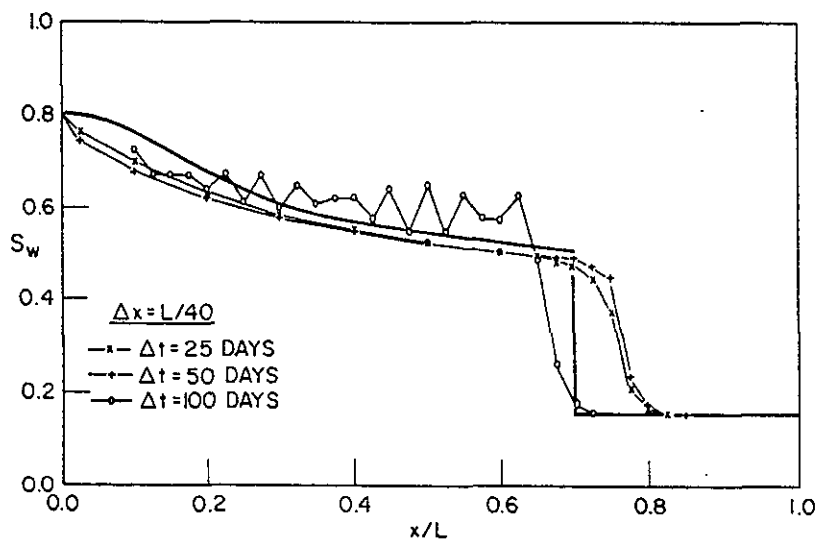


Fig. 14 - Stability of SEQ method with linearised chord slope transmissibilities, $\delta S_w = 0.32$, Test problem N° 1.

En général, la méthode SEQ demande moins de temps CPU que la méthode SS mais elle présente l'inconvénient de produire des équations qui ne garantissent pas un bon bilan de masse pour toutes les phases et ne sont pas aussi stables que celles de la méthode SS. Les auteurs cités estiment que cette méthode est adaptée à des problèmes "moyennement difficiles" qui ne peuvent être résolus avec des coefficients d'échanges et/ou des pressions capillaires explicites, mais qui ne nécessitent pas le traitement complètement implicite de la méthode SS.

3.5. METHODE "ADAPTIVE IMPLICIT (AIM)"

Cette méthode a été introduite par Thomas et Thurnau (1983) puis reprise par Forsyth et Sammon (1986), Fung *et al.* (1989).

Si on appelle "degree of implicitness" le nombre d'inconnues calculées de façon implicite, les méthodes précédemment décrites fonctionnent avec un degré d'"implicitness" fixe, ainsi une formulation IMPES est du 1er degré puisque seule la pression est traitée de façon implicite et le traitement totalement implicite d'un problème à N inconnues est du degré N. Plutôt que de fonctionner avec un "degree of implicitness" fixé pour toutes les mailles à chaque pas de temps et chaque itération, la méthode AIM fait intervenir différents degrés dans des mailles voisines ; de plus, ces degrés varient dans l'espace et dans le temps de façon à garantir la stabilité des calculs. Les variations ont lieu de façon automatique. Les avantages de cette méthode consistent, d'après Thomas et Thurnau (1983), en une réduction très importante du temps de calcul et de la taille des tableaux, par rapport à une méthode totalement implicite, tout en garantissant des solutions inconditionnellement stables.

L'idée de base est que, dans un réservoir, seule une petite fraction de l'ensemble des mailles de calcul subit, à chaque pas de temps, des variations des quantités calculées suffisamment importantes pour que de forts "degrees of implicitness" soient indispensables. Un simulateur de type AIM est conçu "to apply the right amount of implicitness where and when needed and only as long as needed".

Si on écrit le problème algébrique sous forme résiduelle (cf. § 4.1), on doit résoudre une équation de la forme

$$AX = R$$

où : R est le vecteur des résidus à la k^{ième} itération du pas de temps n+1,
X est le vecteur des inconnues au pas de temps n+1 avec

$$X = (\delta X_{11}, \delta X_{21}, \dots, \delta X_{N1}, \dots, \delta X_{1m}, \dots, \delta X_{Nm})$$

et $\delta X_{ij} = X_{ij}^{k+1} - X_{ij}^n$

La procédure numérique consiste à choisir au départ quelles variables sont traitées implicitement ou explicitement et à les étiqueter ; des seuils de variation sont choisis suite à expérimentation numérique, pour chaque élément du vecteur solution ; quand l'un de ces seuils est dépassé au cours d'une itération, le terme correspondant du vecteur solution est étiqueté comme implicite pour la prochaine itération, sinon il reste explicite. Une caractéristique importante de la méthode AIM est que les inconnues doivent être étiquetées implicite ou explicite avant construction de la matrice finale. On conserve la trace du "degree of

implicitness" dans chaque maille grâce à un tableau particulier. Des permutations sont effectuées sur la matrice A de façon à obtenir, par exemple en 1D :

$$PAP^T = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & A_{22} \end{bmatrix}$$

où A_{11} est une sous-matrice diagonale de coefficients modifiés des variables explicites, A_{12} et A_{22} sont des sous-matrices de coefficients modifiés des variables implicites ; l'ordre de A_{22} est égal au nombre total de variables implicites. En partitionnant X et R de façon similaire à PAP, on obtient le système suivant :

$$A_{11} X_1 + A_{12} X_2 = R_1 \quad (3.5.1a)$$

$$A_{22} X_2 = R_2 \quad (3.5.1b)$$

La résolution de l'équation (3.5.1b) consomme la plus grande partie du temps de calcul qui, au total, est nettement moins important que si toutes les variables sont implicites. De plus, les techniques d'élimination gaussienne deviennent "economically possible" pour des problèmes de taille beaucoup plus importante que dans le cas d'une méthode totalement implicite.

Thomas et Thurnau (1983) donnent le détail des opérations nécessaires pour appliquer la méthode et illustrent la procédure par un exemple 3D d'injection de gaz (nos remarques : pas très bien décrit).

Forsyth et Sammon (1986) adaptent la méthode à une technique de résolution itérative basée sur un préconditionnement LU avec accélération par ORTHOMIN (au lieu de l'élimination gaussienne utilisée par les précédents auteurs). Ces auteurs remarquent que le critère de sélection de Thomas et Thurnau (1983) peut être utilisé pour basculer les mailles dans le sens explicite vers implicite mais pas vice versa ; de plus, si ce basculement permet de piéger les fortes instabilités qui menacent quand de grandes variations de saturations se produisent, il n'est pas certain qu'il permette de détecter les instabilités plus sournoises qui croissent lentement. Par conséquent, il faut instituer des seuils sur les variations de saturations beaucoup plus drastiques que ceux choisis pour la variation du pas de temps (et qui dépendent des variations de toutes les variables). Les tests réalisés par les auteurs sur des modèles de type "black oil" (cf. annexe 1) ont fait apparaître une réduction du temps de calcul d'environ 40% par rapport à une technique "fully" implicite.

Enfin, Fung *et al.* (1989) mettent au point un critère de basculement basé sur la stabilité numérique du système à l'échelle de chaque maille à chaque pas de temps ; ce critère permet de basculer aussi dans le sens implicite vers explicite.

4. PONDERATIONS SPATIALES

4.1. SCHEMAS "UPSTREAM WEIGHING"

Tous les auteurs cités recommandent le choix de la pondération amont ("upstream weighting") sur les perméabilités relatives ou, ce qui revient au même, sur les mobilités ;

- en DF, ces pondérations sont effectuées directement à l'interface $i + 1/2$ entre les mailles i et $i+1$ par la formule

$$\left(\frac{K_{r\alpha}}{\mu_{\alpha}} \right)_{i+1/2} = \eta \left(\frac{K_{r\alpha}}{\mu_{\alpha}} \right)_i + (1 - \eta) \left(\frac{K_{r\alpha}}{\mu_{\alpha}} \right)_{i+1}$$

avec $\eta = 1$ si l'écoulement est de i vers $i+1$
 $\eta = 0$ si l'écoulement est dans le sens inverse ;

pour les écoulements diphasiques eau-NAPL, on peut citer Faust (1985), Faust *et al.* (1989), Forsyth (1988), Kueper et Frind (1991) qui recommandent ce schéma de même que par exemple Moridis et Reddell (1991) en diphasique air-eau ;

- en EF, les auteurs tels que Huyakorn et Pinder (1978), Kaluarachchi et Parker (1989) utilisent des fonctions de pondération "upstream" non symétriques sur les termes spatialement dépendants dans la formulation en résidus pondérés, ce qui revient au même ; d'autres auteurs ne précisent pas les schémas retenus tels Kupusamy *et al.* (1987) ou Sleep et Sykes (1989).

Les mêmes auteurs choisissent une pondération harmonique sur les perméabilités intrinsèques; nous n'avons pas rencontré, dans la littérature dépouillée, d'exemple d'utilisation de moyenne géométrique, cependant D. Thiéry nous signale que pour MARTHE, il a testé différentes pondérations des coefficients d'échange et que la moyenne harmonique est mauvaise en monophasique-ZNS ou diphasique alors que la moyenne géométrique est très bonne en monophasique-ZNS ou même en diphasique si les fronts ne sont pas trop abrupts.

Huyakorn et Pinder (1983) précisent qu'un schéma numérique avec pondération amont sur les mobilités, en EF ou DF, est d'autant plus nécessaire que la pression capillaire est plus faible, ceci afin de prévenir des oscillations du front abrupt ; ces auteurs le recommandent particulièrement en DF quand on utilise Newton-Raphson et la méthode SS (cf. § 3.1).

En triphasique, on retrouve d'ailleurs le même genre de pondération. Forsyth (1993) écrit: "upstream weighting can be shown to converge to physically correct solution for simple multiphase flow situations" et cite Sammon (1988). Toujours en triphasique, on peut encore citer Sleep et Sykes (1993) qui développent un "compositional model" en DF "block centered" avec 3 phases (eau-gaz-NAPL), lesquelles transportent et échangent un nombre quelconque de composants. Pour ce problème compliqué, ils ont testé 3 types de pondération amont sur les mobilités, les perméabilités intrinsèques étant moyennées harmoniquement ; ces méthodes sont :

- un schéma "one point upstream weighting" qui est la pondération amont classique déjà citée ci-dessus et qui a une précision spatiale d'ordre 1 ; l'inconvénient de ce schéma est la dispersion artificielle qu'il introduit sur le front (mais qui a aussi l'avantage de stabiliser les résultats, c'est le prix à payer habituel...) ;
- un schéma développé par Todd *et al.* (1972) appelé "two point upstream weighting" et qui présente une précision spatiale d'ordre 2 ; ce schéma s'écrit (cf. § 4.2) :

$$K_{r_{i+1/2}} = K_{r_i} + \frac{\Delta x_i}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} (K_{r_i} - K_{r_{i-1}}) \quad \text{si écoulement de } i \text{ vers } i+1$$

$$K_{r_{i+1/2}} = K_{r_{i+1}} + \frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}} (K_{r_{i+1}} - K_{r_{i+2}}) \quad \text{si écoulement de } i+1 \text{ vers } i$$

- un schéma appelé "third order upwinding" équivalent à une combinaison du schéma à 2 points et de la moyenne arithmétique ("midpoint scheme") :

$$K_{r_{i+1/2}} = \frac{1}{3} K_{r_{i+1/2}}^{\text{UP}} + \frac{2}{3} K_{r_{i+1/2}}^{\text{MP}}$$

avec $K_{r_{i+1/2}}^{\text{UP}}$ = le schéma à 2 points ci-dessus

et $K_{r_{i+1/2}}^{\text{MP}}$ = "midpoint scheme" = $\frac{1}{2} (K_{r_i} + K_{r_{i+1}})$

Les tests effectués par les auteurs en triphasique avec multicomposants les conduisent à conclure que les 2 derniers schémas cités "produce much less numerical dispersion than the widely employed one point upstream weighting method for multiphase flow" ; la dernière méthode (third order) est légèrement moins dispersive mais ne peut pas être utilisée quand les gradients de pression capillaire sont absents ; en effet, on a déjà vu que le schéma "midpoint weighting" ne donnait pas la bonne solution du problème de B.L. quand P était nul (cf. § 3.3.2a).

Enfin on peut citer les remarques à propos du logiciel TOUGH ; Pruess, (1990) écrit que "s'il est bien connu" qu'en monophasique, le schéma approprié de pondération de la perméabilité intrinsèque est la moyenne harmonique entre 2 mailles voisines, et que pour les écoulements diphasiques transitoires la perméabilité relative doit être pondérée par un schéma upstream en milieu "uniforme" (homogène sans doute...), par contre, des études récentes au LBL ont montré que dans les milieux stratifiés, "both absolute and relative permeability must be fully upstream weighted to avoid the possibility of gross errors". Il n'y aurait donc pas, d'après K. Pruess, de schéma de pondération optimal à la fois pour les écoulements diphasiques généraux en milieu stratifié et pour les écoulements monophasiques ou diphasiques stationnaires.

4.2. SCHEMAS "UPSTREAM" A 2 POINTS

4.2.1. Caractéristiques

Comme indiqué ci-dessus ce schéma a été développé par Todd *et al.* (1972) et nous a paru suffisamment intéressant pour que nous nous y attardions un peu.

Pour une discrétisation DF "block centered", qui est celle qui nous intéresse, ce schéma s'écrit sous la forme suivante en 1D quand l'écoulement est de i vers $i+1$:

$$K_{r_{i+1/2}} = K_{r_i} + \frac{\Delta x_i}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} (K_{r_i} - K_{r_{i-1}})$$

$$K_{r_{i-1/2}} = K_{r_{i-1}} + \frac{\Delta x_{i-1}}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_{i-2}} (K_{r_{i-1}} - K_{r_{i-2}})$$

et si l'écoulement est dans l'autre sens :

$$K_{r_{i+1/2}} = K_{r_{i+1}} - \frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}} (K_{r_{i+2}} - K_{r_{i+1}})$$

$$K_{r_{i-1/2}} = K_{r_i} - \frac{\Delta x_i}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} (K_{r_{i+1}} - K_{r_i})$$

où $K_{r_{i+1/2}}$ est la perméabilité relative à l'interface entre les mailles i et $i+1$; ces équations utilisent bien des valeurs de K_r données en 2 mailles amont. Sous réserve des contraintes rappelées ci-après, ces formules peuvent être introduites très facilement dans un simulateur explicite en saturation (nos remarques : pas dans un simulateur totalement implicite ?).

Il est facile de vérifier que ce schéma à 2 points donne pour $\partial K_r / \partial x$ une précision d'ordre 2 en Δx alors que le schéma classique à 1 point n'est que d'ordre 1 ; à noter que le schéma "midpoint weighting" ou moyenne arithmétique est aussi d'ordre 2, ce qui ne l'empêche pas de donner des résultats grossièrement faux dans certains cas comme on l'a vu au § 3.3.2a.

4.2.2. Restrictions et contraintes

Les auteurs montrent sur des exemples simples (écoulement 1D vers les x positifs, avec un maillage Δx uniforme) que des précautions doivent être prises; dans ces cas simples, les formules s'écrivent simplement sous la forme :

$$K_{r_{i+1/2}} = \frac{3}{2} K_{r_i} - \frac{1}{2} K_{r_{i-1}} \quad (4.2.2.1)$$

- La première contrainte découle de la formule ci-dessus, on voit immédiatement que si $K_{r_{i-1}} > 3K_{r_i}$ alors $K_{r_{i+1/2}}$ peut être négatif, ce qui n'est pas physique ; on doit donc toujours respecter

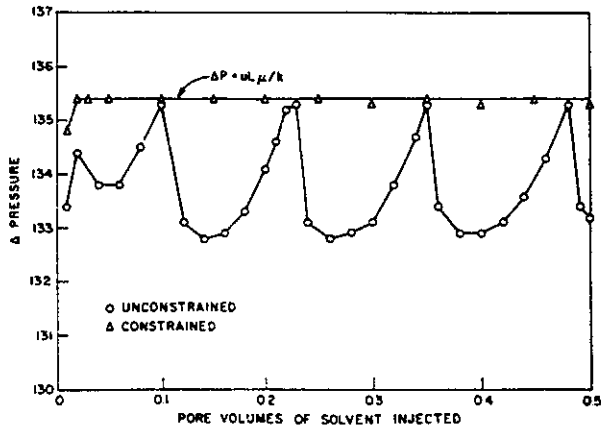


Fig. 15 - Pressure drop across a one-dimensional system for a unit mobility ratio, miscible displacement.

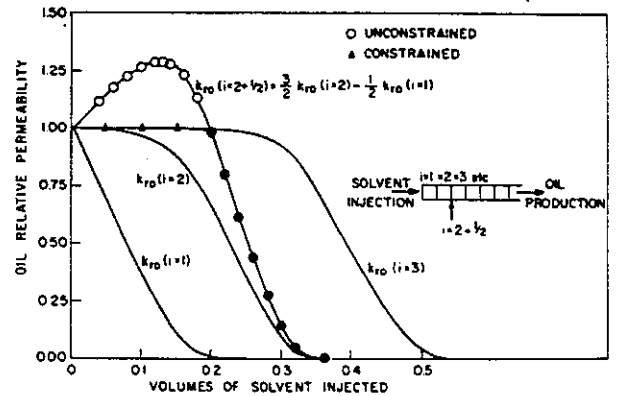


Fig. 16 - Oil relative permeability for a one-dimensional miscible displacement.

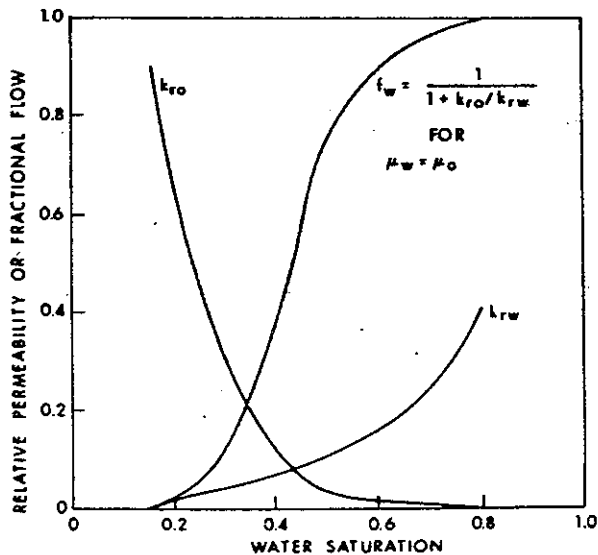


Fig. 17 - Relative permeability and fractional flow curves for the Buckley-Leverett problem.

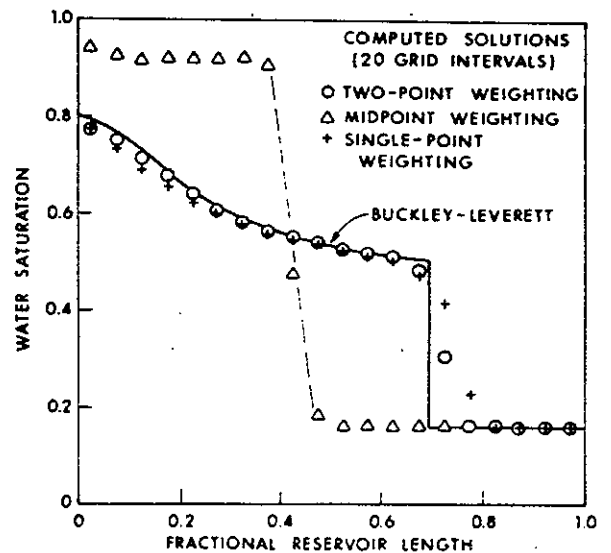


Fig. 18 - Effect of mobility weighting schemes on the computed saturation profile for the Buckley-Leverett problem (0.32 PV of water injected).

la contrainte $K_{r_{i-1}} < 3K_{r_i}$. Or, lorsque le front est abrupt, cette inégalité peut ne pas être vérifiée pour la phase entrante qui arrive dans la maille i depuis la maille $i-1$.

- La formule 4.2.2.1 peut conduire à des valeurs de $K_{r_{i+1/2}}$ pour la phase déplacée qui sont beaucoup trop grandes si la maille $i-1$ est presque dépourvue de cette phase et que la maille i en est presque remplie ; à titre d'exemple, on examine le déplacement miscible de l'huile par un solvant en absence d'eau ; puisqu'avec deux fluides miscibles de même viscosité, la mobilité totale dans une maille reste constante au passage du front, le gradient de pression le long du modèle devrait rester constant au cours du déplacement ; la figure 15, extraite de la publication Todd *et al.* (1972), présente l'évolution de Δp calculée avec le schéma 4.2.2.1 non contraint (cercles) et la véritable valeur de Δp en fonction du volume de solvant injecté (ligne continue). On a utilisé 7 mailles de calcul, on constate que le Δp calculé tombe périodiquement au-dessous de la valeur correcte, ce qui signifie que la mobilité totale calculée devient trop grande ; sur la figure 16, on observe l'évolution de la perméabilité relative de l'huile en fonction du volume de solvant injecté, pour les 3 premières mailles et pour l'interface entre les mailles 2 et 3 ; les cercles correspondent à la formule non contrainte, on constate que $K_{r_{i+1/2}}$ devient plus grand que 1 et le maximum de l'"overshoot" correspond au premier minimum de Δp sur la figure 15 ; si l'on contraint les $K_{r_{i+1/2}}$ à ne pas dépasser le maximum de K_{r_i} et $K_{r_{i+1}}$, on obtient la courbe avec les triangles noirs sur la figure 16 qui donnent alors pour Δp les triangles de la figure 15 ; Δp est maintenant correct.
- Un autre exemple que nous ne détaillerons pas ici prenant en compte le déplacement d'un front abrupt eau-huile est présenté par les auteurs qui recommandent, en conclusion, de vérifier la validité du schéma à 2 points "pour chaque maille de calcul et chaque pas de temps" et de basculer sur le schéma à 1 point quand le premier n'est pas applicable.

4.2.3. Avantages du schéma à 2 points

Les auteurs ont mené des expérimentations numériques en 1D et 2D :

- En 1D, test de Buckley-Leverett :
les viscosités des 2 fluides eau et huile sont supposées égales et le rapport des mobilités est $M=0.455$, les courbes de perméabilité relative sont présentées sur la figure 17 et le front de saturation sur la figure 18, toutes deux extraites de la publication citée ; les résultats montrent que pour ce cas, le schéma "midpoint" est extrêmement mauvais et que le schéma "upstream" à 2 points n'est ici que légèrement plus performant que le schéma à 1 point ;
- En 2D, test du schéma régulier à 5 puits :
pour montrer l'influence de l'orientation de la grille sur les résultats calculés, des simulations ont été effectuées en considérant soit un maillage parallèle à l'écoulement sur 1/2 élément de symétrie, soit un maillage diagonal à l'écoulement sur 1/4 d'élément de symétrie (cf. fig. 19) ; pour comparer les performances des 2 types de maillage, il est nécessaire de prendre 2 fois plus de mailles dans le maillage parallèle du 1/2 domaine que dans le maillage diagonal du 1/4 de domaine, la figure 20 a donc été obtenue avec 5 X 5 mailles "diagonales" ou 7 X 7 mailles "parallèles". Sur cette figure, on présente la fraction d'huile récupérée en fonction du volume injecté, les résultats numériques sont comparés à une solution analytique. On constate que pour les 2 schémas de pondération, les résultats sont moins précis avec le maillage

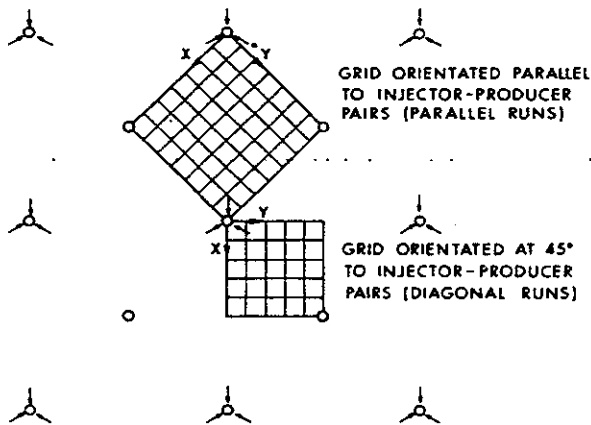


Fig. 19 - Grid orientations for simulation of displacements in five-spot symmetry elements.

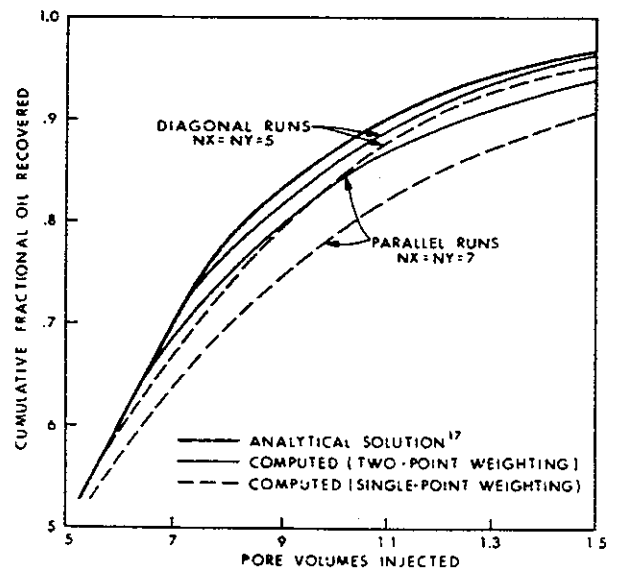


Fig. 20 - Recovery performance for a unit mobility ratio displacement in a confined five-spot pattern.

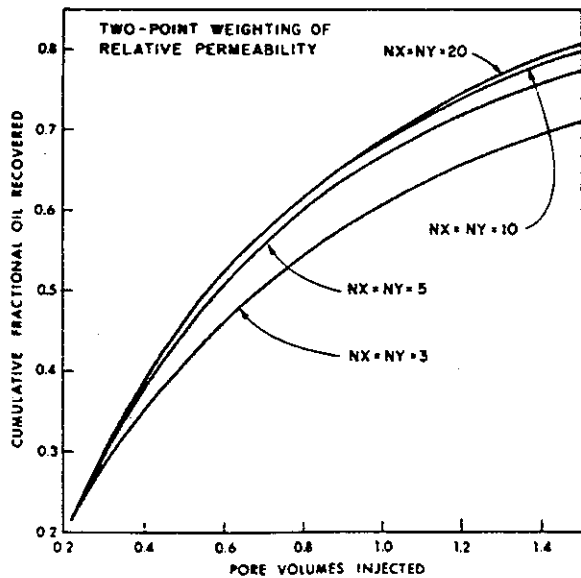


Fig. 21 - Recovery performance for an unfavorable ($M = 3.0$) displacement in a confined five-spot pattern.

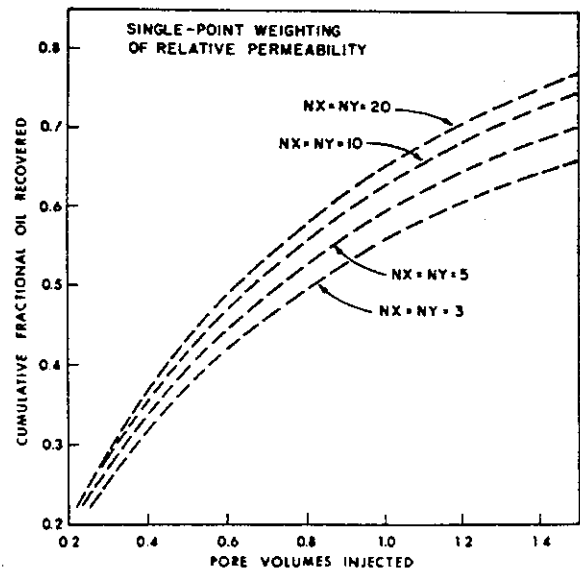


Fig. 22 - Recovery performance for an unfavorable ($M = 3.0$) displacement in a confined five-spot pattern.

parallèle qu'avec le maillage diagonal, (Nos remarques : ce qui est surprenant...) mais que dans les 2 cas, le schéma à 2 points est beaucoup plus précis que le schéma à 1 point.

Les figures 21 et 22 permettent de comparer la convergence des 2 schémas quand on affine le maillage, ceci pour un cas défavorable (maillage parallèle et rapport des mobilités $M=3$) ; avec le schéma à 2 points, les calculs ont pratiquement convergé pour $N=10$. En supposant que la courbe obtenue avec ce schéma et $N=20$ représente le résultat correct, on constate que le résultat avec le schéma à 2 points et $N=5$ est meilleur que le résultat avec le schéma à 1 point et $N=20$. Au niveau des temps de calcul, les auteurs font remarquer que l'augmentation de CPU étant de moins de 1% par Δt et par maille, quand on passe du schéma à 1 point au schéma à 2 points, le temps de calcul est globalement pour une précision équivalente, 40 fois plus élevé avec le schéma à 1 point qu'avec le schéma à 2 points.

Ces expériences numériques n'ayant été réalisées que sur des géométries simples à maillages uniformes, on peut se demander si les résultats en sont généralisables, auquel cas le schéma "upstream à 2 points" pourrait d'une part réduire la dispersion numérique produite par le schéma à 1 point, d'autre part aider à contourner les problèmes liés à l'orientation des maillages DF par rapport aux écoulements des fluides. Malheureusement, au vu des contraintes évoquées au § 4.2.2, il semble bien que ce schéma soit difficilement applicable en milieu hétérogène.

5. METHODES DE LINEARISATION ALTERNATIVES A NEWTON-RAPHSON

5.1. SCHEMA DE NEWTON-RAPHSON

Soit un système d'équations non linéaires :

$$f_i(x_1, \dots, x_n) = 0 \quad i = 1, \dots, n \quad (5.1.1)$$

A partir d'une estimation du vecteur de départ, $(x_1^r, x_2^r, \dots, x_n^r)$ on effectue un développement de Taylor au 1er ordre

$$\begin{aligned} f_i^{r+1} &= f_i(x_1^r + \Delta x_1^{r+1}, \dots, x_n^r + \Delta x_n^{r+1}) \\ &= f_i^r + \sum_j \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)^r \Delta x_j^{r+1} \end{aligned} \quad (5.1.2a)$$

$$\text{avec : } \Delta x_j^{r+1} = x_j^{r+1} - x_j^r \quad (5.1.2b)$$

Les $\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)^r$ sont les coefficients de la matrice jacobienne J_{ij}^r

Pour tendre au cours des itérations vers la solution du système 5.1.1, il faut que $f_i(x_1, \dots, x_n)$ tende vers 0 ; on pose donc :

$$f_i^{r+1} = 0 \Leftrightarrow f_i^r = - \sum_j \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)^r \Delta x_j^{r+1}$$

$$\text{ou } f_i^r = - [J_{ij}] \Delta x_j^{r+1}$$

Si on calcule le jacobien et son inverse (CN : matrice régulière), on résout :

$$\Delta x_j^{r+1} = - [J_{ij}^r]^{-1} f_i^r \quad (5.1.3a)$$

$$\text{puis } x_j^{r+1} = x_j^r + \Delta x_j^{r+1} \quad (5.1.3b)$$

On sait que si cette procédure converge vers la solution, elle converge normalement plus vite que celle de Picard avec une décroissance d'ordre 2 (l'erreur à l'itération $r + 1$ est proportionnelle au carré de l'erreur à l'itération r) alors que pour la procédure de Picard, le taux de décroissance est d'ordre 1 seulement.

5.2. SCHEMA "CHORD SLOPE"

Cette méthode est appliquée aux problèmes non linéaires transitoires ; elle est similaire à Newton-Raphson mais le développement de Taylor des f_i non linéaires est fait à partir des valeurs au pas de temps précédent et les gradients sont calculés par les cordes.

Soit le même système d'équations que ci-dessus :

$$f_i(x_1 \dots x_n) = 0 \quad i = 1, \dots, n \quad (5.2.1)$$

Soient $(x_1^{r+1} \dots x_n^{r+1})$ les valeurs calculées à l'itération $r + 1$ au pas de temps $k + 1$;

on pose $x_j^{r+1} = x_{jk} + \Delta x_j^{r+1}$ où les x_{jk} sont les valeurs calculées au pas de temps précédent k

$$f_i^{r+1} = f_{ik} + \Delta f_i^{r+1} \text{ avec } f_{ik} = f_i(x_{1k} \dots x_{nk})$$

$$\text{et } \Delta f_i^{r+1} = \sum_j \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)^r \Delta x_j^{r+1} \text{ avec } \Delta x_j^{r+1} = x_j^{r+1} - x_{jk} \quad (5.2.2)$$

Au lieu d'utiliser les pentes des tangentes comme pour Newton-Raphson, on utilise les cordes :

$$\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)^r = \left(\frac{f_i^r - f_{ik}}{x_j^r - x_{jk}} \right)$$

$$\text{on pose alors } f_i^{r+1} = 0 \Leftrightarrow f_{ik} = - \sum_j \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)^r \Delta x_j^{r+1}$$

$$\text{soit } \Delta x_j^{r+1} = \left[\left(\sum_j \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)^r \right]^{-1} f_{ik} \quad (5.2.3a)$$

$$\text{et } x_j^{r+1} = x_{jk} + \Delta x_j^{r+1} \quad (5.2.3b)$$

Par définition, (cf. éq. 5.2.2), f_{ik} n'est calculé qu'une fois à chaque pas de temps au lieu d'être mis à jour à chaque itération comme avec N.R. Cette procédure est donc moins lourde que le "full N.R."

5.3. VARIATIONS SUR NEWTON-RAPHSON ET PICARD

Paniconi *et al.* (1991) ont tenté une évaluation des méthodes de linéarisation de l'équation de Richards 1D, méthodes itératives ou non qui constituent des alternatives aux classiques méthodes de Newton et Picard :

- la méthode "full Newton-Raphson" (ou "Newton" simplement) se caractérise par un calcul du jacobien J_{ij}^r à chaque itération r (cf. § 5.1) ;
- si au lieu de calculer le jacobien à chaque itération, on prend pour approximation sa valeur initiale J_{ij}^1 , la convergence est plus lente mais encore possible; c'est la méthode de Newton de la "pente initiale" ou "simplified Newton" ;
- si la mise à jour du jacobien est faite de façon sélective plutôt qu'à chaque itération, on a la méthode "modified Newton" ;
- la méthode de la sécante est une autre variante avec le jacobien approché par une formule aux différences finies.

Ces variantes sont typiquement utilisées quand le jacobien ne peut pas être calculé analytiquement.

Le schéma de Newton (et ses variantes) est très sensible au point de départ : "good initial solution estimates are important in the successful convergence of the Newton (and other iterative) schemes".

En effet, contrairement aux systèmes linéaires pour lesquels des conditions de convergence globales peuvent être définies pour un schéma donné, les systèmes non linéaires ne peuvent être résolus itérativement que par convergence locale c'est-à-dire que la convergence ne peut être garantie que si l'estimation initiale est "assez près de la solution". Avec une mauvaise estimation de départ, Newton peut diverger mais si l'estimation est bonne, Newton converge plutôt rapidement alors que Picard ne diverge pas en général mais peut converger lentement ou pas du tout (oscillations). Newton est généralement plus robuste et moins sensible aux non linéarités que Picard. De plus comme on l'a vu plus haut, Newton converge quadratiquement et Picard seulement linéairement, mais Picard est plus simple à mettre en oeuvre et moins coûteux par itération. De plus, Picard préserve la symétrie de la discrétisation initiale alors que Newton génère toujours une matrice non symétrique.

Les observations ci-dessus sont faites par les auteurs après réalisation de différents tests en 1D.

Paniconi et Putti (1994) ont étendu l'étude des précédents à des écoulements 2D et 3D stationnaires et transitoires. Dans ce papier, ils proposent des techniques pour améliorer les performances de Picard et Newton quand des problèmes de convergence apparaissent avec des conditions aux limites complexes (suintement, injections/prélèvements multiples, infiltration/évaporation variables spatialement) ; en effet, ces facteurs ont des effets importants sur la performance des schémas itératifs. Pour améliorer les performances de ces méthodes, les auteurs ont testé des techniques de relaxation, d'approximation par la corde, de "mixed Picard Newton" :

- relaxation : 2 méthodes sont essayées :
 - . celle de Huyakorn *et al.* (1986) où le paramètre de relaxation Ω est variable en fonction de la solution aux itérations précédentes et en cours,
 - . celle où Ω est constant ;
- "mixed Picard Newton" : tenant compte des caractéristiques respectives des 2 schémas, on utilise Picard pour améliorer l'estimation de départ, sur quelques itérations, jusqu'à ce que le schéma ait commencé à converger de façon stable, puis on bascule sur Newton pour la suite des itérations ;

- "chord slope" : la méthode utilisée pour évaluer le terme de capacité $dS_w/d\psi$ et les composantes du jacobien pouvant affecter la convergence du schéma de Newton, 4 méthodes "chord slope" ont été testées, la première est basée sur une représentation du terme de capacité par la variation relative entre 2 itérations (donc différente de la méthode "chord slope" décrite au § 5.2) pour tous les noeuds de calcul sauf si $\Delta \psi < \varepsilon$ donné auquel cas on utilise la dérivée analytique, la seconde méthode est similaire à la première sauf que si $\Delta \psi < \varepsilon$ on utilise une formule DF centrée, la troisième méthode est "locale" c'est-à-dire que l'approximation de la corde n'est utilisée qu'aux noeuds de calcul pour lesquels la pression reste dans une fourchette de valeurs donnée, en dehors de ces zones, une différentiation analytique est effectuée, enfin la quatrième méthode est similaire à la troisième si ce n'est qu'on utilise la tangente et non la corde.

Les huit tests effectués (très bien commentés) ont montré que, en 2D et 3D en particulier :

- il existe des cas où le schéma de Picard converge alors que N.R. ne converge pas même si en général Newton est plus robuste que Picard ;
- la relaxation (variable ou fixe) améliore parfois la convergence, pas toujours ; les auteurs présentent un exemple 1D pour lequel "relaxation did not improve, and in some cases worsened, Picard convergence..." ; cette observation est quelque peu surprenante (D. Thiéry nous signale au contraire que la sous-relaxation améliore **toujours** la convergence du schéma de Picard dans le logiciel MARTHE) ;
- les différentes approximations par la corde "n'ont pas prouvé leur efficacité" sur les tests effectués ;
- la méthode mixte "Picard-Newton" peut quelquefois surmonter les difficultés de convergence de N.R. dues à sa sensibilité au point de départ ; cependant, cette méthode présente l'inconvénient de nécessiter deux modes de stockage de la matrice (symétrique et non-symétrique), à moins de stocker le système matriciel créé par Picard comme un système non-symétrique ; il reste par ailleurs à établir un critère optimal de basculement de Picard à Newton.

5.4. METHODES "QUASI-NEWTON"

Ces méthodes sont décrites par Putti et Paniconi (1994), elles sont basées sur l'utilisation d'approximations du jacobien ou de son inverse ; elles ont été testées seulement sur l'équation de Richards en 1D.

Si l'on reprend l'expression 5.1.2.a ci-dessus, on voit que on peut poser :

$$y^r = f_i^{r+1} - f_i^r = J_i^r \Delta x^{r+1}$$

Une approximation K du jacobien J^r est obtenue en faisant $K^{r+1} = y^r / \Delta x^{r+1}$ après avoir calculé Δx^{r+1} par 5.1.3a pour la première itération ; pour les itérations suivantes l'inverse de K^{r+1} est mise à jour par une formule simple, ce qui dispense de résoudre le système linéaire 5.1.3a à chaque itération. Plusieurs formules de mise à jour de K^{-1} sont proposées dans la littérature, Putti et Paniconi (1994) en décrivent deux.

Un schéma quasi-Newton efficace sera moins coûteux en CPU qu'un "full" Newton tout en garantissant au moins localement une convergence rapide. De plus, un choix judicieux de

l'approximation initiale du jacobien pourra dans certains cas, surmonter la trop grande sensibilité de N.R. à l'estimation de départ.

Dans la mise au point de ces schémas, il est important de ne pas détruire le caractère creux des matrices. Des recherches sont en cours sur les algorithmes tendant à remplacer le jacobien ou son inverse par des formules approchées. Putti et Paniconi (1994) présentent 2 tests en 1D pour lesquels Picard et N.R. ne convergent pas et des schémas "quasi-Newton" convergent mieux. Pour le 2D et le 3D, les recherches débutent.

5.5. SCHEMA DE TOUGH

Prenons l'exemple d'un des avatars de TOUGH appelé STMVOC (cf. Falta *et al.*, 1992), qui considère 3 phases en mouvement (aqueuse-gazeuse-NAPL) et 3 composants (eau, air et un composant organique) non isotherme ; les auteurs montrent que le système peut être donné sous forme discrétisée de $4N$ équations non linéaires pour N éléments de volume et 4 variables primaires par élément qui peuvent être P , S_g , S_w et T .

Le système à résoudre est de la forme :

$$R(X) = 0 \quad (\text{d'ordre } 4N)$$

La formule de Newton appliquée à ce système s'écrit

$$\sum_j \left(\frac{\partial R_i(x)}{\partial x_j} \right)^r \Delta x_j = -R_i(x)^r \text{ avec } \Delta x_j = x_j^{r+1} - x_j^r$$

où r est le niveau d'itération, R est le vecteur d'ordre $4N$ des résidus de l'équation et X est le vecteur des variables primaires.

Le vecteur X_j s'écrit en fait

$$\begin{pmatrix} P_j^r \\ Sg_j^r \\ Sw_j^r \\ T_j^r \end{pmatrix}$$

et le jacobien est formé de N éléments Y_{ij} qui sont des sous-matrices d'ordre 4 du type suivant (sur la diagonale) :

$$Y_{\ell,\ell} = \begin{bmatrix} \frac{\partial R_{\ell}^{w(t+\Delta t)}}{\partial P_{\ell}} & \frac{\partial R_{\ell}^{w(t+\Delta t)}}{\partial S_{g,\ell}} & \frac{\partial R_{\ell}^{w(t+\Delta t)}}{\partial T_{\ell}} & \frac{\partial R_{\ell}^{w(t+\Delta t)}}{\partial S_{w,\ell}} \\ \frac{\partial R_{\ell}^{a(t+\Delta t)}}{\partial P_{\ell}} & \frac{\partial R_{\ell}^{a(t+\Delta t)}}{\partial S_{g,\ell}} & \frac{\partial R_{\ell}^{a(t+\Delta t)}}{\partial T_{\ell}} & \frac{\partial R_{\ell}^{a(t+\Delta t)}}{\partial S_{w,\ell}} \\ \frac{\partial R_{\ell}^{c(t+\Delta t)}}{\partial P_{\ell}} & \frac{\partial R_{\ell}^{c(t+\Delta t)}}{\partial S_{g,\ell}} & \frac{\partial R_{\ell}^{c(t+\Delta t)}}{\partial T_{\ell}} & \frac{\partial R_{\ell}^{c(t+\Delta t)}}{\partial S_{w,\ell}} \\ \frac{\partial R_{\ell}^{h(t+\Delta t)}}{\partial P_{\ell}} & \frac{\partial R_{\ell}^{h(t+\Delta t)}}{\partial S_{g,\ell}} & \frac{\partial R_{\ell}^{h(t+\Delta t)}}{\partial T_{\ell}} & \frac{\partial R_{\ell}^{h(t+\Delta t)}}{\partial S_{w,\ell}} \end{bmatrix}$$

où w, a, c, h sont les indices des composants (respectivement eau, air, polluant, chaleur).

Les dérivées partielles sont calculées numériquement en incrémentant successivement chacune des variables primaires d'une petite quantité δx_j , les R_{ℓ} sont alors recalculés puis les

$$\delta R_{\ell} = R_{\ell}(x_j + \delta x_j) - R_{\ell}(X)$$

et enfin les
$$\frac{\partial R_{\ell}}{\partial x_j} \cong \frac{\delta R_{\ell}}{\delta x_j}$$

Dans Adenaken *et al.* (1993) qui décrit une extension de STMVOC à n composants organiques M2NOTS, il est précisé que avec des machines 64 bits, le petit incrément δx_j est de l'ordre de 10^{-8} à 10^{-7} .

Donc on approche $\frac{\partial R_{\ell}}{\partial x_j}$ par $\frac{\delta R_{\ell}}{\delta x_j}$ numérique.

On peut se demander si ce procédé est plus efficace qu'une approximation "chord slope".

CONCLUSION

Les conclusions respectivement des auteurs et de nous-mêmes, concernant les différents schémas analysés et présentés aux § 1 et 2, ont été données au fur et à mesure de la présentation et ne seront donc pas reprises ici. De même, nous avons donné au chapitre 3 les conclusions de Aziz et Settari sur les méthodes de résolution les plus courantes.

Au terme de cette étude qui nous a permis de constater la grande complexité de la physique des phénomènes polyphasiques et des techniques de résolution pour les simuler, nous pouvons faire quelques remarques :

- les écoulements diphasiques totalement immiscibles représentés, par exemple, par le problème très simple de Buckley-Leverett, ne semblent pas être les plus répandus dans la réalité et on est souvent amené à prendre en compte des phénomènes de transport de polluant dissous par les phases et éventuellement d'échange de masse entre phases ; ceci est particulièrement vrai du diphasique eau-gaz, le transport de polluants volatiles par le gaz n'étant en général pas négligeable comme l'ont montré différents auteurs cités ;
- l'analyse présentée au § 3 montre que les problèmes de convergence et stabilité liés au choix de la technique de linéarisation ne sont pas triviaux, même dans le cas du problème le plus simple (B-L en 1D), lorsqu'on souhaite éviter l'emploi du "tout implicite" qui, par ailleurs n'est pas exempt d'inconvénients tels qu'une plus grande dispersion numérique, qui croît avec le pas de temps de calcul ;
- sur un échantillon de 12 publications analysées aux § 1 et 2, on constate que 7 auteurs utilisent la méthode SS (en pression/pression ou en pression/saturation), 8 linéarisent le système d'équations avec N.R. (le plus souvent "full N.R."), 7 déclarent utiliser la pondération "upstream" sur les perméabilités relatives ou les mobilités et parmi les 7, 4 la pondération harmonique sur les perméabilités intrinsèques ;
- la méthode SS avec linéarisation par Newton-Raphson semble donc la plus utilisée si l'on se réfère à notre échantillon bibliographique ; il n'est pas toujours clair cependant (sauf dans le cas de Moridis et Reddel, 1991), lorsque les auteurs déclarent utiliser un schéma implicite s'il s'agit d'un schéma totalement implicite (c'est-à-dire non seulement pour les variables primaires mais aussi pour tous les coefficients matriciels), tel que définit au § 3.

REFERENCES

R1 Généralités

Abriola L.M. and Pinder G.F. (1985a) - A multiphase approach to the modeling of porous media contamination by organic compounds, 1: equation development. *Water Resources Res.*, 21(1), pp. 11-18.

Abriola L.M. and Pinder G.F. (1985b) - A multiphase approach to the modeling of porous media contamination by organic compounds, 2: numerical simulation. *Water Resources Res.*, 21(1), pp. 19-26.

Allen M.B.III (1985) - Numerical modeling of multiphase flow in porous media. *Adv. Water Res.*, 8, pp. 162-187.

Aziz K. and Settari A. (1979) - Petroleum Reservoir Simulation. *Applied Science Publishers Ltd.*, London.

Bear J., Braester C. and Menier P. C. (1987) - Effective and relative permeabilities of anisotropic porous media. *Trans. Porous Media*, 2, pp. 301-316.

Huyakorn P.S. and Pinder G.F. (1983) - Computational Methods in Subsurface Flows. *Academic Press*, New York, N.Y..

Panday S. and Corapcioglu M.Y. (1989) - Reservoir transport equations by compositional approach. *Trans. Porous Media*, 4, pp. 369-393.

Parker J.C. (1989) - Multiphase flow and transport in porous media. *Rev. Geophysics*, 27, 3, pp. 311-328.

R2 Relations caractéristiques

Parker J.C., Lenhard R.J. and Kuppusamy T. (1987) - A parametric model for constitutive properties governing multiphase flow in porous media. *Water Resources Res.*, 23, (4), pp. 618-624.

R3 Monophasique (pour comparaison)

Huyakorn P.S., Springer E.P., Guvanasen V. and Wadsworth T.D. (1986) - A three-dimensional finite element model for simulating water flow in variably saturated porous media. *Water Resources Res.*, 22, (13), pp. 1790-1808.

Cooley R.L. (1983) - Some new procedures for numerical solution of variably saturated flow problems. *Water Resources Res.*, 19, pp. 1271-1285.

Kirkland M.R., Hills R.G. and Wierenga P.J. (1992) - Algorithms for solving Richards' equation for variably saturated soils. *Water Resources Res.*, 28, pp. 2049-2058.

R4 Diphasique

Abriola L. M. and Rathfelder K. (1993) - Mass balance errors in modeling two-phase immiscible flows: causes and remedies. *Adv. Water Res.*, 16, pp. 223-239.

Buckley S.E. and Leverett G.F. (1942) - Mechanism of fluid displacement in sands, *Trans. American Institute of Mining, Metallurgical and Petroleum Engineers*, 146, pp. 107-116.

Celia M. A. and Binning P. (1992) - A mass conservative numerical solution for two-phase flow in porous media with application to unsaturated flow. *Water Resources Res.*, 28(10), pp. 2819-2828.

Faust C.R. (1985) - Transport of immiscible fluids within and below the unsaturated zone. *Water Resources Res.*, 21(4), pp. 587-596.

Faust C.R., Guswa J.H. and Mercer J.W. (1989) - Simulation of three-dimensional flow of immiscible fluids within and below the unsaturated zone. *Water Resources Res.*, 25(12), pp. 2449-2464.

Forsyth P.A. (1988) - Simulation of non aqueous phase groundwater contamination. *Adv. Water Res.*, 11, pp. 74-83.

Forsyth P.A., Wu Y.S. and Pruess K. (1995) - Robust numerical methods for saturated-unsaturated flow with dry initial conditions in heterogeneous media. *Adv. Water Res.*, 18, pp. 25-38.

Huyakorn P.S. and Pinder G.F. (1978) - A new finite element technique for the solution of two-phase flow through porous media. *Adv. Water Res.*, vol 1, 5.

Kaluarachchi J.J. and Parker J.C. (1989) - An efficient finite element method for modeling multiphase flow. *Water Resources Res.*, 25(1), pp. 43-54.

Kueper B.H., Abbot W. and Farquhar G. (1989) - Experimental observations of multiphase flow in heterogeneous porous media. *J. Contam. Hydrol.*, 5, pp. 83-95.

Kueper B.H. and Frind E.O. (1991a) - Two-phase flow in heterogeneous porous media, 1: model development. *Water Resources Res.*, 27(6), pp. 1049-1057.

Kueper B.H. and Frind E.O. (1991b) - Two-phase flow in heterogeneous porous media, 2: model application. *Water Resources Res.*, 27(6), pp. 1059-1070.

Kuppusamy T., Sheng J., Parker J.C. and Lenhard R.J. (1987) - Finite element analysis of multiphase immiscible flow through soils. *Water Resources Res.*, 23(4), pp. 625-631.

McWhorter D.B. and Sunada D.K. (1990) - Exact integral solutions for two phase flow, *Water Resources Res.*, 26(3), 399-413.

Morel-Seytoux H. J. and Billica J. A. (1985a) - A two phase numerical model for prediction of infiltration: application to a semi-infinite soil column. *Water Resources Res.*, 21(4), pp. 607-615.

Morel-Seytoux H.J. and Billica J.A. (1985b) - A two phase numerical model for prediction of infiltration: case of an impervious bottom. *Water Resources Res.*, 21(9), pp. 1389-1396.

Moridis G.J. and Reddell D.L. (1991a) - Secondary water recovery by air injection, 1: the concept and the mathematical and numerical model. *Water Resources Res.*, 27(9), pp. 2337-2352.

Moridis G.J. and Reddell D.L. (1991b) - Secondary water recovery by air injection, 2: the implicit simultaneous solution method. *Water Resources Res.*, 27(9), pp. 2353-2368.

Moridis G.J. and Reddell D.L. (1991c) - Secondary water recovery by air injection, 3: evaluation of feasibility. *Water Resources Res.*, 27(9), pp. 2369-2379.

Pruess K. (1990) - Overview of TOUGH2, a general-purpose numerical simulator for multiphase nonisothermal flows, in Proceedings of the TOUGH workshop *Lawrence Berkeley Laboratory*, Sept. 13-14.

Sleep B.E. and Sykes J.F. (1989) - Modeling the transport of volatile organics in variably saturated media. *Water Resources Res.*, 25(1), pp. 81-92.

R5 Techniques numériques et méthodes de résolution

Douglas J.Jr., Peaceman D.W. and Rachford H.,H.,Jr. (1959) - A method for calculating multi-dimensional immiscible displacement. *Trans. American Institute of Mining, Metallurgical and Petroleum Eng.*, 216, pp. 297-306.

Forsyth P.A. and Sammon P.H. (1986) - Practical considerations for adaptive implicit methods in reservoir simulation. *J. Comp. Phys.*, 62, pp. 265-281.

Fung L.S.K., Collins D.A. and Nghiem L.X. (1989) - An adaptive implicit switching criterion based on numerical stability analysis. *SPE reservoir eng.*, 4, pp .45-51.

Paniconi C., Aldama A. and Wood E.F. (1991) - Numerical evaluation of iterative and non iterative methods for the solution of the nonlinear Richards' equation. *Water Resources Res.*, 27(6), pp. 1147-1163.

Paniconi C. and Putti M. (1994) - A comparison of Picard and Newton iteration in the numerical solution of multidimensional variably saturated flow problems. *Water Resources Res.*, 30(12), pp. 3357-3374.

Putti M. and Paniconi C. (1994)- Quasi-Newton methods for Richards' equation., *Computational Methods In Water Resources X*, pp. 99-106.

Sammon P. H. (1988) - An analysis of upstream differencing *SPE reservoir Eng.*, 3, pp. 1053-1056.

Thomas G. W. and Thurnau D.H. (1983) - Reservoir simulation using an adaptive implicit method. *Soc. Pet. Eng. J.*, 23, pp. 759-768.

Todd M.R., O'Dell P.M. and Hirasaki G.J. (1972) - Methods for increased accuracy in numerical reservoir simulations. *Soc. Pet. Eng. J.*, 12, pp. 515-530.

R6 Triphasique

Abriola L.M. and Pinder G.F. (1985a) - A multiphase approach to the modeling of porous media contamination by organic compounds, 1: equation development. *Water Resources Res.*, 21, pp. 11-18.

Abriola L.M. and Pinder G.F. (1985b) - A multiphase approach to the modeling of porous media contamination by organic compounds, 2: numerical simulation., *Water Resources Res.*, 21(1), pp. 19-26.

Adenekan A.E., Patzek T.W. and Pruess K. (1993) - Modeling of multiphase transport of multicomponent organic contaminants and heat in the subsurface: numerical model formulation., *Water Resources Res.*, 29, (11), pp. 3727-3740.

Falta R.W., Pruess K., Javandel I. and Witherspoon P.A. (1992) - Numerical modeling of steam injection for the removal of nonaqueous phase liquids from the subsurface, 1: numerical formulation. *Water Resources Res.*, 28(2), pp. 433-449.

Forsyth P.A. and Shao B.Y. (1991) - Numerical simulation of gas venting for NAPL site remediation. *Adv. Water Res.*, 14, 6, pp. 354-357.

Forsyth P.A. (1993) - A positivity preserving method for simulation of steam injection for NAPL site remediation. *Adv. Water Res.*, 16, pp. 351-370.

Huyakorn P.S., Panday S. and Wu Y.S. (1994) - A three-dimensional multiphase flow model for assessing NAPL contamination in porous and fractured media, 1: formulation. *J. Contam. Hydrology*, 16, pp. 109-130.

Kaluarachchi J.J. and Parker J.C. (1992) - Multiphase flow with a simplified model for oil entrapment. *Trans. in Porous Media*, 7, pp. 1-14.

Panday S., Wu Y.S., Huyakorn P.S. and Springer E.P. (1994) - A three-dimensional multiphase flow model for assessing NAPL contamination in porous and fractured media, 2: porous medium simulation examples. *J. Contam. Hydrology*, 16, pp. 131-156.

Reeves H.W. and Abriola L.M. (1994) - An iterative compositional model for subsurface multiphase flow. *J. Cont. Hydrology*, 15, pp. 249-276.

R7 Compositional model

Baehr A.L. and Corapcioglu M.Y. (1987) - A compositional multiphase model for groundwater contamination by petroleum products, 2: numerical solution. *Water Resources Res.*, 23 (1), pp. 201-213.

Corapcioglu M.Y. and Baehr A.L. (1987) - A compositional multiphase model for groundwater contamination by petroleum products, 1: theoretical considerations. *Water Resources Res.*, 23 (1), pp. 191-200.

Panday S., Forsyth P.A., Falta R.W., Wu Y.S. and Huyakorn P.S. (1995) - Considerations for robust compositional simulations of subsurface nonaqueous phase liquid contamination and remediation. *Water Resources Res.*, 31(5), pp. 1273-1289.

Sleep B.E. and Sykes J.F. (1993a) - Compositional simulation of groundwater contamination by organic compounds, 1: model development and verification. *Water Resources Res.*, 29(6), pp. 1697-1708.

Sleep B.E. and Sykes J.F. (1993b) - Compositional simulation of groundwater contamination by organic compounds, 2: model applications. *Water Resources Res.*, 29(6), pp. 1709-1718.

R8 Local vertical equilibrium

Coats K.H., Nielsen R.L., Terhune M.H. and Weber A.G. (1967) - Simulation of three-dimensional, two-phase flow in oil and gas reservoirs. *Society of Petroleum Engineers Journal*, pp. 377-388.

Cooper G.S., Peralta R.C. and Kaluarachchi J.J. (1995) - Stepwise pumping approach to improve free phase light hydrocarbon recovery from unconfined aquifers. *J. Contam. Hydrology*, 18, pp. 141-159.

Huyakorn P.S., Wu Y.S. and Park N.S. (1994) - An improved sharp-interface model for assessing NAPL contamination and remediation of ground-water systems. *J. Contam. Hydrology*, 16, pp. 203-234.

Kaluarachchi J.J., Parker J.C. and Lenhard R.J. (1990) - A numerical model for areal migration of water and light hydrocarbon in unconfined aquifers. *Adv. Water Res.*, vol 13, 1.

Parker J.C. and Lenhard R.J. (1989) - Vertical integration of three-phase flow equations for analysis of light hydrocarbon plume movement. *Trans. Porous Media*, 5, pp. 187-206.

Parker J.C., Zhu J.L., Johnson T.G., Kremesec V.J. and Hockman E.L. (1994) - Modeling free product migration and recovery at hydrocarbon spill sites. *Ground Water*, 32, 1, pp. 29-40.

AUTRES REFERENCES

(citées, mais non lues et non en notre possession)

McCreary J.G. (1971) - A simple method for controlling gas percolation in numerical simulation of solution gas drive reservoirs. *Trans. Soc. Petrol. Eng.*, 251, pp. 85-91.

Settari A. and Aziz K. (1975) - Treatment of nonlinear terms in the numerical solution of partial differential equations for multiphase flow in porous media. *Int. J. Multiphase Flow*, 1, pp. 817-844.

ANNEXES

A1. Quelques définitions venant des pétroliers : notions de "black oil model", "volume factor" et "transmissibility"

Ces définitions sont extraites de Aziz et Settari (1979), Huyakorn et Pinder (1983), Allen (1985).

Une formulation complète des équations d'écoulement multiphasique dans les réservoirs pétroliers nécessite de prendre en compte les variations spatiales et temporelles de tous les composants dans le système considéré. Ceci donne lieu aux "compositional models" déjà évoqués en introduction.

Une approche simplifiée consiste à :

- considérer 3 phases fluides, gaz-huile-eau, la phase mouillante étant l'eau, la phase non mouillante le gaz, et la phase intermédiaire l'huile ;
- négliger les transferts entre phases par vaporisation ou condensation ;
- supposer que l'huile et l'eau sont parfaitement immiscibles de même que le gaz et l'eau ;
- ne prendre en compte qu'un seul type d'échange, la dissolution du gaz dans l'huile (mais pas dans l'eau) ;

de plus, on admet que :

- les fluides sont à température constante et en équilibre thermodynamique dans le réservoir; ces hypothèses constituent l'approche "black oil" des pétroliers.

Par ailleurs, il faut prendre en compte le fait qu'une masse donnée de fluide n'occupe pas les mêmes volumes aux conditions physiques du réservoir (RC ou reservoir conditions) qu'à la surface du sol (STC ou stock tank conditions) ; ceci est particulièrement vrai de l'huile et du gaz; en effet, le gaz peut changer de volume dans des proportions très importantes du fait de sa grande compressibilité, d'un autre côté, l'huile aux conditions élevées de température et de pression du réservoir contient des quantités importantes de gaz dissous, qui se vaporise sous l'effet des pressions beaucoup plus basses qui existent à la surface (cf. figure 23 extraite de Huyakorn et Pinder, 1983).

Pour prendre en compte les changements de volume dûs à des différences de pression entre le réservoir et la surface, il s'est avéré utile d'introduire des "formation volume factors" pour chaque phase et un ratio R_s de gaz dissous dans l'huile ; le "formation volume factor" de la

phase fluide l est donné par $B_l = \frac{V_{rc}}{V_{stc}}$, rapport du volume d'une masse de fluide l donnée aux conditions du reservoir (RC) au volume de cette même masse aux conditions de surface (STC) ; pour la phase huileuse, il faut tenir compte du volume de gaz dissous V_{dg} ; ces rapports ne sont fonction que des pressions, on a donc :

$$\text{pour l'huile} \quad B_o = \frac{[V_o + V_{dg}]_{RC}}{[V_o]_{STC}} = f_l(P_o)$$

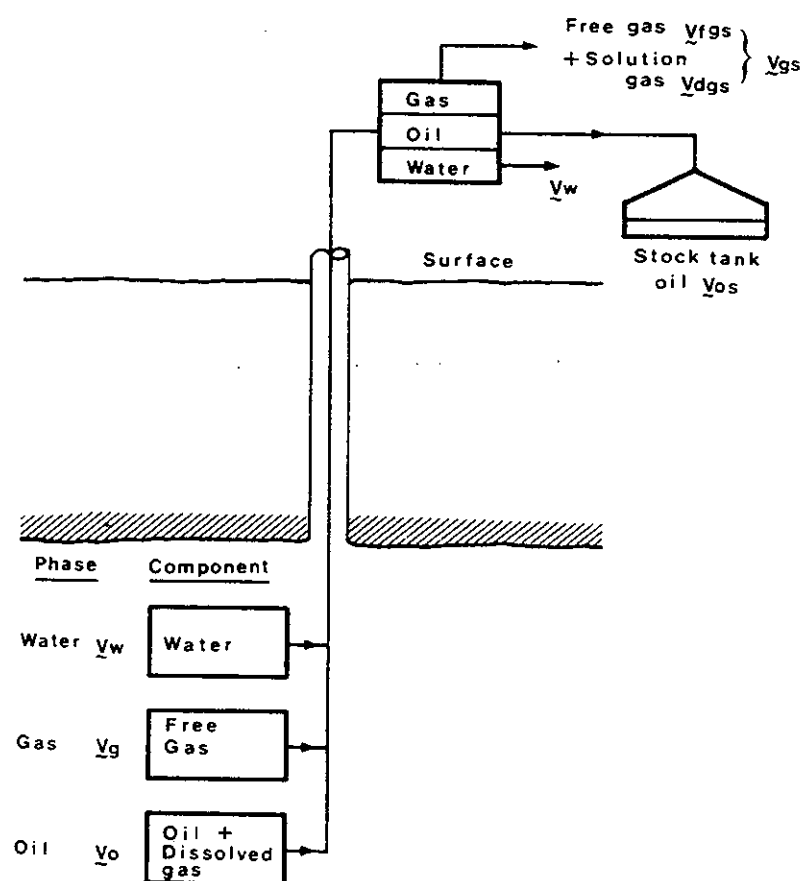


Fig. 23 - Changes that take place in the production from a three-phase hydrocarbon system (V denotes volume).

pour l'eau $B_w = \frac{[V_w]_{RC}}{[V_w]_{STC}} = f_2(P_w)$

pour le gaz $B_g = \frac{[V_g]_{RC}}{[V_g]_{STC}} = f_3(P_g)$

Le ratio de gaz dissous dans l'huile est $R_s = \left[\frac{V_{dg}}{V_o} \right]_{STC} = f_4(P_o)$

En faisant des bilans volumiques aux conditions de surface, on obtient les équations de continuité pour les 3 composants eau, huile, gaz:

$$(1) \text{ eau : } \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{k_{ij} \lambda_w}{B_w} \left(\frac{\partial p_w}{\partial x_j} + \rho_w g \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \right] = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\omega S_w}{B_w} \right) + Q_{ws} \quad (A1a)$$

$$(2) \text{ huile : } \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{k_{ij} \lambda_o}{B_o} \left(\frac{\partial p_o}{\partial x_j} + \rho_o g \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \right] = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\omega S_o}{B_o} \right) + Q_{os} \quad (A1b)$$

$$(3) \text{ gaz : } \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{k_{ij} \lambda_g}{B_g} \left(\frac{\partial p_g}{\partial x_j} + \rho_g g \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{R_s k_{ij} \lambda_o}{B_o} \left(\frac{\partial p_o}{\partial x_j} + \rho_o g \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \right] \\ = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\omega S_g}{B_g} + \frac{R_s \omega S_o}{B_o} \right) + Q_{gs} \quad (A1c)$$

où k est la perméabilité intrinsèque, ω la porosité, S_w, S_o, S_g les saturations et où Q_{ws}, Q_{os}, Q_{gs} sont les taux de production par unité de volume de milieu poreux, à la surface et $\lambda_w, \lambda_o, \lambda_g$ les mobilités.

On trouve aussi dans la littérature, par exemple dans Aziz et Settari, (1979), le terme de "transmissibility" Λ_ℓ qui est représentée par $\Lambda_\ell = \frac{K_{r\ell} k}{\mu_\ell B_\ell} = \frac{\lambda_\ell k}{B_\ell}$ pour le fluide ℓ .

Les 3 équations A1a à A1c forment le système aux dérivées partielles pour l'écoulement triphasique de type "black oil", il comporte 9 inconnues $P_w, P_o, P_g, K_{rw}, K_{ro}, K_{rg}, S_w, S_o, S_g$ les 6 équations caractérisent suivantes complètent le système ci-dessus :

$$\begin{aligned} K_{rw} &= K_{rw}(S_o, S_w) \\ K_{ro} &= K_{ro}(S_o, S_w) \\ K_{rg} &= K_{rg}(S_o, S_w) \\ S_w + S_o + S_g &= 1 \\ P_{cow} &= P_o - P_w = f_1(S_o, S_w) \\ P_{cgo} &= P_g - P_o = f_2(S_o, S_g) \end{aligned}$$

Dans le cas simplifié où le réservoir ne contient pas ou peu de gaz dissous ou libre, on peut négliger les variations de volume avec la pression ; on obtient alors le système d'équations diphasique eau-huile habituel

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[k_{ij} \lambda_w \left(\frac{\partial p_w}{\partial x_j} + \rho_w g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) \right] = \frac{\partial}{\partial t} (\omega S_w) + Q_w$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[k_{ij} \lambda_o \left(\frac{\partial p_o}{\partial x_j} + \rho_o g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) \right] = \frac{\partial}{\partial t} (\omega S_o) + Q_o$$

avec $Q_l = \frac{Q_{ls}}{B_l}$ pour $l = w$ ou o

et où les B_l sont supposés constants.

On peut alors résoudre ce système diphasique à un seul composant par phase en prenant en compte seulement 4 relations caractéristiques :

$$\begin{aligned} K_{rw} &= K_{rw}(S_w) \\ K_{ro} &= K_{ro}(S_o) \\ S_o + S_w &= 1 \\ P_{cow} &= P_o - P_w = f(S_w) \end{aligned}$$

A2. Une simplification fréquemment rencontrée l'hypothèse d'équilibre vertical (VE)

Cette approche simplificatrice est rencontrée suffisamment souvent dans la littérature concernant les problèmes tri-phasiques pour mériter, à notre avis, une présentation particulière ; nous nous inspirons ci-après essentiellement de Parker (1989).

On considère un scénario de pollution par un LNAPL qui après infiltration dans le sol s'étale au-dessus de la surface libre de la nappe ; après un certain temps, la redistribution verticale de l'hydrocarbure cesse et les pressions en tout point sont pratiquement hydrostatiques. Si on dispose de piézomètres adéquats, on observe dans ce cas une lentille d'huile flottant sur l'eau à une certaine profondeur. En pratique, le problème consiste à interpréter les données piézométriques en vue de déterminer la quantité de polluant dans le sol ; pour ce faire, on cherche à évaluer les distributions verticales de pression à partir des observations des niveaux piézométriques et à l'aide des relations caractéristiques tri-phasiques.

Il est possible de définir des "surfaces libres" pour les différentes phases à partir des niveaux piézométriques observés : on définit ainsi une cote Z_{a0} à laquelle la pression d'huile est atmosphérique et une cote Z_{ow} à laquelle les pressions d'eau et d'huile sont égales ; de plus en théorie il faut définir la cote Z_{aw} pour laquelle la pression d'eau est atmosphérique (cf. fig. 24).

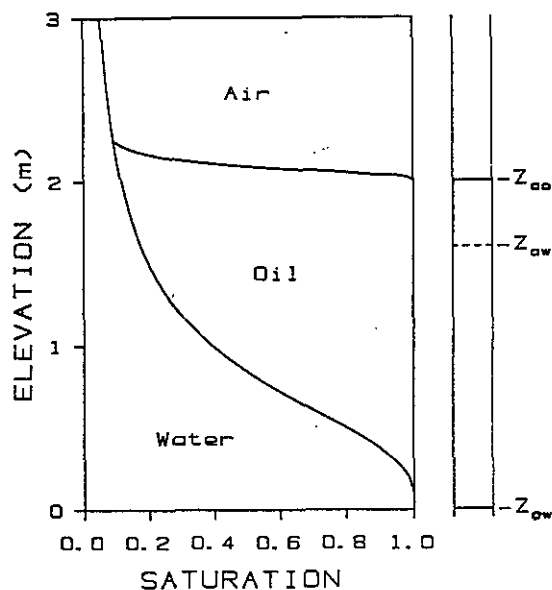


Fig. 24 - Water and total liquid saturation distributions for a vertical equilibrium system.

On définit les charges pour les phases eau et huile

$$\psi_w = h_w + Z \text{ et } \psi_o = h_o + \rho_{ro} Z$$

avec $\rho_{ro} = \frac{\rho_o}{\rho^*}$ et $h_\ell = \frac{P_\ell}{\rho^* g}$ pour $\ell = w, o$ (ρ^* densité de référence)

L'équilibre vertical nécessite que $\frac{\partial \psi_w}{\partial Z} = \frac{\partial \psi_o}{\partial Z} = 0$

d'où on déduit facilement
$$\begin{aligned} h_w &= Z_{aw} - Z \\ h_o &= \rho_{ro}(Z_{ao} - Z) \end{aligned}$$

puisque $h_w = 0$ pour $Z = Z_{aw}$ et $h_o = 0$ pour $Z = Z_{ao}$

Soit finalement $Z_{ow} = Z_{aw} - \rho_{ro} H_o$

où $H_o = Z_{ao} - Z_{ow}$ est la hauteur piézométrique d'huile (cf. fig. 24); les différentes cotes sont

alors reliées par la relation
$$Z_{ow} = (Z_{aw} - \rho_{ro} Z_{ao}) / (1 - \rho_{ro}).$$

Les hauteurs capillaires air-huile et huile-eau sont alors données par :

$$\begin{aligned} h_{ao} &= h_a - h_o = \rho_{ro} (Z - Z_{ao}) \\ h_{ow} &= h_o - h_w = (1 - \rho_{ro}) (Z - Z_{aw}) \end{aligned}$$

Connaissant les relations $S_w(h_{ow})$ et $S_t(h_{ao})$, les distributions verticales des saturations telles que celles présentées sur la figure 24 sont facilement obtenues. Le volume spécifique réel d'huile V_o est toujours nettement inférieur à la hauteur piézométrique H_o , il peut être calculé à partir de la distribution de saturation $S_o(z)$ par :

$$V_o = \int_{Z_{ow}}^{Z_u} \omega S_o(Z) dZ$$

où Z_u est la cote à la surface du sol.