

Université Pierre et Marie Curie/INRIA Paris-Rocquencourt, équipe  
SERENA

# Rapport de Stage

pour l'obtention du Master 2

Spécialité : Mathématiques de la modélisation

**Estimation a posteriori pour l'écoulement et transport de  
contaminants en milieu poreux**

présenté par Jad Dabaghi

## Encadrants :

- Monsieur Martin Vohralik : Directeur de recherche et responsable de l'équipe SERENA à l'INRIA Paris-Rocquencourt (encadrant principal).
- Monsieur Vincent Martin : Maître de conférences à l'UTC de Compiègne et collaborateur de l'équipe SERENA.



22 Septembre 2015



# Table des matières

<b>Remerciements</b>	<b>0</b>
<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 Problème de deux membranes</b>	<b>5</b>
1.1 Etude préliminaire . . . . .	5
1.1.1 Quelques généralités . . . . .	5
1.1.2 Le problème discret réduit et son analyse a priori . . . . .	10
1.1.3 Le problème discret complet . . . . .	11
1.2 Analyse a posteriori . . . . .	13
1.2.1 Principe de la méthode . . . . .	13
1.2.2 Application au problème des membranes . . . . .	13
1.2.3 La notion de flux . . . . .	13
1.2.4 Reconstruction des flux équilibrés . . . . .	14
1.2.5 Estimation d'erreur a posteriori . . . . .	18
1.3 Résolution . . . . .	23
<b>2 Écoulement diphasique liquide–gaz avec échange entre les phases comme un problème de complémentarité non linéaire en milieu poreux</b>	<b>27</b>
2.1 Formulation du problème . . . . .	27
2.1.1 Inconnues et paramètres du problème . . . . .	28
2.1.2 Géométrie du domaine et milieu poreux . . . . .	28
2.1.3 Loi de Darcy, équations de conservations, pression capillaire et loi d'Henry. . . . .	29
2.1.4 Hypothèses simplificatrices . . . . .	32
2.1.5 Modèle d'étude . . . . .	33
2.1.6 Système d'équations aux dérivées partielles avec inéquations variationnelles . . . . .	33
2.2 Discrétisation . . . . .	34
2.2.1 Quelques généralités . . . . .	34
2.3 Méthode de résolution . . . . .	38
2.3.1 Étude préliminaire des C-fonctions . . . . .	38
2.3.2 Algorithme Newton–Min . . . . .	39
2.3.3 Simulation numérique matlab . . . . .	40
<b>Conclusion</b>	<b>45</b>



# Remerciements

Je tiens à adresser mes plus sincères remerciements à Monsieur Martin Vohralik, directeur de recherche et chef de l'équipe SERENA à l'INRIA Paris-Rocquencourt, pour sa disponibilité, ses conseils précieux, son soutien, sa gentillesse et son écoute tout le long de mon stage.

Je n'oublierai pas non plus la gentillesse de Mademoiselle Ibtihel BenGharbia (chercheur en mathématiques appliquées à l'Institut français du pétrole et énergies nouvelles) et de Monsieur Vincent Martin, maître de conférences à l'UTC de Compiègne et collaborateur de l'équipe SERENA qui ont accepté d'intervenir régulièrement dans mon stage.

Ma gratitude va également vers Monsieur Jérôme Jaffré et Madame Jean Roberts, directeurs de recherche et membres bénévoles de l'équipe SERENA, pour leur soutien sans faille et leur grande disponibilité.

D'une manière plus générale, je remercie toute l'équipe SERENA pour leur accueil chaleureux, la confiance qu'ils ont su m'accorder et l'ambiance conviviale qu'ils m'ont fait partager.

J'ai connu des personnalités incroyables, humaines et philanthropes.

Pour finir, une attention très particulière à mes amis, mes proches, ma famille et notamment un clin d'œil à ma mère, Zakia Benjelloun-Touimi, pour ses conseils et son soutien inconditionnel durant cette belle aventure menée à l'INRIA.



# Introduction

Nombreuses furent les questions que je me posais avant d'intégrer l'équipe SERENA dans le cadre de la réalisation de mon stage de deuxième année de Master de Mathématiques à l'Université Pierre et Marie Curie. En effet, le projet SERENA de l'INRIA Paris–Rocquencourt a pour vocation la construction et l'analyse d'outils de simulation pour la modélisation des problèmes liés à l'environnement et aux énergies. Ces problèmes ont occupé une bonne partie de ma deuxième année de Master et alimenté les diverses questions que je me posais. Comment préserver l'écosystème des dangers causés par les déséquilibres, engendrés par les activités humaines et/ou par les changements naturels, tant climatique, géologique ou géophysique ? Comment limiter et minimiser l'impact de ces dangers sur l'écosystème dans une vision de garder ses ressources durables et/ou renouvelables ? Ces questions sont déjà une source inépuisable de travaux pour comprendre la physique sous-jacente de ces processus complexes ; en effet, il y a la phénoménologie de la problématique environnementale à cerner tant par les aspects multi-échelles en temps qu'en espace, poser des modèles physiques décrivant les problèmes et ensuite passer aux modèles numériques et leur étude mathématique. Les résultats de la simulation numérique de ces modèles apporteront des éléments de réponse pour une meilleure préservation de l'écosystème et ses ressources.

Dans ce travail, on se limite à une facette de cette vaste problématique, à savoir les conséquences des activités humaines industrielles, notamment celle relative aux techniques d'enfouissement des déchets radioactifs dans le sol.

Ainsi, l'application qui motive la présente étude est le problème du stockage des déchets radioactifs dans des couches géologiques profondes. Ce stockage provoque entre autres une production d'hydrogène issue de la dégradation chimique de certains matériaux de stockage. L'objectif à terme pour les industriels est de pouvoir contrôler cette éjection de gaz, responsable important de la dégradation de l'écosystème, en comprenant son évolution par la simulation numérique. L'analyse des résultats de celle-ci devra par conséquent permettre de proposer des solutions techniques d'enfouissement plus robustes et plus fiables à de grandes échelles en temps, facteur important dans ce problème.

Il s'agit donc pour nous d'étudier un écoulement diphasique liquide–gaz (la phase liquide pouvant contenir de l'eau et de l'hydrogène dissous et la phase gazeuse de l'hydrogène) en milieu poreux et notamment la production d'hydrogène gazeux. Ce type d'écoulement est bien décrit par les équations générales de Darcy diphasiques desquelles sera dérivé le modèle numérique de notre étude. Les équations aux dérivées partielles du modèle retenu présentent des particularités et complexités assez importantes comme la dégénérescence du terme elliptique de diffusion et l'appari-

tion et la disparition de la phase gazeuse. Une des techniques existantes pour traiter ces difficultés, en particulier le phénomène d'apparition/disparition de phases, est la technique de complémentarité ([3] et [4]). Un point particulier de ce stage est d'étudier l'application de la théorie des estimateurs a posteriori sur les équations modèles des écoulements diphasiques traitées par la technique de complémentarité en dimension une d'espace.

Au vu de la complexité du cas diphasique liquide–gaz, décrit ci-dessus, même en une dimension d'espace, on étudiera dans un premier temps un problème plus simple mais qui contient des éléments clés du modèle à 2 phases, à savoir celui du contact entre deux membranes. Ce modèle simplifié, basé sur un système d'équations aux dérivées partielles linéaires, reliées par des conditions de complémentarités non linéaires permettra de poser les résultats théoriques sur les estimateurs d'erreurs a posteriori pour les inégalités variationnelles.

Dans cette optique, nous étudions dans le Chapitre 1 le problème du contact entre deux membranes sur lequel nous menons les résultats théoriques essentiels à la construction d'un estimateur d'erreur a posteriori (s'inspirant de [2] et [1]). Le problème discrétisé par la méthode des éléments finis sera un système d'équations aux dérivées partielles avec inégalités variationnelles. Les nouveautés du présent travail sont la construction des flux, grâce à la théorie des espaces de Raviart–Thomas–Nédelec (voir [8]), indispensables à la construction d'un estimateur d'erreur a posteriori.

Le cas pratique diphasique liquide–gaz est ensuite abordé dans le Chapitre 2 où nous proposons une formulation tenant compte de l'apparition/disparition de la phase gazeuse grâce à un système d'équations aux dérivées partielles non linéaires auquel est annexé des conditions de complémentarité (voir [3] et [4]). Le système obtenu est discrétisé en dimension une d'espace grâce à la méthode des volumes finis, avantageuse pour la conservation des flux. Nous constatons que l'algorithme Newton–min semble également adapté à la résolution de ce problème et présente des résultats assez encourageants. Les études théoriques menées et les formulations discrétisées n'ont pas pu être toutes traitées numériquement compte tenu du temps imparti. Cela sera approfondie ultérieurement dans le cadre de mon doctorat avec pour extension les dimensions 2 et 3 d'espace.







# Chapitre 1

## Problème de deux membranes

Dans ce chapitre, on considère le modèle simplifié du problème de contact entre deux membranes en dimension 2 d'espace. Dans la section 1.1 nous donnons quelques résultats classiques d'analyse a priori et une discrétisation du système par la méthode des éléments finis. Ensuite, la section 1.2 est dédiée à la construction des flux équilibrés indispensables à la mise en œuvre d'un estimateur d'erreur a posteriori. Enfin, la section 1.3 sera le prélude de la résolution du système discrétisé.

### 1.1 Etude préliminaire

#### 1.1.1 Quelques généralités

Soit  $\Omega$  un domaine ouvert de  $\mathbb{R}^2$  à frontière polygonale. On s'intéresse à la discrétisation du système : trouver  $u_1$ ,  $u_2$  et  $\lambda$  tels que

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\mu_1 \Delta u_1 - \lambda = f_1 & \text{dans } \Omega, \\ -\mu_2 \Delta u_2 + \lambda = f_2 & \text{dans } \Omega, \\ (u_1 - u_2)\lambda = 0, \quad u_1 - u_2 \geq 0, \quad \lambda \geq 0 & \text{dans } \Omega, \\ u_1 = g & \text{sur } \partial\Omega, \\ u_2 = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{array} \right. \quad (1.1)$$

où  $u_1$  et  $u_2$  désignent le déplacement des deux membranes et  $\lambda$  est un multiplicateur de Lagrange désignant l'action de la première membrane sur la seconde. Les paramètres  $\mu_1$  et  $\mu_2$  sont des constantes strictement positives correspondant aux tensions des deux membranes, et  $f_1$  et  $f_2$  des forces extérieures. Dans (1.1), comme  $u_1 - u_2 \geq 0$  sur  $\Omega$ , la condition au limite  $g > 0$  assure que la membrane 1 est au dessus de la membrane 2. Dans cette étude pour simplifier nous supposons que  $g$  est une constante.

Dans le système d'équations aux dérivées partielles linéaires (1.1), les deux premières équations de type réaction-diffusion modélisent le comportement des deux membranes et la troisième désigne les conditions de complémentarités non linéaires exprimant le fait que soit les membranes sont séparées ( $u_1 > u_2$ ,  $\lambda = 0$ ), soit elles se

touchent ( $u_1 = u_2, \lambda > 0$ ). Pour plus de détails sur la notion de complémentarité voir [3] et [4].

Dans la première partie traitée correspondant à l'analyse a priori, nous présentons certaines démonstrations, les autres figurent dans [1].

**Notation 1.** *Donnons la définition des espaces fonctionnels suivants :*

- $\mathcal{D}(\Omega) = \{u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, u \in \mathcal{C}^\infty(\Omega) \text{ à support compact}\},$
- $L^2(\Omega) = \left\{u : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \text{ mesurable tel que } \int_{\Omega} |u|^2 dx < +\infty\right\},$
- $H^1(\Omega) = \left\{u \in L^2(\Omega) \text{ telles que } \forall i \in \{1, 2\} \quad \frac{\partial u}{\partial x_i} \in L^2(\Omega)\right\},$  muni de la norme  $\|u\|_{H^1(\Omega)} = \left\{\|u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}^2\right\}^{\frac{1}{2}},$
- $H_0^1(\Omega) = \{u \in H^1(\Omega), u = 0 \text{ sur } \partial\Omega\}$  muni de la norme  $\|u\|_{H_0^1(\Omega)} = \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)},$
- $H_g^1(\Omega) = \{u \in H^1(\Omega), u = g \text{ sur } \partial\Omega\},$
- $\mathbf{H}(\text{div}, \Omega) = \left\{\mathbf{u} \in (L^2(\Omega))^d \text{ tel que } \text{div} \mathbf{u} \in L^2(\Omega)\right\},$
- $\Lambda = \{\chi \in L^2(\Omega), \chi \geq 0 \text{ p.p sur } \Omega\}.$

D'après la référence [1], la solution faible de (1.1) peut être caractérisée par :

**Définition 1.** *solution faible*

Pour  $(f_1, f_2) \in L^2(\Omega) \times L^2(\Omega)$  et  $g > 0$ , la formulation variationnelle associée au problème (1.1) consiste à trouver  $(u_1, u_2, \lambda) \in H_g^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega) \times \Lambda$  tel que  $\forall (v_1, v_2, \chi) \in H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega) \times \Lambda,$

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^2 \mu_i \int_{\Omega} \nabla u_i(x) \cdot \nabla v_i(x) dx - \int_{\Omega} \lambda(x)(v_1 - v_2)(x) dx = \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega} f_i(x)v_i(x) dx, \\ \int_{\Omega} (\chi - \lambda)(x)(u_1 - u_2)(x) dx \geq 0. \end{cases} \quad (1.2)$$

**Proposition 1.** *Les problèmes (1.1) et (1.2) sont équivalents dans le sens où  $(u_1, u_2, \lambda) \in H^1(\Omega) \times H^1(\Omega) \times L^2(\Omega)$  est solution de (1.1) si, et seulement si,  $(u_1, u_2, \lambda)$  est solution de (1.2).*

Pour la démonstration de ce résultat voir [1].

**Notation 2.** *Posons*

- $\mathbf{u} = (u_1, u_2), \mathbf{v} = (v_1, v_2),$
- $a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \sum_{i=1}^2 \mu_i \int_{\Omega} \nabla u_i(x) \cdot \nabla v_i(x) dx,$

- $b(\mathbf{v}, \chi) = - \int_{\Omega} \chi(x)(v_1 - v_2)(x) \, dx,$
- $l(\mathbf{v}) = \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega} f_i(x)v_i(x) \, dx,$
- On munit l'espace produit  $(H^1(\Omega))^2$  de la norme  $\|\cdot\|_{(H^1(\Omega))^2}$  définie par

$$\|\mathbf{u}\|_{(H^1(\Omega))^2} = \left\{ \|u_1\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|u_2\|_{H^1(\Omega)}^2 \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (1.3)$$

- On munit l'espace produit  $(H_0^1(\Omega))^2$  de la semi-norme  $|\cdot|_{(H^1(\Omega))^2}$  définie par

$$|\mathbf{u}|_{(H^1(\Omega))^2} = \left\{ |u_1|_{H^1(\Omega)}^2 + |u_2|_{H^1(\Omega)}^2 \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (1.4)$$

Avec ces nouvelles notations, le système (1.2) se réécrit : Trouver  $\mathbf{u} = (u_1, u_2) \in H_g^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega)$  et  $\lambda \in \Lambda$  tel que  $\forall \mathbf{v} = (v_1, v_2) \in H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega)$  et  $\forall \chi \in \Lambda$

$$\begin{cases} a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + b(\lambda, \mathbf{v}) = l(\mathbf{v}) \\ -b(\mathbf{u}, \chi - \lambda) \geq 0 \end{cases}. \quad (1.5)$$

Nous allons avoir besoin par la suite du théorème suivant :

**Théorème 1.** (*Inégalité de Poincaré*) Si  $\Omega$  est un ouvert de  $\mathbb{R}^2$  que l'on suppose borné, connexe et de frontière suffisamment régulière, alors il existe une constante  $C_{\Omega} > 0$  telle que :

$$\|u\|_{L^2(\Omega)} \leq C_{\Omega} \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} \quad \forall u \in H_0^1(\Omega). \quad (1.6)$$

Il existe également une variante de l'inégalité de Poincaré citée ci-dessus qui sera très utile par la suite (*Inégalité de Poincaré–Wirtinger*) :

$$\|u - u_{\Omega}\|_{L^2(\Omega)} \leq C_{\Omega} \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} \quad \forall u \in H^1(\Omega), \quad \text{où} \quad u_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} u(x) \, dx \quad (1.7)$$

avec  $|\Omega|$  désignant la mesure de  $\Omega$ .

**Remarque 1.** Notons que pour un simplexe  $K$  de diamètre  $h_K$ ,  $C_K = \frac{h_K}{\pi}$ .

Pour plus de détails voir [8]. En procédant comme dans [1] on peut voir que :

**Proposition 2.** La forme  $a$  est bilinéaire continue sur  $(H^1(\Omega))^2 \times (H^1(\Omega))^2$  et coercive sur  $(H_0^1(\Omega))^2 \times (H_0^1(\Omega))^2$ . De plus, la forme  $b$  est bilinéaire continue sur  $(H^1(\Omega))^2 \times L^2(\Omega)$ . Enfin, la forme  $l$  est linéaire continue sur  $(H^1(\Omega))^2$ .

*Démonstration.* Soit  $(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \in (H^1(\Omega))^2 \times (H^1(\Omega))^2$ . La bilinéarité de  $a$  est évidente.

De plus,

$$\begin{aligned}
|a(\mathbf{u}, \mathbf{v})| &= \left| \sum_{i=1}^2 \mu_i \int_{\Omega} \nabla u_i(x) \cdot \nabla v_i(x) \, dx \right|, \\
&\leq \sum_{i=1}^2 \mu_i \int_{\Omega} |\nabla u_i(x) \cdot \nabla v_i(x)| \, dx, \\
&\leq \max(\mu_1, \mu_2) \sum_{i=1}^2 \|\nabla u_i\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla v_i\|_{L^2(\Omega)} \quad \text{d'après l'inégalité de Cauchy Schwarz}, \\
&\leq \max(\mu_1, \mu_2) \sum_{i=1}^2 \|u_i\|_{H^1(\Omega)} \|v_i\|_{H^1(\Omega)} \quad \text{d'après la définition de la norme } H^1, \\
&\leq \max(\mu_1, \mu_2) \left\{ \sum_{i=1}^2 \|u_i\|_{H^1(\Omega)}^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \left\{ \sum_{i=1}^2 \|v_i\|_{H^1(\Omega)}^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (\text{inégalité de Cauchy Schwarz}), \\
&\leq \max(\mu_1, \mu_2) \|\mathbf{u}\|_{(H^1(\Omega))^2} \|\mathbf{v}\|_{(H^1(\Omega))^2}.
\end{aligned}$$

d'après la définition de la norme de l'espace produit  $(H^1(\Omega))^2$  définie en (1.3).

Donc  $a$  est continue. De plus, si  $\mathbf{u} \in H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega)$

$$\begin{aligned}
a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) &= \sum_{i=1}^2 \mu_i \int_{\Omega} \nabla u_i(x) \cdot \nabla u_i(x) \, dx, \\
&= \sum_{i=1}^2 \mu_i \|\nabla u_i\|_{L^2(\Omega)}^2, \\
&\geq \min(\mu_1, \mu_2) \sum_{i=1}^2 \|\nabla u_i\|_{L^2(\Omega)}^2, \\
&\geq \min(\mu_1, \mu_2) \|\mathbf{u}\|_{(H_0^1(\Omega))^2}^2
\end{aligned}$$

d'après la définition de la norme de l'espace produit  $(H_0^1(\Omega))^2$  définie en (1.4). Donc  $a$  est coercive.

Montrons que la forme  $b$  est bilinéaire continue. Soit  $(\mathbf{v}, \chi) \in (H^1(\Omega))^2 \times L^2(\Omega)$ . La bilinéarité de  $b$  est évidente. De plus,

$$\begin{aligned}
|b(\mathbf{v}, \chi)| &= \left| - \int_{\Omega} \chi(x)(v_1 - v_2)(x) \, dx \right|, \\
&\leq \int_{\Omega} |\chi(x)(v_1 - v_2)(x)| \, dx, \\
&\leq \|\chi\|_{L^2(\Omega)} \|v_1 - v_2\|_{L^2(\Omega)} \quad \text{d'après l'inégalité de Cauchy Schwarz}, \\
&\leq \|\chi\|_{L^2(\Omega)} \left\{ \sum_{i=1}^2 \|v_i\|_{L^2(\Omega)}^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad \text{d'après l'inégalité triangulaire}, \\
&\leq \sqrt{2} \|\chi\|_{L^2(\Omega)} \left\{ \sum_{i=1}^2 \|v_i\|_{L^2(\Omega)}^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad \text{d'après l'inégalité de Cauchy Schwarz}, \\
&\leq \sqrt{2} \|\chi\|_{L^2(\Omega)} \|\mathbf{v}\|_{(H^1(\Omega))^2}
\end{aligned}$$

d'après la définition de la norme de l'espace produit  $(H^1(\Omega))^2$  définie en (1.3). Ce qui prouve que  $b$  est continue.

Enfin, pour la continuité de  $l$  on procède de même. Soit  $\mathbf{v} \in (H^1(\Omega))^2$ .

$$\begin{aligned}
|l(\mathbf{v})| &= \left| \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega} f_i(x) v_i(x) \, dx \right|, \\
&\leq \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega} |f_i(x) v_i(x)| \, dx, \\
&\leq \sum_{i=1}^2 \|f_i\|_{L^2(\Omega)} \|v_i\|_{L^2(\Omega)} \quad \text{d'après l'inégalité de Cauchy Schwarz}, \\
&\leq \sqrt{2} \max(\|f_1\|_{L^2(\Omega)}, \|f_2\|_{L^2(\Omega)}) \left\{ \sum_{i=1}^2 \|v_i\|_{H^1(\Omega)}^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (\text{inégalité de Cauchy Schwarz}), \\
&\leq \sqrt{2} \max(\|f_1\|_{L^2(\Omega)}, \|f_2\|_{L^2(\Omega)}) \|\mathbf{v}\|_{(H^1(\Omega))^2}
\end{aligned}$$

toujours d'après la définition de la norme de l'espace produit  $(H^1(\Omega))^2$  définie en (1.3). Ce qui prouve que  $l$  est continue.  $\square$

**Définition 2.** Introduisons l'ensemble convexe suivant :

$$\mathcal{K}_g = \left\{ (v_1, v_2) \in H_g^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega), v_1 - v_2 \geq 0 \text{ p.p., sur } \Omega \right\}. \quad (1.8)$$

On considère le problème variationnel réduit : trouver  $(u_1, u_2) \in \mathcal{K}_g$ , tel que  $\forall (v_1, v_2) \in \mathcal{K}_g$

$$\sum_{i=1}^2 \mu_i \int_{\Omega} \nabla u_i(x) \cdot (\nabla(v_i - u_i))(x) \, dx \geq \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega} f_i(x)(v_i - u_i)(x) \, dx. \quad (1.9)$$

qui se réécrit encore :

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v} - \mathbf{u}) \geq l(\mathbf{v} - \mathbf{u}). \quad (1.10)$$

**Lemme 1.** Pour toute solution  $(u_1, u_2, \lambda)$  de (1.2),  $(u_1, u_2)$  est solution de (1.9).

Pour la démonstration de ce théorème voir [1].

**Proposition 3.**  $\forall (f_1, f_2) \in L^2(\Omega) \times L^2(\Omega)$  et  $\forall g > 0$ , le problème (1.9) a une solution unique  $(u_1, u_2) \in \mathcal{K}_g$ .

*Démonstration.* L'espace  $(H^1(\Omega))^2$  est un espace de Hilbert. L'ensemble  $\mathcal{K}_g$  est une partie convexe fermée non vide de  $(H^1(\Omega))^2$ . On a montré que la forme  $a$  est bilinéaire continue sur  $(H^1(\Omega))^2 \times (H^1(\Omega))^2$  et coercive sur  $(H_0^1(\Omega))^2$ . Par ailleurs la forme  $l$  est linéaire continue sur  $(H^1(\Omega))^2$ . D'après le Théorème de Lions–Stampacchia (voir [5]), le problème (1.9) a une solution unique  $(u_1, u_2) \in \mathcal{K}_g$ .  $\square$

**Théorème 2.**  $\forall (f_1, f_2) \in L^2(\Omega) \times L^2(\Omega)$ ,  $g > 0$  le problème (1.2) a une solution unique  $(u_1, u_2, \lambda)$  dans  $H_g^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega) \times \Lambda$ .

La démonstration figure dans [1].

### 1.1.2 Le problème discret réduit et son analyse a priori

On considère une triangulation  $\{\mathcal{T}_h\}_{h \geq 0}$  du domaine  $\Omega$  en un ensemble fini de triangles  $K$  de  $\overline{\Omega}$  vérifiant :

- $\bigcup_{K \in \mathcal{T}_h} K = \overline{\Omega}$
- L'intersection de deux éléments distincts de  $\mathcal{T}_h$  est soit vide, soit un sommet, ou une arête.

**Notation 3.**  $h_K$  désigne le diamètre de  $K$ . L'indice  $h$  de  $\{\mathcal{T}_h\}$  représente le maximum des  $h_K$ ,  $K \in \{\mathcal{T}_h\}$ .

On utilise par la suite l'espace discret

$$\mathbb{X}_h = \{\mathbf{v}_h \in C^0(\overline{\Omega}), \forall K \in \mathcal{T}_h, \mathbf{v}_h|_K \in \mathbb{P}_1(K)\} \subset H^1(\Omega), \quad (1.11)$$

où  $\mathbb{P}_1$  est l'espace des polynômes sur  $\mathbb{R}^2$  à valeurs dans  $\mathbb{R}$  de degré total  $\leq 1$ .

On considère l'espace :

$$\mathbb{X}_{gh} = \{\mathbf{v}_h \in \mathbb{X}_h, \mathbf{v}_h = g \text{ sur } \partial\Omega\} \subset H_g^1(\Omega). \quad (1.12)$$

En particulier, on utilisera aussi l'espace

$$\mathbb{X}_{0h} = \mathbb{X}_h \cap H_0^1(\Omega). \quad (1.13)$$

Enfin on définit l'ensemble convexe,

$$\mathcal{K}_{gh} = \{(v_{1h}, v_{2h}) \in \mathbb{X}_{gh} \times \mathbb{X}_{0h}, v_{1h} - v_{2h} \geq 0 \text{ sur } \Omega\}. \quad (1.14)$$

Le problème discret, correspondant à (1.9) consiste à trouver  $(u_{1h}, u_{2h}) \in \mathcal{K}_{gh}$  tel que  $\forall (v_{1h}, v_{2h}) \in \mathcal{K}_{gh}$ ,

$$\sum_{i=1}^2 \mu_i \int_{\Omega} \nabla u_{ih}(x) \cdot (\nabla(v_{ih} - u_{ih}))(x) dx \geq \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega} f_i(x)(v_{ih} - u_{ih})(x) dx. \quad (1.15)$$

**Proposition 4.**  $\forall (f_1, f_2) \in L^2(\Omega) \times L^2(\Omega)$ ,  $\forall g > 0$ , le problème (1.15) a une unique solution  $(u_{1h}, u_{2h}) \in \mathcal{K}_{gh}$ .

*Démonstration.* Soit  $(f_1, f_2) \in L^2(\Omega) \times L^2(\Omega)$  et  $g > 0$ . L'ensemble  $\mathcal{K}_{gh}$  est non vide, convexe et fermé. Comme  $X_h \subset H^1(\Omega)$  et  $X_{0h} \subset H_0^1(\Omega)$ , en suivant la même démarche que dans la preuve de la Proposition 2, la forme  $a$  est bilinéaire continue sur  $(\mathbb{X}_h)^2 \times (\mathbb{X}_h)^2$  et coercive sur  $(\mathbb{X}_{0h})^2 \times (\mathbb{X}_{0h})^2$ , et la forme  $l$  est linéaire continue sur  $(\mathbb{X}_h)^2$ ; d'après le Théorème de Lions–Stampacchia, (voir [5]) le problème (1.15) admet une unique solution  $(u_{1h}, u_{2h}) \in \mathcal{K}_{gh}$ .  $\square$

**Théorème 3.** (*Estimation d'erreur a priori pour le problème discret*)

Supposons que le domaine  $\Omega$  soit convexe et  $(f_1, f_2) \in L^2(\Omega) \times L^2(\Omega)$  et  $g > 0$ . Alors,

$$\|u_1 - u_{1h}\|_{H^1(\Omega)} + \|u_2 - u_{2h}\|_{H^1(\Omega)} \leq ch \left\{ \|f_1\|_{L^2(\Omega)} + \|f_2\|_{L^2(\Omega)} + \|g\|_{H^{\frac{3}{2}}(\Omega)} \right\} \quad (1.16)$$

avec  $c$  une constante indépendante de  $h$ .



### 1.1.3 Le problème discret complet

**Notation 4.** On note  $\mathcal{E}_h$  l'ensemble des arêtes du maillage  $\{\mathcal{T}_h\}$ . L'ensemble  $\mathcal{E}_h$  est partitionné en deux sous ensembles :  $\mathcal{E}_h^{int}$  qui contient les arêtes intérieures et  $\mathcal{E}_h^{ext}$  contenant les arêtes situées à la frontière. On note également  $\mathcal{V}_h$  l'ensemble des sommets de la triangulation. Cet ensemble est également décomposé en deux sous ensembles :  $\mathcal{V}_h^{int}$  contenant les sommets intérieurs du maillage et  $\mathcal{V}_h^{ext}$  contenant les sommets à la frontière du domaine. L'ensemble  $\mathcal{V}_K$  désignera l'ensemble des sommets du triangle  $K$ . Pour un sommet  $\mathbf{a} \in \mathcal{V}_h$ , on notera  $\omega_{\mathbf{a}} \subset \Omega$  le patch contenant tous les simplexes partageant  $\mathbf{a}$ .

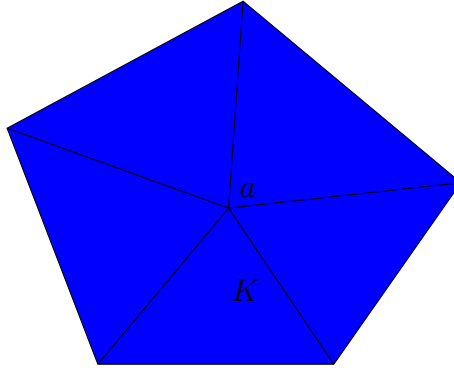


FIGURE 1.1 – patch  $\omega_{\mathbf{a}}$  partageant plusieurs triangles  $K$

**Définition 3.** On définit les fonctions de bases (ou fonctions chapeaux) de Lagrange  $\psi_{\mathbf{a}}$  associées aux nœuds  $\mathbf{a}$  de  $\mathcal{V}_h$  par,

$$\forall \mathbf{a} \in \mathcal{V}_h \quad \psi_{\mathbf{a}}(\mathbf{a}) = 1 \quad \text{et} \quad \forall \mathbf{a}' \in \mathcal{V}_h, \quad \mathbf{a}' \neq \mathbf{a}, \quad \psi_{\mathbf{a}}(\mathbf{a}') = 0$$

avec  $\psi_{\mathbf{a}} \in \mathbb{X}_h$ .

Contrairement à [2], on considère comme espace discret pour l'action  $\lambda_h$  l'espace  $\mathbb{X}_{0h}$ . On définit les fonctions  $\lambda_{1h}$  et  $\lambda_{2h}$  dans  $\mathbb{X}_{0h}$  par les équations

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \lambda_{1h}(x) v_{1h}(x) \, dx = \mu_1 \int_{\Omega} \nabla u_{1h}(x) \cdot \nabla v_{1h}(x) \, dx - \int_{\Omega} f_1(x) v_{1h}(x) \, dx, \\ \int_{\Omega} \lambda_{2h}(x) v_{2h}(x) \, dx = -\mu_2 \int_{\Omega} \nabla u_{2h}(x) \cdot \nabla v_{2h}(x) \, dx + \int_{\Omega} f_2(x) v_{2h}(x) \, dx, \end{cases} \quad (1.17)$$

$$\forall (v_{1h}, v_{2h}) \in \mathbb{X}_{0h} \times \mathbb{X}_{0h}.$$

**Proposition 5.** Soient  $u_{1h}$  et  $u_{2h}$  les solutions de (1.15). Alors les fonctions  $\lambda_{1h}$  et  $\lambda_{2h}$  définies dans (1.17) coïncident.

*Démonstration.* Soit  $(v_{1h}, v_{2h}) \in \mathcal{K}_{gh}$ . Comme  $(v_{1h}, u_{1h}) \in (\mathbb{X}_{gh})^2$ ,  $v_{1h} - u_{1h} \in \mathbb{X}_{0h}$  et naturellement  $v_{2h} - u_{2h} \in \mathbb{X}_{0h}$ . On soustrait les deux équations de (1.17) en

remplaçant  $v_{ih}$  par  $v_{ih} - u_{ih}$  et on obtient

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \lambda_{1h}(x)(v_{1h} - u_{1h})(x) \, dx - \int_{\Omega} \lambda_{2h}(x)(v_{2h} - u_{2h})(x) \, dx \\ &= \mu_1 \int_{\Omega} \nabla u_{1h}(x) \cdot \nabla (v_{1h} - u_{1h})(x) \, dx - \int_{\Omega} f_1(x)(v_{1h} - u_{1h})(x) \, dx \\ &+ \mu_2 \int_{\Omega} \nabla u_{2h}(x) \cdot \nabla (v_{2h} - u_{2h})(x) \, dx - \int_{\Omega} f_2(x)(v_{2h} - u_{2h})(x) \, dx, \\ &\geq 0 \quad \text{d'après (1.15).} \end{aligned}$$

Donc,

$$\int_{\Omega} \lambda_{1h}(x)(u_{1h} - v_{1h})(x) \, dx - \int_{\Omega} \lambda_{2h}(x)(u_{2h} - v_{2h})(x) \, dx \leq 0. \quad (1.18)$$

Soit  $\varphi_h \in \mathbb{X}_{0h}$ , alors  $(v_{1h} = u_{1h} \pm \varphi_h, v_{2h} = u_{2h} \pm \varphi_h) \in \mathcal{K}_{gh}$ . En utilisant l'inégalité précédente, on obtient

$$\int_{\Omega} (\lambda_{1h} - \lambda_{2h})\varphi_h \, dx = 0 \quad \forall \varphi_h \in \mathbb{X}_{0h}.$$

Mais  $\lambda_{1h} - \lambda_{2h} \in \mathbb{X}_{0h}$ . Donc cela veut dire que  $\lambda_{1h} - \lambda_{2h}$  est orthogonale à toutes les fonctions de  $\mathbb{X}_{0h}$ . Nécessairement  $\lambda_{1h} - \lambda_{2h}$  coïncide avec la fonction nulle. D'où,

$$\lambda_{1h} = \lambda_{2h}.$$

□

**Définition 4.** Définissons enfin le cône suivant :

$$\Lambda_h = \left\{ \lambda \in \mathbb{X}_{0h}; \int_{\omega_a} \lambda_h \psi_a \geq 0 \quad \forall a \in \mathcal{V}_h^{\text{int}} \right\}. \quad (1.19)$$

**Remarque 2.** On remarque que  $\lambda_h \in \Lambda_h$  n'est pas toujours positif sur  $\Omega$ .

La formulation discrète, construite par méthode de Galerkin, correspondant au problème (1.2) consiste à trouver  $(u_{1h}, u_{2h}, \lambda_h) \in \mathbb{X}_{gh} \times \mathbb{X}_{0h} \times \Lambda_h$  tel que  $\forall (v_{1h}, v_{2h}, \chi_h) \in \mathbb{X}_{0h} \times \mathbb{X}_{0h} \times \Lambda_h$ ,

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^2 \mu_i \int_{\Omega} \nabla u_{ih}(x) \cdot \nabla v_{ih}(x) \, dx - \int_{\Omega} \lambda_h(x)(v_{1h} - v_{2h})(x) \, dx = \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega} f_i(x)v_{ih}(x) \, dx, \\ \int_{\Omega} (\chi_h - \lambda_h)(x)(u_{1h} - u_{2h})(x) \, dx \geq 0. \end{cases} \quad (1.20)$$

L'analyse de la formulation variationnelle précédente n'étant pas évidente, on admet qu'elle est bien posée dans ce mémoire. Nous avons essayé de montrer le Lemme suivant qui permet de se ramener à l'analyse de l'inéquation variationnelle, mais nous ne sommes pas parvenus à passer une difficulté. Nous l'admettrons temporairement.

**Lemme 2.** Pour toute solution  $(u_{1h}, u_{2h})$  du problème (1.15), la fonction  $\lambda_h = \lambda_{ih}$ ,  $i = 1, 2$  définie dans (1.17) assure l'existence d'une solution  $(u_{1h}, u_{2h}, \lambda_h)$  du problème (1.20).

## 1.2 Analyse a posteriori

### 1.2.1 Principe de la méthode

La plupart du temps, nous ne savons pas résoudre explicitement les équations aux dérivées partielles. Généralement, nous utilisons une triangulation  $\mathcal{T}_h$  du domaine  $\Omega$  en simplexes  $K$  vérifiant les trois propriétés présentées dans la section 1.1.2.

Nous construisons un espace d'éléments finis dans lequel vit la solution approchée de l'équation aux dérivées partielles. Dans l'analyse classique a priori on étudie la distance entre la solution exacte  $u$  de l'équation aux dérivées partielles, et la solution approchée  $u_h$  de cette même équation qui se met sous la forme :

$$|||u - u_h||| \leq Ch^k, \quad (1.21)$$

où  $C > 0$  et  $k > 0$  sont des constantes indépendantes de  $h$  et  $||| \cdot |||$  une norme, généralement la norme  $L^2$  ou  $H^1$ . Tel était le cas par exemple de (1.16). Mais,  $C = C(u)$  ce qui fait que  $|||u - u_h|||$  sera contrôlée par une quantité dépendant de  $u$  qui est inconnue. Un estimateur d'erreur a posteriori est donné par :

$$|||u - u_h||| \leq \left\{ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \eta_K^2 \right\}^{1/2}, \quad (1.22)$$

où  $\eta_K = \eta_K(u_h)$  ne dépend pas de  $u$ . L'avantage de ces types d'estimateurs est qu'ils vont permettre de majorer  $|||u - u_h|||$  par des quantités dépendant seulement de  $u_h$ . On suit dans la suite la méthodologie de [8].

### 1.2.2 Application au problème des membranes

On rappelle que pour  $(f_1, f_2) \in L^2(\Omega) \times L^2(\Omega)$  et  $g > 0$ , la formulation variationnelle (1.2) donne pour  $v_1 = 0$

$$\mu_2 \int_{\Omega} \nabla u_2(x) \cdot \nabla v_2(x) \, dx + \int_{\Omega} \lambda(x) v_2(x) \, dx = \int_{\Omega} f_2(x) v_2(x) \, dx, \quad (1.23)$$

et pour  $v_2 = 0$ ,

$$\mu_1 \int_{\Omega} \nabla u_1(x) \cdot \nabla v_1(x) \, dx - \int_{\Omega} \lambda(x) v_1(x) \, dx = \int_{\Omega} f_1(x) v_1(x) \, dx. \quad (1.24)$$

### 1.2.3 La notion de flux

On introduit dans toute la suite, la notation du produit scalaire  $L^2$  notée  $(\cdot, \cdot)$  définie par :

**Notation 5.** Soit  $\mathcal{O}$  un domaine de  $\mathbb{R}^d$ . On note le produit scalaire :

$$\forall (f, g) \in (L^2(\mathcal{O}))^2, (f, g)_{\mathcal{O}} = \int_{\mathcal{O}} fg \, dx. \quad (1.25)$$

**Définition 5.** Soit  $(u_1, u_2)$  la solution faible de (1.9). On définit les flux  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$  par

$$\sigma_1 = -\mu_1 \nabla u_1, \quad \sigma_2 = -\mu_2 \nabla u_2 \quad . \quad (1.26)$$

**Proposition 6.** Soit  $(u_1, u_2)$  la solution faible de (1.9).

Soient  $(f_1, f_2) \in L^2(\Omega) \times L^2(\Omega)$ ,  $\lambda \in \Lambda$  et  $g > 0$ . Soient  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$  les deux flux définis précédemment. Alors

$$(\sigma_1, \sigma_2) \in \mathbf{H}(\text{div}, \Omega) \times \mathbf{H}(\text{div}, \Omega) \quad \text{et} \quad \text{div} \sigma_1 = f_1 + \lambda \quad \text{et} \quad \text{div} \sigma_2 = f_2 - \lambda. \quad (1.27)$$

*Démonstration.* Montrons que  $\sigma_1 \in \mathbf{H}(\text{div}, \Omega)$  avec  $\text{div} \sigma_1 = f_1 + \lambda$ . Pour  $\sigma_2$  la démonstration est identique au signe de  $\lambda$  près. Par définition  $\sigma_1 = -\mu_1 \nabla u_1 \in L^2(\Omega)$  car  $u_1 \in H^1(\Omega)$ . Soit  $\phi \in \mathcal{D}(\Omega)$ ,

$$\begin{aligned} (\sigma_1, \nabla \phi)_\Omega &= (-\mu_1 \nabla u_1, \nabla \phi)_\Omega, \\ &= -(f_1 + \lambda, \phi)_\Omega \quad \text{d'après la formulation faible (1.24),} \\ &= -(\text{div} \sigma_1, \phi)_\Omega \quad \text{avec} \quad \text{div} \sigma_1 \in L^2(\Omega) \quad \text{car} \quad (f_1, \lambda) \in L^2(\Omega) \times L^2(\Omega). \end{aligned}$$

Ainsi  $\sigma_1 \in \mathbf{H}(\text{div}, \Omega)$ . □

**Remarque 3.** On utilise les espaces discrets  $\mathbb{X}_h$ ,  $\mathbb{X}_{0h}$  et  $\mathbb{X}_{gh}$  définis en (1.11), (1.13) et (1.12). On considère la formulation discrète (1ère ligne de (1.20)). Soit  $\mathbf{a} \in \mathcal{V}_h^{\text{int}}$ . Pour  $v_{1h} = 0$  et  $v_{2h} = \psi_{\mathbf{a}}$ , on obtient

$$\mu_2 (\nabla u_{2h}, \nabla \psi_{\mathbf{a}})_\Omega + (\lambda_h, \psi_{\mathbf{a}})_\Omega = (f_2, \psi_{\mathbf{a}})_\Omega \quad (1.28)$$

et, pour  $v_{2h} = 0$  et  $v_{1h} = \psi_{\mathbf{a}}$ , on obtient

$$\mu_1 (\nabla u_{1h}, \nabla \psi_{\mathbf{a}})_\Omega - (\lambda_h, \psi_{\mathbf{a}})_\Omega = (f_1, \psi_{\mathbf{a}})_\Omega. \quad (1.29)$$

En particulier, on dit que les fonctions  $u_{1h}$  et  $u_{2h}$  satisfont l'orthogonalité des fonctions chapeaux.

**Remarque 4.** Contrairement à ce qui a été montré dans la Proposition 6, en général

$$\begin{aligned} -\mu_1 \nabla u_{1h} &\notin \mathbf{H}(\text{div}, \Omega), \quad -\mu_2 \nabla u_{2h} \notin \mathbf{H}(\text{div}, \Omega), \\ \text{div}(-\mu_1 \nabla u_{1h}) &\neq f_1 + \lambda_h, \quad \text{div}(-\mu_2 \nabla u_{2h}) \neq f_2 - \lambda_h. \end{aligned}$$

### 1.2.4 Reconstruction des flux équilibrés

On cherche à reconstruire des flux discrets rassemblant les propriétés de flux continus (voir proposition 6) :

$$\begin{cases} \sigma_{1h} \in \mathbf{H}(\text{div}, \Omega) & \text{tel que} & (\text{div} \sigma_{1h}, 1)_K = (f_1 + \lambda_h, 1)_K \quad \forall K \in \mathcal{T}_h, \\ \sigma_{2h} \in \mathbf{H}(\text{div}, \Omega) & \text{tel que} & (\text{div} \sigma_{2h}, 1)_K = (f_2 - \lambda_h, 1)_K \quad \forall K \in \mathcal{T}_h. \end{cases} \quad (1.30)$$

Cette section décrit un moyen pratique d'obtenir les flux équilibrés reconstruits  $\sigma_{1h}$  et  $\sigma_{2h}$ . Ces reconstructions passent par l'utilisation des patches  $\omega_{\mathbf{a}}$ . On va avoir besoin de définir les espaces suivants :

**Définition 6.** On définit l'espace de Raviart–Thomas–Nédélec

$$\mathbf{RTN}_1(\Omega) = \{ \mathbf{v}_h \in \mathbf{H}(\text{div}, \Omega), \mathbf{v}_{h|K} \in \mathbf{RTN}_1(K) \ \forall K \in \mathcal{T}_h \} \quad (1.31)$$

où  $\mathbf{RTN}_1(K) = (\mathbb{P}_1)^d + x\mathbb{P}_1(K)$ .

Pour plus de détails sur la nature de ces espaces voir [8]. On définit alors :

**Définition 7.** Soit  $u_{1h}$  et  $u_{2h}$  satisfaisant (1.15) et l'orthogonalité des fonctions chapeaux (1.28) et (1.29).  $\forall \mathbf{a} \in \mathcal{V}_h$ , on définit  $(\boldsymbol{\sigma}_{1h}^{\mathbf{a}}, \boldsymbol{\sigma}_{2h}^{\mathbf{a}}) \in \mathbf{V}_h^{\mathbf{a}} \times \mathbf{V}_h^{\mathbf{a}}$  et  $(r_{1h}^{\mathbf{a}}, r_{2h}^{\mathbf{a}}) \in Q_h^{\mathbf{a}} \times Q_h^{\mathbf{a}}$  en résolvant :

$$\left\{ \begin{array}{ll} (\boldsymbol{\sigma}_{1h}^{\mathbf{a}}, \mathbf{v}_{1h})_{\omega_{\mathbf{a}}} - (r_{1h}^{\mathbf{a}}, \text{div } \mathbf{v}_{1h})_{\omega_{\mathbf{a}}} &= -(\boldsymbol{\tau}_{1h}^{\mathbf{a}}, \mathbf{v}_{1h})_{\omega_{\mathbf{a}}} \quad \forall \mathbf{v}_{1h} \in \mathbf{V}_h^{\mathbf{a}}, \\ (\text{div } \boldsymbol{\sigma}_{1h}^{\mathbf{a}}, q_{1h})_{\omega_{\mathbf{a}}} &= (g_1^{\mathbf{a}}, q_{1h})_{\omega_{\mathbf{a}}} \quad \forall q_{1h} \in Q_h^{\mathbf{a}}, \\ (\boldsymbol{\sigma}_{2h}^{\mathbf{a}}, \mathbf{v}_{2h})_{\omega_{\mathbf{a}}} - (r_{2h}^{\mathbf{a}}, \text{div } \mathbf{v}_{2h})_{\omega_{\mathbf{a}}} &= -(\boldsymbol{\tau}_{2h}^{\mathbf{a}}, \mathbf{v}_{2h})_{\omega_{\mathbf{a}}} \quad \forall \mathbf{v}_{2h} \in \mathbf{V}_h^{\mathbf{a}}, \\ (\text{div } \boldsymbol{\sigma}_{2h}^{\mathbf{a}}, q_{2h})_{\omega_{\mathbf{a}}} &= (g_2^{\mathbf{a}}, q_{2h})_{\omega_{\mathbf{a}}} \quad \forall q_{2h} \in Q_h^{\mathbf{a}}. \end{array} \right. \quad (1.32)$$

Pour  $\mathbf{a} \in \mathcal{V}_h^{\text{int}}$

- $\mathbf{V}_h^{\mathbf{a}} = \{ \mathbf{v}_h \in \mathbf{H}(\text{div}, \omega_{\mathbf{a}}), \ \mathbf{v}_h \in \mathbf{RTN}_1(K), \forall K \in \omega_{\mathbf{a}} \ \mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}_{\omega_{\mathbf{a}}} = 0, \ \text{sur } \partial\omega_{\mathbf{a}} \},$
- $Q_h^{\mathbf{a}} = \{ q_h \in L^2(\omega_{\mathbf{a}}), \ q_h|_K \in \mathbb{P}_1(K), \forall K \in \omega_{\mathbf{a}}, \ (q_h, 1)_{\omega_{\mathbf{a}}} = 0 \}.$

Pour  $\mathbf{a} \in \mathcal{V}_h^{\text{ext}}$

- $\mathbf{V}_h^{\mathbf{a}} = \{ \mathbf{v}_h \in \mathbf{H}(\text{div}, \omega_{\mathbf{a}}), \ \mathbf{v}_h \in \mathbf{RTN}_1(K), \forall K \in \omega_{\mathbf{a}} \ \mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}_{\omega_{\mathbf{a}}} = 0, \ \text{sur } \partial\omega_{\mathbf{a}} \setminus \partial\Omega \},$
- $Q_h^{\mathbf{a}} = \{ q_h \in L^2(\omega_{\mathbf{a}}), \ q_h|_K \in \mathbb{P}_1(K), \ \forall K \subset \omega_{\mathbf{a}} \}.$

Enfin,

- $g_1^{\mathbf{a}} = \psi_{\mathbf{a}} f_1 - \mu_1 \nabla \psi_{\mathbf{a}} \cdot \nabla u_{1h} + \lambda_h \psi_{\mathbf{a}},$
- $g_2^{\mathbf{a}} = \psi_{\mathbf{a}} f_2 - \mu_2 \nabla \psi_{\mathbf{a}} \cdot \nabla u_{2h} - \lambda_h \psi_{\mathbf{a}},$
- $\boldsymbol{\tau}_{1h}^{\mathbf{a}} = \psi_{\mathbf{a}} \nabla u_{1h},$
- $\boldsymbol{\tau}_{2h}^{\mathbf{a}} = \psi_{\mathbf{a}} \nabla u_{2h},$
- $\boldsymbol{\sigma}_{1h} = \sum_{\mathbf{a} \in \mathcal{V}_h} \boldsymbol{\sigma}_{1h}^{\mathbf{a}},$
- $\boldsymbol{\sigma}_{2h} = \sum_{\mathbf{a} \in \mathcal{V}_h} \boldsymbol{\sigma}_{2h}^{\mathbf{a}}.$

Notons que  $\sigma_{1h}$  et  $\sigma_{2h}$  appartiennent bien à  $\mathbf{H}(\text{div}, \Omega)$ , grâce aux conditions aux limites imposées sur  $\partial\omega_{\mathbf{a}}$  pour  $\sigma_{ih}^{\mathbf{a}}$ , qui permettent de les étendre par 0 sur tout  $\Omega$ . Enfin,

**Remarque 5.**

$$\begin{aligned}
(g_1^a, 1)_{\omega_a} &= (\psi_a f_1 - \mu_1 \nabla \psi_a \cdot \nabla u_{1h} + \lambda_h \psi_a, 1)_{\omega_a} \quad \text{d'après la définition (7),} \\
&= (\psi_a f_1, 1)_{\omega_a} - \mu_1 (\nabla \psi_a \cdot \nabla u_{1h}, 1)_{\omega_a} + (\lambda_h, \psi_a)_{\omega_a}, \\
&= (f_1, \psi_a)_{\omega_a} - \mu_1 (\nabla \psi_a, \nabla u_{1h})_{\omega_a} + (\lambda_h, \psi_a)_{\omega_a}, \\
&= 0 \quad \text{d'après l'orthogonalité des fonctions chapeaux.}
\end{aligned}$$

De même  $(g_2^a, 1)_{\omega_a} = 0$ . Ainsi, la condition de compatibilité de Neumann est vérifiée pour (1.32).

**Lemme 3.** La définition précédente nous permet de reconstruire les flux  $(\sigma_{1h}, \sigma_{2h}) \in \mathbf{H}(\text{div}, \Omega) \times \mathbf{H}(\text{div}, \Omega)$ , tel que  $\forall (q_{1h}, q_{2h}) \in Q_h(K) \times Q_h(K)$

$$\begin{cases} (f_1 + \lambda_h - \text{div} \sigma_{1h}, q_{1h})_K = 0, \\ (f_2 - \lambda_h - \text{div} \sigma_{2h}, q_{2h})_K = 0, \end{cases} \quad (1.33)$$

avec  $Q_h(K) = \{q_h \in L^2(K), q_h|_K \in \mathbb{P}_1(K)\}$ .

*Démonstration.* Nous démontrons la première équation de (1.33), la seconde s'obtient de manière analogue.

Soit  $q_{1h} \in Q_h(K)$ . Par la définition (7),  $\sigma_{1h} = \sum_{a \in \mathcal{V}_h} \sigma_{1h}^a \in \mathbf{H}(\text{div}, \Omega)$  car

$\sigma_{1h}^a \in \mathbf{V}_h^a \subset \mathbf{H}(\text{div}, \Omega)$ . De plus, comme  $\sum_{a \in \mathcal{V}_K} \psi_a|_K = 1|_K$  et  $\sigma_{1h}|_K = \sum_{a \in \mathcal{V}_K} \sigma_{1h}^a$

$$\begin{aligned}
(f_1 + \lambda_h - \text{div} \sigma_{1h}, q_{1h})_K &= \left( \sum_{a \in \mathcal{V}_K} \psi_a f_1, q_{1h} \right)_K - \left( \text{div} \left( \sum_{a \in \mathcal{V}_K} \sigma_{1h}^a \right), q_{1h} \right)_K + \left( \sum_{a \in \mathcal{V}_K} \psi_a \lambda_h, q_{1h} \right)_K, \\
&= \sum_{a \in \mathcal{V}_K} (\psi_a f_1 - \text{div} \sigma_{1h}^a + \psi_a \lambda_h, q_{1h})_K.
\end{aligned}$$

Or si  $a \in \mathcal{V}_h^{\text{ext}}$ ,  $Q_h(K) \subset Q_h(\omega_a)$  et donc d'après (1.32)  $(\text{div} \sigma_{1h}^a, q_{1h})_K = (g_1^a, q_{1h})_K$ .

Ainsi,

$$\begin{aligned}
(f_1 + \lambda_h - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{1h}, q_{1h})_K &= \sum_{\mathbf{a} \in \mathcal{V}_K} (\psi_{\mathbf{a}} f_1, q_{1h})_K - \sum_{\mathbf{a} \in \mathcal{V}_K} (g_1^{\mathbf{a}}, q_{1h})_K + \left( \sum_{\mathbf{a} \in \mathcal{V}_K} \psi_{\mathbf{a}} \lambda_h, q_{1h} \right)_K, \\
&= \sum_{\mathbf{a} \in \mathcal{V}_K} (\psi_{\mathbf{a}} f_1, q_{1h})_K - \sum_{\mathbf{a} \in \mathcal{V}_K} (\psi_{\mathbf{a}} f_1 - \mu_1 \nabla \psi_{\mathbf{a}} \cdot \nabla u_{1h} + \lambda_h \psi_{\mathbf{a}}, q_{1h})_K \\
&\quad + \left( \sum_{\mathbf{a} \in \mathcal{V}_K} \psi_{\mathbf{a}} \lambda_h, q_{1h} \right)_K, \\
&= \sum_{\mathbf{a} \in \mathcal{V}_K} \mu_1 (\nabla \psi_{\mathbf{a}} \cdot \nabla u_{1h}, q_{1h})_K = \mu_1 \left( \sum_{\mathbf{a} \in \mathcal{V}_K} (\nabla \psi_{\mathbf{a}} \cdot \nabla u_{1h}), q_{1h} \right)_K, \\
&= \mu_1 \left( \nabla \left( \underbrace{\sum_{\mathbf{a} \in \mathcal{V}_K} \psi_{\mathbf{a}}}_{=1} \right) \cdot \nabla u_{1h}, q_{1h} \right)_K = 0.
\end{aligned}$$

Maintenant, si  $\mathbf{a} \in \mathcal{V}_h^{int}$ , par définition :  $Q_h^{\mathbf{a}} = \{q_h \in L^2(\omega_{\mathbf{a}}), q_{h|K} \in \mathbb{P}_1(K), (q_h, 1)_{\omega_{\mathbf{a}}} = 0\}$ . Nous savons que  $q_{1h} \in Q_h(K)$ . Soit  $\tilde{Q}_h^{\mathbf{a}} = \{q_h \in L^2(\omega_{\mathbf{a}}), q_{h|K} \in \mathbb{P}_1(K)\}$ . On a l'inclusion  $Q_h^{\mathbf{a}} \subset \tilde{Q}_h^{\mathbf{a}}$  et la décomposition  $q_{1h} = q_{1h}^* + c$ , avec  $q_{1h}^* \in Q_h^{\mathbf{a}}$  et  $c$  une constante. De plus,

$$\begin{aligned}
(\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{1h}^{\mathbf{a}}, q_{1h})_{\omega_{\mathbf{a}}} &= (\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{1h}^{\mathbf{a}}, q_{1h}^* + c)_{\omega_{\mathbf{a}}}, \\
&= (\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{1h}^{\mathbf{a}}, q_{1h}^*)_{\omega_{\mathbf{a}}} + (\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{1h}^{\mathbf{a}}, c)_{\omega_{\mathbf{a}}}, \\
&= (g_1^{\mathbf{a}}, q_{1h}^*)_{\omega_{\mathbf{a}}} + (\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{1h}^{\mathbf{a}}, c)_{\omega_{\mathbf{a}}} \quad \text{car } q_{1h}^* \in Q_h^{\mathbf{a}}.
\end{aligned}$$

Or,  $(\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{1h}^{\mathbf{a}}, c)_{\omega_{\mathbf{a}}} = c \int_{\partial \omega_{\mathbf{a}}} \boldsymbol{\sigma}_{1h}^{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{n}_{\omega_{\mathbf{a}}} \, ds = 0$  car  $\boldsymbol{\sigma}_{1h}^{\mathbf{a}} \in \mathbf{V}_h^{\mathbf{a}}$ .

D'où,  $(\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{1h}^{\mathbf{a}}, q_{1h})_{\omega_{\mathbf{a}}} = (g_1^{\mathbf{a}}, q_{1h}^*)_{\omega_{\mathbf{a}}} = (g_1^{\mathbf{a}}, q_{1h})_{\omega_{\mathbf{a}}} - (g_1^{\mathbf{a}}, c)_{\omega_{\mathbf{a}}}$ .

Or,  $(g_1^{\mathbf{a}}, c)_{\omega_{\mathbf{a}}} = c(g_1^{\mathbf{a}}, 1)_{\omega_{\mathbf{a}}} = 0$  d'après la remarque 5.

Finalement, la propriété (1.32) est licite :  $(\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{1h}^{\mathbf{a}}, q_{1h})_{\omega_{\mathbf{a}}} = (g_1^{\mathbf{a}}, q_{1h})_{\omega_{\mathbf{a}}}$ .

En utilisant le même raisonnement que pour  $\mathbf{a}$  dans  $\mathcal{V}_h^{ext}$ , on obtient  $(f_1 + \lambda_h - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{1h}, q_{1h})_K = 0$ .  $\square$

**Remarque 6.** En remplaçant  $q_{1h}$  par la fonction constante égale à 1 dans (1.33) on obtient

$$\begin{cases} (f_1 + \lambda_h - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{1h}, 1)_K = 0, \\ (f_2 - \lambda_h - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{2h}, 1)_K = 0. \end{cases} \quad (1.34)$$

Donc, on a bien reconstruit les flux équilibrés  $\boldsymbol{\sigma}_{1h}$  et  $\boldsymbol{\sigma}_{2h}$  au sens de (1.30).

**Remarque 7.** On montre (cf [8]) qu'un bon choix de reconstruction de  $\sigma_{1h}$  est :

$$\sigma_{1h} = \sum_{a \in \mathcal{V}_h} \sigma_{1h}^a = \sum_{a \in \mathcal{V}_h} \underset{\substack{\mathbf{v}_{1h} \in \mathbf{V}_h^a, \\ \text{div} \mathbf{v}_{1h} = \Pi_{Q_h^a}[\psi_a f_1 - \nabla \psi_a \cdot \nabla u_{1h} + \lambda_h \psi_a]}}{\text{argmin}} \|\psi_a \nabla u_{1h} + \mathbf{v}_{1h}\|, \quad (1.35)$$

et de manière similaire, pour  $\sigma_{2h}$  :

$$\sigma_{2h} = \sum_{a \in \mathcal{V}_h} \sigma_{2h}^a = \sum_{a \in \mathcal{V}_h} \underset{\substack{\mathbf{v}_{2h} \in \mathbf{V}_h^a, \\ \text{div} \mathbf{v}_{2h} = \Pi_{Q_h^a}[\psi_a f_2 - \nabla \psi_a \cdot \nabla u_{2h} - \lambda_h \psi_a]}}{\text{argmin}} \|\psi_a \nabla u_{2h} + \mathbf{v}_{2h}\|. \quad (1.36)$$

### 1.2.5 Estimation d'erreur a posteriori

**Définition 8.** Définissons les quantités suivantes  $\forall i = \{1, 2\}$

$$\eta_{Fi}^K = \left\| \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla u_{ih} + \mu_i^{-\frac{1}{2}} \sigma_{ih} \right\|_{L^2(K)}, \quad (1.37)$$

$$\eta_{Ri}^K = \frac{h_K}{\pi} \mu_i^{-\frac{1}{2}} \|f - \text{div} \sigma_{ih} - (-1)^i \lambda_h\|_{L^2(K)}, \quad (1.38)$$

$$\eta_C^K = 2(u_{1h} - u_{2h}, \lambda_h)_K. \quad (1.39)$$

**Remarque 8.** Notons que si  $\lambda_h \geq 0$  et si  $\mathbf{u}_h \in \mathcal{K}_{gh}$ , alors l'indicateur  $\eta_C^K$  est positif.

Afin de construire un estimateur d'erreur a posteriori, on a besoin d'introduire la semi norme d'énergie définie par

**Définition 9.**

$$\forall \mathbf{v} = (v_1, v_2) \in (H^1(\Omega))^2 \quad |||\mathbf{v}||| = \left\{ \sum_{i=1}^2 \mu_i \|\nabla v_i\|_{L^2(\Omega)}^2 \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (1.40)$$

**Définition 10. Résidu**

Soit  $u$  solution faible du problème (1.9) et soit  $(f_1, f_2) \in L^2(\Omega) \times L^2(\Omega)$ .

Soit  $\mathbf{u}_h = (u_{1h}, u_{2h}) \in \mathcal{K}_{gh}$  la solution approchée définie dans (1.15). Alors le résidu de la fonction  $\mathbf{u}_h \in \mathcal{K}_{gh}$  noté  $\mathcal{R}(\mathbf{u}_h) \in \mathcal{K}'_{gh}$  (espace "dual" de  $\mathcal{K}_{gh}$  avec un abus de notation car  $\mathcal{K}_{gh}$  n'est pas un espace vectoriel) est défini par

$$\langle \mathcal{R}(\mathbf{u}_h), \mathbf{v}_h \rangle_{\mathcal{K}'_{gh}, \mathcal{K}_{gh}} = \sum_{i=1}^2 (f_i, v_{ih} - u_{ih})_{\Omega} - \sum_{i=1}^2 \mu_i (\nabla u_{ih}, \nabla (v_{ih} - u_{ih}))_{\Omega}. \quad (1.41)$$

De plus la norme duale du résidu  $\mathbf{u}_h$  est définie par

$$\|\mathcal{R}(\mathbf{u}_h)\|_{\mathcal{K}'_g} = \sup_{\substack{\boldsymbol{\zeta} \in \mathcal{K}_g \\ |||\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{u}_h||| = 1}} \left\{ \sum_{i=1}^2 (f_i, \zeta_i - u_{ih})_{\Omega} - a(\mathbf{u}_h, \boldsymbol{\zeta} - \mathbf{u}_h) \right\}. \quad (1.42)$$

Nous avons les théorèmes suivants :



**Théorème 4.** Soit  $\mathbf{u}$  solution faible du problème (1.9) et soit  $(f_1, f_2) \in (L^2(\Omega))^2$ . Soit  $\mathbf{u}_h = (u_{1h}, u_{2h}) \in \mathcal{K}_{gh}$  la solution approchée définie dans (1.15). Alors

$$|||\mathbf{u} - \mathbf{u}_h||| \leq \|\mathcal{R}(\mathbf{u}_h)\|_{\mathcal{K}'_g}. \quad (1.43)$$

*Démonstration.* D'après la définition 1.40, et la Notation 2

$$|||\mathbf{u} - \mathbf{u}_h|||^2 = \left\{ \sum_{i=1}^2 \mu_i \|\nabla(u - u_h)_i\|_{L^2(\Omega)}^2 \right\} = a(\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, \mathbf{u} - \mathbf{u}_h). \quad (1.44)$$

Par ailleurs,

$$a(\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, \mathbf{u} - \mathbf{u}_h) = a(\mathbf{u}, \mathbf{u} - \mathbf{u}_h) - a(\mathbf{u}_h, \mathbf{u} - \mathbf{u}_h).$$

De plus, d'après (1.9), pour  $\mathbf{v} = (u_{1h}, u_{2h}) \in \mathcal{K}_{gh} \subset \mathcal{K}_g$ , on obtient

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{u}_h - \mathbf{u}) = \sum_{i=1}^2 \mu_i (\nabla u_i, \nabla(u_{ih} - u_i))_\Omega \geq \sum_{i=1}^2 (f_i, u_{ih} - u_i)_\Omega, \quad (1.45)$$

et donc

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{u} - \mathbf{u}_h) \leq - \sum_{i=1}^2 (f_i, u_{ih} - u_i)_\Omega. \quad (1.46)$$

Ainsi,

$$a(\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, \mathbf{u} - \mathbf{u}_h) \leq \sum_{i=1}^2 (f_i, u_i - u_{ih})_\Omega - a(\mathbf{u}_h, \mathbf{u} - \mathbf{u}_h).$$

Finalement, si  $\mathbf{u} \neq \mathbf{u}_h$ ,

$$\begin{aligned} |||\mathbf{u} - \mathbf{u}_h||| &= \frac{a(\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, \mathbf{u} - \mathbf{u}_h)}{|||\mathbf{u} - \mathbf{u}_h|||} \\ &\leq \frac{\sum_{i=1}^2 (f_i, u_i - u_{ih})_\Omega - a(\mathbf{u}_h, \mathbf{u} - \mathbf{u}_h)}{|||\mathbf{u} - \mathbf{u}_h|||}, \\ &\leq \|\mathcal{R}(\mathbf{u}_h)\|_{\mathcal{K}'_g} \quad \text{d'après (1.42)}. \end{aligned}$$

□

**Théorème 5.** (*Estimation d'erreur a posteriori*)

On suppose les hypothèses du théorème précédent vérifiées. Supposons également que  $\lambda_h \in \Lambda_h$  et  $\lambda_h \geq 0$ . Soient  $\sigma_{1h}$  et  $\sigma_{2h}$  les reconstructions des flux équilibrés vérifiant (1.30). Alors nous avons le résultat suivant :

$$\|\mathcal{R}(\mathbf{u}_h)\|_{\mathcal{K}'_g} \leq \left\{ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \sum_{i=1}^2 (\eta_{Ri}^K + \eta_{Fi}^K)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \frac{1}{2} \eta_C^K. \quad (1.47)$$

*Démonstration.* Par la définition (1.42),

$$\|\mathcal{R}(\mathbf{u}_h)\|_{\mathcal{K}'_g} = \sup_{\substack{\boldsymbol{\zeta} \in \mathcal{K}_g \\ \|\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{u}_h\| = 1}} \left\{ \sum_{i=1}^2 (f_i, \zeta_i - u_{ih})_{\Omega} - a(\mathbf{u}_h, \boldsymbol{\zeta} - \mathbf{u}_h) \right\}. \quad (1.48)$$

Posons  $\mathbf{w} = \boldsymbol{\zeta} - \mathbf{u}_h$ . On a,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^2 (f_i, w_i)_{\Omega} - a(\mathbf{u}_h, \mathbf{w}) &= \sum_{i=1}^2 (f_i, w_i)_{\Omega} - \sum_{i=1}^2 ((-1)^i \lambda_h, w_i)_{\Omega} \\ &\quad + \sum_{i=1}^2 ((-1)^i \lambda_h, w_i)_{\Omega} - a(\mathbf{u}_h, \mathbf{w}) + b(\mathbf{w}, \lambda_h) - b(\mathbf{w}, \lambda_h), \\ &= \sum_{i=1}^2 (f_i - (-1)^i \lambda_h, w_i)_{\Omega} - a(\mathbf{u}_h, \mathbf{w}) + b(\mathbf{w}, \lambda_h). \end{aligned} \quad (1.49)$$

car  $\sum_{i=1}^2 ((-1)^i \lambda_h, w_i)_{\Omega} - b(\mathbf{w}, \lambda_h) = 0$ . En effet, d'après la Notation 2 ;

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^2 ((-1)^i \lambda_h, w_i)_{\Omega} - b(\mathbf{w}, \lambda_h) &= (-\lambda_h, w_1)_{\Omega} + (\lambda_h, w_2)_{\Omega} + (\lambda_h, (w_1 - w_2))_{\Omega}, \\ &= 0. \end{aligned}$$

De plus, en se servant du fait que  $\boldsymbol{\sigma}_{ih} \in \mathbf{H}(\text{div}, \Omega)$  et comme  $w_i \in H_0^1(\Omega)$ , on a par la formule de Green,

$$(\text{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih}, w_i)_{\Omega} = -(\boldsymbol{\sigma}_{ih}, \nabla w_i)_{\Omega} \quad \forall i = \{1, 2\}. \quad (1.50)$$

Ainsi, en reprenant l'équation (1.49) et en utilisant (1.50), on a

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^2 (f_i, w_i)_{\Omega} - a(\mathbf{u}_h, \mathbf{w}) \\ &= \sum_{i=1}^2 (f_i - (-1)^i \lambda_h - \text{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih}, w_i)_{\Omega} + \sum_{i=1}^2 (\text{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih}, w_i)_{\Omega} - a(\mathbf{u}_h, \mathbf{w}) + b(\mathbf{w}, \lambda_h), \\ &= \sum_{i=1}^2 (f_i - (-1)^i \lambda_h - \text{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih}, w_i)_{\Omega} - \sum_{i=1}^2 (\boldsymbol{\sigma}_{ih}, \nabla w_i)_{\Omega} - a(\mathbf{u}_h, \mathbf{w}) + b(\mathbf{u}_h, \lambda_h) - b(\mathbf{u}_h, \lambda_h), \\ &= \sum_{i=1}^2 (f_i - (-1)^i \lambda_h - \text{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih}, w_i)_{\Omega} - \sum_{i=1}^2 \left( \mu_i^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\sigma}_{ih}, \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla w_i \right)_{\Omega} - \sum_{i=1}^2 \mu_i (\nabla u_{ih}, \nabla w_i)_{\Omega} \\ &\quad + b(\mathbf{u}_h, \lambda_h) - b(\mathbf{u}_h, \lambda_h). \end{aligned} \quad (1.51)$$

Or  $b(\mathbf{u}, \lambda_h) = -(\lambda_h, u_1 - u_2)_\Omega \leq 0$  car  $\lambda_h \geq 0$  par hypothèse et  $\mathbf{u} = (u_1, u_2) \in \mathcal{K}_g$ .  
Donc,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^2 (f_i, w_i) - a(\mathbf{u}_h, \mathbf{w}) &\leq \sum_{i=1}^2 \left\{ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (f_i - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih} - (-1)^i \lambda_h, w_i)_K \right. \\ &\quad \left. - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \left( \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla u_{ih} + \mu_i^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\sigma}_{ih}, \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla w_i \right)_K \right\} - b(\mathbf{u}_h, \lambda_h). \end{aligned}$$

D'après l'inégalité de Cauchy Schwarz,

$$\left( \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla u_{ih} + \mu_i^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\sigma}_{ih}, \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla w_i \right)_K \leq \left\| \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla u_{ih} + \mu_i^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\sigma}_{ih} \right\|_{L^2(K)} \left\| \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla w_i \right\|_{L^2(K)}, \quad (1.52)$$

et

$$(f_i - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih} - (-1)^i \lambda_h, w_i)_K = \left( f_i - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih} - (-1)^i \lambda_h, w_i - \frac{(w_i, 1)_K}{|K|} \right)_K, \quad (1.53)$$

car

$$\begin{aligned} &(f_i - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih} - (-1)^i \lambda_h, w_i)_K - \left( f_i - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih} - (-1)^i \lambda_h, \frac{(w_i, 1)_K}{|K|} \right)_K, \\ &= (f_i - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih} - (-1)^i \lambda_h, w_i)_K - \frac{(w_i, 1)_K}{|K|} (f_i - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih} - (-1)^i \lambda_h, 1)_K, \end{aligned}$$

et  $\boldsymbol{\sigma}_{1h}$  et  $\boldsymbol{\sigma}_{2h}$  sont des flux reconstruits vérifiant (1.30) donc

$$\forall i = \{1, 2\}, (f_i - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih} - (-1)^i \lambda_h, 1)_K = 0.$$

D'où,

$$\begin{aligned} (f_i - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih} - (-1)^i \lambda_h, w_i)_K &\leq \|f_i - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih} - (-1)^i \lambda_h\|_{L^2(K)} \left\| w_i - \frac{(w_i, 1)_K}{|K|} \right\|_{L^2(K)}, \\ &\leq \|f_i - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih} - (-1)^i \lambda_h\|_{L^2(K)} \frac{h_K}{\pi} \mu_i^{-\frac{1}{2}} \left\| \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla w_i \right\|_{L^2(K)}, \end{aligned}$$

d'après l'inégalité de Poincaré-Wirtinger (1.7) car  $w_i \in H^1(K)$ .

Enfin, on observe que

$$-b(\mathbf{u}_h, \lambda_h) = +(\lambda_h, u_{1h} - u_{2h})_\Omega = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (\lambda_h, u_{1h} - u_{2h})_K = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \frac{1}{2} \eta_C^K. \quad (1.54)$$

Finalement,

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^2 (f_i, w_i) - a(\mathbf{u}_h, \mathbf{w}) &\leq \sum_{i=1}^2 \left\{ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \|f_i - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{ih} - (-1)^i \lambda_h\|_{L^2(K)} \frac{h_K}{\pi} \mu_i^{-\frac{1}{2}} \left\| \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla w_i \right\|_{L^2(K)} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \left\| \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla u_{ih} + \mu^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\sigma}_{ih} \right\|_{L^2(K)} \left\| \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla w_i \right\|_{L^2(K)} \right\} + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \frac{1}{2} \eta_C^K, \quad (1.55) \\
&\leq \sum_{i=1}^2 \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \eta_{Ri}^K \left\| \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla w_i \right\|_{L^2(K)} + \sum_{i=1}^2 \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \eta_{Fi}^K \left\| \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla w_i \right\|_{L^2(K)} + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \frac{1}{2} \eta_C^K, \\
&= \sum_{i=1}^2 \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (\eta_{Ri}^K + \eta_{Fi}^K) \left\| \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla w_i \right\|_{L^2(K)} + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \frac{1}{2} \eta_C^K, \\
&\leq \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \left\{ \left( \sum_{i=1}^2 (\eta_{Ri}^K + \eta_{Fi}^K)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left( \sum_{i=1}^2 \left\| \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla w_i \right\|_{L^2(K)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \eta_C^K \right\} \quad (\text{Cauchy-Schwarz}), \\
&\leq \left\{ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \sum_{i=1}^2 (\eta_{Ri}^K + \eta_{Fi}^K)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \underbrace{\left\{ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \sum_{i=1}^2 \left\| \mu_i^{\frac{1}{2}} \nabla w_i \right\|_{L^2(K)}^2 \right\}^{\frac{1}{2}}}_{=||\mathbf{w}|| \text{ d'après la définition 1.40}} + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \frac{1}{2} \eta_C^K, \quad (\text{Cauchy-Schwarz}), \\
&= \left\{ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \sum_{i=1}^2 (\eta_{Ri}^K + \eta_{Fi}^K)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} ||\mathbf{w}|| + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \frac{1}{2} \eta_C^K. \quad (1.56)
\end{aligned}$$

D'où, d'après la norme duale du résidu définie en (1.42),

$$\begin{aligned}
\|\mathcal{R}(\mathbf{u}_h)\|_{\mathcal{K}'_g} &= \sup_{\substack{\boldsymbol{\zeta} \in \mathcal{K}_g \\ ||\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{u}_h||=1}} \left\{ \sum_{i=1}^2 (f_i, \zeta_i - u_{ih})_{\Omega} - a(\mathbf{u}_h, \boldsymbol{\zeta} - \mathbf{u}_h) \right\}, \\
&= \sup_{\substack{\boldsymbol{\zeta} \in \mathcal{K}_g \\ ||\mathbf{w}||=1}} \left\{ \sum_{i=1}^2 (f_i, w_i)_{\Omega} - a(\mathbf{u}_h, \mathbf{w}) \right\}, \\
&\leq \sup_{\substack{\boldsymbol{\zeta} \in \mathcal{K}_g \\ ||\mathbf{w}||=1}} \left\{ \left\{ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \sum_{i=1}^2 (\eta_{Ri}^K + \eta_{Fi}^K)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} ||\mathbf{w}|| + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \frac{1}{2} \eta_C^K \right\} \quad \text{d'après (1.56)}, \\
&= \left\{ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \sum_{i=1}^2 (\eta_{Ri}^K + \eta_{Fi}^K)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \frac{1}{2} \eta_C^K.
\end{aligned}$$

□

### 1.3 Résolution

Rappelons le problème discret (1.20) établi plus haut.  
Trouver  $(u_{1h}, u_{2h}, \lambda_h) \in \mathbb{X}_{gh} \times \mathbb{X}_{0h} \times \Lambda_h$  tel que  $\forall (v_{1h}, v_{2h}) \in \mathbb{X}_{gh} \times \mathbb{X}_{0h}$ ,

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^2 \mu_i \int_{\Omega} \nabla u_{ih}(x) \cdot \nabla v_{ih}(x) \, dx - \int_{\Omega} \lambda_h(x)(v_{1h} - v_{2h})(x) \, dx = \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega} f_i(x)v_{ih}(x) \, dx, \\ \forall \chi_h \in \Lambda_h, \int_{\Omega} (\chi_h - \lambda_h)(x)(u_{1h} - u_{2h})(x) \, dx \geq 0. \end{cases} \quad (1.57)$$

Dans cette section on suppose également que toutes les fonctions  $\lambda_h$  dans  $\Lambda_h$  sont positives. Considérons le cas particulier où  $v_{2h} = 0$  dans la première ligne de (1.57), alors on obtient

$$\mu_1 \int_{\Omega} \nabla u_{1h}(x) \cdot \nabla v_{1h}(x) \, dx - \int_{\Omega} \lambda_h(x)v_{1h}(x) \, dx = \int_{\Omega} f_1(x)v_{1h}(x) \, dx. \quad (1.58)$$

De même, pour  $v_{1h} = 0$  dans la première ligne de (1.57), on a

$$\mu_2 \int_{\Omega} \nabla u_{2h}(x) \cdot \nabla v_{2h}(x) \, dx + \int_{\Omega} \lambda_h(x)v_{2h}(x) \, dx = \int_{\Omega} f_2(x)v_{2h}(x) \, dx. \quad (1.59)$$

De plus,  $\mathbb{X}_{0h}$  et  $\Lambda_h$  sont des espaces vectoriels de dimension finis. Ils possèdent donc une base.

**Remarque 9.** *L'espace  $\mathbb{X}_{gh}$  est un espace affine. On a la décomposition  $\mathbb{X}_{gh} = \mathbb{X}_{0h} \oplus \tilde{g}_h$  avec  $\tilde{g}_h$  un relèvement appartenant à l'espace  $\mathbb{X}_h$  tel que  $\tilde{g}_h = g$  sur  $\partial\Omega$ .*

Pour alléger les notations posons  $N = \dim \mathbb{X}_{0h}$ . Soit  $(\varphi_j)_{j=1 \dots N}$  une base de  $\mathbb{X}_{0h}$ . Dans cette base,  $u_{2h} = \sum_{j=1}^N u_{2hj} \varphi_j$ . De même,  $\lambda_h = \sum_{j=1}^N \lambda_{hj} \varphi_j$ , car  $\dim \mathbb{X}_{0h} = \dim \Lambda_h$ . Grâce à la remarque précédente, on peut écrire  $u_{1h} = u_{1h}^0 + \tilde{g}_h$  avec  $u_{1h}^0 \in \mathbb{X}_{0h}$ . Ainsi,  $u_{1h} = \sum_{j=1}^N u_{1hj}^0 \varphi_j + \tilde{g}_h$ . Ainsi, en reprenant les équations (1.58) et (1.59) et en posant  $v_{1h} = v_{2h} = \varphi_i$ , on obtient  $\forall i = \{1 \dots N\}$

$$\begin{cases} \mu_1 \int_{\Omega} \nabla \left( \sum_{j=1}^N u_{1hj}^0 \varphi_j + \tilde{g}_h \right) \cdot \nabla \varphi_i \, dx - \int_{\Omega} \left( \sum_{j=1}^N \lambda_{hj} \varphi_j \right) \varphi_i \, dx = \int_{\Omega} f_1 \varphi_i \, dx, \\ \mu_2 \int_{\Omega} \nabla \left( \sum_{j=1}^N u_{2hj} \varphi_j \right) \cdot \nabla \varphi_i \, dx + \int_{\Omega} \left( \sum_{j=1}^N \lambda_{hj} \varphi_j \right) \varphi_i \, dx = \int_{\Omega} f_2 \varphi_i \, dx. \end{cases} \quad (1.60)$$

Le système précédent est équivalent à

$$\begin{cases} \mu_1 \int_{\Omega} \sum_{j=1}^N u_{1hj}^0 \nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i \, dx - \sum_{j=1}^N \lambda_{hj} \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i \, dx = \int_{\Omega} (f_1 \varphi_i - \nabla \tilde{g}_h \cdot \nabla \varphi_i) \, dx, \\ \mu_2 \int_{\Omega} \sum_{j=1}^N u_{2hj} \nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i \, dx + \sum_{j=1}^N \lambda_{hj} \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i \, dx = \int_{\Omega} f_2 \varphi_i \, dx. \end{cases} \quad (1.61)$$

Ce système peut s'écrire sous forme matricielle :  $AX = F$  où  $A$  est la matrice de rigidité de la forme :

$$A = \begin{pmatrix} \mu_1 A_1 & 0 & -B \\ 0 & \mu_2 A_1 & B \end{pmatrix} \quad (1.62)$$

avec

$$A_1 = \begin{pmatrix} \int_{\Omega} \nabla \varphi_1 \cdot \nabla \varphi_1 & \int_{\Omega} \nabla \varphi_2 \cdot \nabla \varphi_1 & \cdots & \int_{\Omega} \nabla \varphi_N \cdot \nabla \varphi_1 \\ \int_{\Omega} \nabla \varphi_1 \cdot \nabla \varphi_2 & \int_{\Omega} \nabla \varphi_2 \cdot \nabla \varphi_2 & \cdots & \int_{\Omega} \nabla \varphi_N \cdot \nabla \varphi_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \int_{\Omega} \nabla \varphi_1 \cdot \nabla \varphi_N & \int_{\Omega} \nabla \varphi_2 \cdot \nabla \varphi_N & \cdots & \int_{\Omega} \nabla \varphi_N \cdot \nabla \varphi_N \end{pmatrix} \quad (1.63)$$

et  $B$  la matrice de masse de la forme

$$B = \begin{pmatrix} \int_{\Omega} \varphi_1 \varphi_1 & \int_{\Omega} \varphi_2 \varphi_1 & \cdots & \int_{\Omega} \varphi_N \varphi_1 \\ \int_{\Omega} \varphi_1 \varphi_2 & \int_{\Omega} \varphi_2 \varphi_2 & \cdots & \int_{\Omega} \varphi_N \varphi_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \int_{\Omega} \varphi_1 \varphi_N & \int_{\Omega} \varphi_2 \varphi_N & \cdots & \int_{\Omega} \varphi_N \varphi_N \end{pmatrix} \quad (1.64)$$

et

$$F = \begin{pmatrix} \int_{\Omega} (f_1 \varphi_1 - \nabla \tilde{g}_h \cdot \nabla \varphi_1) \\ \int_{\Omega} (f_1 \varphi_2 - \nabla \tilde{g}_h \cdot \nabla \varphi_2) \\ \vdots \\ \int_{\Omega} (f_1 \varphi_N - \nabla \tilde{g}_h \cdot \nabla \varphi_N) \\ \int_{\Omega} f_2 \varphi_1 \\ \int_{\Omega} f_2 \varphi_2 \\ \vdots \\ \int_{\Omega} f_2 \varphi_N \end{pmatrix} \quad (1.65)$$

avec  $(A_1, B) \in \mathfrak{M}_{N,N}(\mathbb{R}) \times \mathfrak{M}_{N,N}(\mathbb{R})$ .

Le vecteur  $\mathbf{X} \in \mathfrak{M}_{N,1}(\mathbb{R})$  des inconnues est défini par

$$\mathbf{X}^T = (u_{1h1}^0, u_{1h2}^0, \dots, u_{1hN}^0, u_{2h1}, u_{2h2}, \dots, u_{2hN}, \lambda_{h1}, \lambda_{h2}, \dots, \lambda_{hN}).$$

**Remarque 10.** *Du fait que la matrice  $A$  ne soit pas carrée on ne peut pas résoudre le système. On a en effet  $2N$  équations à résoudre pour  $3N$  inconnues.*

On aimerait mettre sous forme matricielle la deuxième ligne de (1.57). Dans le cadre de ce mémoire nous n'avons pas, compte tenu du temps imparti, réussi à prouver l'équivalence suivante :  $\forall \chi_h \in \Lambda_h$ ,

$$\int_{\Omega} (\chi_h - \lambda_h)(x)(u_{1h} - u_{2h})(x) \, dx \geq 0 \Leftrightarrow u_{1h} - u_{2h} \geq 0, \quad \lambda_h \geq 0, \quad \lambda_h(u_{1h} - u_{2h}) = 0. \quad (1.66)$$

Lorsque cette équivalence sera prouvée on pourra utiliser l'algorithme de Newton–min pour résoudre ce système. Cet algorithme sera employé dans le Chapitre 2 de ce mémoire.





## Chapitre 2

# Écoulement diphasique liquide–gaz avec échange entre les phases comme un problème de complémentarité non linéaire en milieu poreux

Après un léger préambule sur la notion de milieu poreux, nous montrerons comment construire le système de départ (2.1) modélisant l'écoulement diphasique liquide–gaz en milieu poreux. Pour cela, on aura besoin de poser des équations indispensables, d'utiliser des hypothèses simplificatrices et enfin d'appliquer la loi d'Henry permettant de gérer les changements de phase. Ensuite, dans les sections suivantes, nous présenterons une discrétisation du système (2.1) par la méthode des volumes finis centrée sur les mailles en dimension une d'espace. L'algorithme de Newton-min sera enfin utilisé pour résoudre le système discrétisé.

### 2.1 Formulation du problème

Soit  $\Omega$  un intervalle vertical de longueur  $L$ . On s'intéresse à la discrétisation en dimension une d'espace du système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t}(\phi\gamma S_l) + \operatorname{div}(\gamma\mathbf{q}_l - \mathbf{J}_h^l) = Q_w, \\ \frac{\partial}{\partial t} [\phi\beta_l\chi_h^l S_l + \phi\beta_g P_g S_g] + \operatorname{div} [\rho_h^l \mathbf{q}_l + \beta_g P_g \mathbf{q}_g + \mathbf{J}_h^l] = Q_h, \\ (1 - S_l) [H(P_l + P_c(S_l)) - \beta_l\chi_h^l] = 0, \quad 1 - S_l \geq 0, \quad H(P_l + P_c(S_l)) - \beta_l\chi_h^l \geq 0. \end{array} \right. \quad (2.1)$$

Il s'agit d'un système d'équations aux dérivées partielles non linéaires contenant deux équations modélisant respectivement pour la première, la conservation de l'eau et pour la seconde, la conservation de l'hydrogène. La dernière ligne de (2.1) désigne les conditions de complémentarités non linéaires permettant de passer de la phase liquide à la phase gazeuse. Tout cela sera expliqué plus en détail dans la suite de ce mémoire.

### 2.1.1 Inconnues et paramètres du problème

Les inconnues recherchées seront  $S_l$  (saturation de la phase liquide),  $P_l$  (pression de la phase liquide) et  $\chi_h^l$  (fraction molaire de l'hydrogène dans la phase liquide). Les quantités relatives aux phases seront munies de l'indice  $i = l$  pour la phase liquide et  $i = g$  pour la phase gazeuse. Les quantités relatives aux composants seront munies de l'indice  $d$ ,  $d \in \{w, h\}$ . L'indice  $w$  représente l'eau  $H_2O$ , et l'indice  $h$  l'hydrogène  $H_2$ . Chaque phase peut être constituée elle-même de deux composants : eau et hydrogène. Les paramètres du système (dont certains interviendront plus loin) sont :

- $\phi$  la porosité du milieu poreux (sans unité),
- $P_i$  la pression de la phase  $i$  en Pascal (unité  $Pa$ ),
- $S_i$  la saturation de la phase  $i$  (sans unité),
- $\rho_i$  la densité massique de la phase  $i$  en  $kg.m^{-1}$ ,
- $\rho_d^i$  la densité massique du composant  $d$  dans la phase  $i$  en  $kg.m^{-1}$ ,
- $K(x^*)$  la perméabilité du milieu poreux en un point quelconque  $x^* \in \Omega$  en  $m.s^{-1}$ ,
- $k_{ri}$  la perméabilité relative de la phase  $i$  (sans unité),
- $\mu_i$  la viscosité dynamique de la phase  $i$  en  $kg.m^{-1}.s^{-1}$ ,
- $g$  l'intensité du champ de pesanteur qui vaut  $g = 9.81m.s^{-2}$ ,
- $n_d^i$  le nombre de mol du composant  $d$  dans la phase  $i$  en mol,
- $m_d^i$  la masse du composant  $d$  dans la phase  $i$  en  $kg$ ,
- $M^d$  la masse molaire du composant  $d$  en  $kg.mol^{-1}$ ,
- $C_d^i$  la concentration molaire du composant  $d$  dans la phase  $i$  en  $mol.m^{-1}$ ,
- $C_i$  la concentration molaire de la phase  $i$  en  $mol.m^{-1}$ ,
- $v_i$  le volume de la phase  $i$  en  $m$ ,
- $\chi_d^i$  la fraction molaire du composant  $d$  dans la phase  $i$  (sans unité),
- $J_d^i$  le flux diffusif massique du composant  $d$  dans la phase  $i$  en  $m^3.s^{-1}$ ,
- $D_d^i$  le coefficient de diffusion moléculaire du composant  $d$  dans la phase  $i$  en  $m^2.s^{-1}$ ,
- $q_i$  est la vitesse de Darcy de la phase  $i$  en  $m.s^{-1}$ ,
- $\beta_l$  est le coefficient de proportionnalité entre la densité massique de l'hydrogène dans la phase liquide et la fraction molaire de l'hydrogène liquide (sans unité),
- $\beta_g$  est une constante modélisant la faible compressibilité du gaz en  $kg.m^{-1}.Pa^{-1}$ ,
- $Q_h$  et  $Q_w$  désignent des termes sources en  $m.s^{-1}$ .
- $\tilde{H}$  est la constante de Henry qui vaut  $7.65 \times 10^{-6} mol.Pa^{-1}.m^{-3}$ .
- $R$  est la constante universelle des gaz parfaits qui vaut  $R = 8,314 J.mol^{-1}.K^{-1}$ .

### 2.1.2 Géométrie du domaine et milieu poreux

Les milieux poreux désignent des matériaux pour lesquels la phase solide, fortement imbriquée avec la phase fluide est fixe. On trouve de nombreux matériaux naturels dans cette catégorie : les sols, les couches sédimentaires et la plupart des roches. D'une manière générale, les milieux poreux sont définis par deux critères. Tout d'abord le matériau doit contenir des espaces vides appelés pores, délimités par une matrice solide, puis ce dernier doit être perméable à un écoulement fluide (gaz ou liquide). Ces critères renvoient à deux caractéristiques essentielles d'un milieu poreux : la porosité et la perméabilité qui indiquent l'aptitude d'un milieu poreux à

être traversé par un écoulement. Le paramètre principal décrivant un milieu poreux est la porosité  $\phi$  définie par :

$$\phi = \frac{\text{volume des pores}}{\text{volume total}}. \quad (2.2)$$

Pour plus de détails voir [6].

Nous allons traiter un écoulement diphasique en milieu poreux, plus particulièrement le cas du mélange eau-hydrogène en présence de deux phases : liquide et gaz. On va s'intéresser à modéliser l'apparition et la disparition de la phase gazeuse à l'aide de conditions de complémentarité non linéaires.

### 2.1.3 Loi de Darcy, équations de conservations, pression capillaire et loi d'Henry.

La densité massique de la phase  $i$  est définie par :

$$\rho_i = \rho_w^i + \rho_h^i. \quad (2.3)$$

La concentration molaire du composant  $d$  dans la phase  $i$  est définie par :

$$C_d^i = \frac{n_d^i}{v_i}, \quad \text{avec} \quad n_d^i = \frac{m_d^i}{M^d}. \quad (2.4)$$

Donc, d'après (2.4),  $C_d^i = \frac{m_d^i}{M^d v_i} = \frac{\rho_d^i}{M^d}$ , car  $m_d^i = \rho_d^i v_i$ .

La concentration molaire de la phase est la somme des concentrations molaires des composants présents dans la phase

$$C_i = C_w^i + C_h^i = \frac{\rho_w^i}{M^w} + \frac{\rho_h^i}{M^h}. \quad (2.6)$$

De plus,

$$\chi_d^i = \frac{C_d^i}{C_i}, \quad \text{et} \quad \chi_w^i + \chi_h^i = 1. \quad (2.7)$$

**Proposition 7.** *On a la relation de fermeture suivante :*

$$S_l + S_g = 1. \quad (2.8)$$

**Définition 11.** (*Loi de Fick*) :

$$\mathbf{J}_d^i = -M^d S_i C_i D_d^i \nabla \chi_d^i. \quad (2.9)$$

Remarquons enfin que la diffusion moléculaire dans une phase n'apporte aucune contribution au déplacement globale de cette phase, i.e.  $\mathbf{J}_h^i + \mathbf{J}_w^i = 0$  (voir [3]).

## Loi de Darcy généralisé

On connaît les équations qui régissent l'écoulement des fluides contenus dans les vides des milieux poreux. Mais la complexité de la géométrie du milieu, qui d'ailleurs n'est jamais complètement connue, rend leur résolution impossible. Aussi utilise-t-on des équations d'origine empirique, telles que la loi de Darcy, pour décrire les phénomènes considérés seulement à l'échelle macroscopique, pour un bloc de milieu poreux assez grand.

La vitesse macroscopique  $\mathbf{q}$  est appelée la vitesse de Darcy. La loi de Darcy peut s'écrire sous la forme :

$$\mathbf{q}_i = -K \frac{k_{ri}(S_i)}{\mu_i} (\nabla P_i - \rho_i g \nabla z) \quad i = \{1, g\}. \quad (2.10)$$

## Équations de conservations pour chaque composant

On ne démontrera pas les équations de continuité suivantes, cependant il est intéressant de donner leurs origines de manière concise. Elles sont basées sur le Théorème de Liouville qui stipule que pour une fonction  $g$  sous la forme

$g(t) = \int_{\Omega} f(x, t) dx$  où  $f(x, t)$  est une fonction scalaire de classe  $C^1$  et  $\Omega$  un domaine borné de  $\mathbb{R}^n$  évoluant avec la vitesse  $\mathbf{u}(x, t)$  de classe  $C^1$  on a

$$\frac{dg}{dt}(t) = \int_{\Omega} \frac{\partial f}{\partial t}(x, t) dx + \int_{\Omega} \text{div}(f \mathbf{u})(x, t) dx.$$

On note de plus que dans chaque phase, la migration du composant  $d$  est due pour une part, au transport par l'écoulement de la phase et pour une autre part, à la diffusion moléculaire au sein de la phase.

On a donc les équations aux dérivées partielles suivantes, qui traduisent la conservation de la masse pour l'eau et l'hydrogène :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho_w^1 S_1 + \phi \rho_w^g S_g) + \text{div}(\rho_w^1 \mathbf{q}_1 + \rho_w^g \mathbf{q}_g + \mathbf{J}_w^1 + \mathbf{J}_w^g) = Q_w, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho_h^1 S_1 + \phi \rho_h^g S_g) + \text{div}(\rho_h^1 \mathbf{q}_1 + \rho_h^g \mathbf{q}_g + \mathbf{J}_h^1 + \mathbf{J}_h^g) = Q_h, \end{cases} \quad (2.11)$$

où  $Q_d$ ,  $d \in \{w, h\}$  est un terme source modélisant le débit du composant  $d$  sortant,  $\mathbf{q}_1$  et  $\mathbf{q}_g$  sont les vitesses de Darcy pour les phases liquides et gazeuses respectivement.  $\mathbf{J}_d^i$  est le flux diffusif effectif du composant  $d$ ,  $d \in \{w, h\}$  dans la phase  $i$ .

## Pression capillaire

De manière générale, la pression capillaire est définie comme la différence des pressions de deux fluides non miscibles de part et d'autre de l'interface les séparant. Cette différence est due à la courbure de l'interface, la pression du fluide du côté concave de l'interface étant supérieure à celle du côté convexe. Dans un pore, le sens de la courbure de l'interface entre les deux fluides provient de la capacité plus ou moins grande de chaque fluide à «mouiller» la paroi solide. Ainsi dans le cas

liquide/gaz, le liquide est le fluide le plus mouillant et donc la pression du gaz est supérieure à celle du liquide. Les expérimentations font apparaître que la pression capillaire dépend essentiellement de la saturation et ceci d'une manière monotone. Dans toute la suite, on exprimera la pression capillaire comme une fonction univoque de la saturation. Pour une configuration liquide-gaz, on définit donc

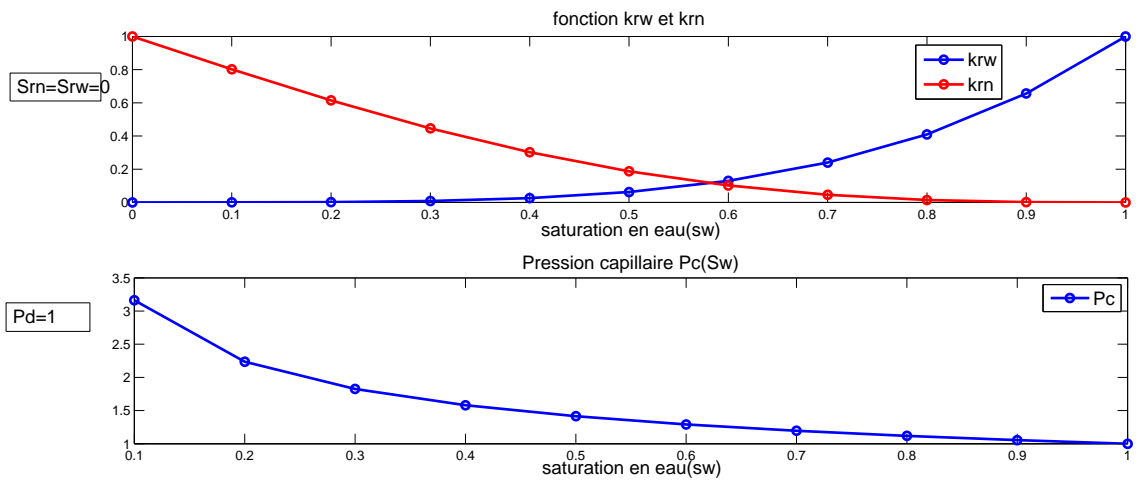
$$P_c(S_l) = P_g - P_l. \quad (2.12)$$

#### explications complémentaires

On va apporter une illustration graphique des perméabilités relatives et de la pression capillaire  $P_c(S_l)$ .

Dans un domaine polygonal  $\Omega$  de  $\mathbb{R}^d$ ,  $d \in \{2, 3\}$  et dans un intervalle de temps  $(0, T)$ , avec  $T > 0$ , posons  $E = \Omega \times (0, T)$  un canal. Considérons un écoulement diphasique incompressible où les deux phases présentes sont la phase eau et la phase huile. (Cela n'est pas si différent d'un écoulement diphasique liquide/gaz). Par exemple prenons le modèle de Brooks-Corey où  $k_{r,w}(S_w) = S_e^4$ ,  $k_{r,n}(S_w) = (1 - S_e)^2(1 - S_e^2)$ ,  $P_c(S_w) = P_d S_e^{-1/2}$ ,  $S_e = \frac{S_w - S_{rw}}{1 - S_{rw} - S_{rn}}$  avec  $P_d$  la pression à l'entrée du canal et  $S_w$  la saturation de la phase mouillante.  $S_{rw}$  et  $S_{rn}$  désignent respectivement les saturations résiduelles non mouillante et mouillante, et  $k_{r,w}$  et  $k_{r,n}$  désignent respectivement les perméabilités relatives de la phase mouillante et non mouillante. Ici, la phase mouillante est la phase eau tandis que la phase non mouillante est la phase huile.

On considère le cas où  $S_{rn} = S_{rw} = 0$ . On note que  $k_{r,w}$  s'annule dans l'intervalle  $[0, \bar{S}_m]$  ( $\bar{S}_m = 0.25$ ); ceci veut dire que l'eau pour  $S < \bar{S}_m$  ne peut pas être déplacée par l'huile. De même quand  $S$  est dans  $[\bar{S}_M, 1]$  ( $\bar{S}_M = 0.85$ ) l'huile n'est plus déplacée par l'eau.  $\bar{S}_m$  (respectivement  $1 - \bar{S}_M$ ) est appelée saturation résiduelle de l'eau et l'huile. Un tracé Matlab illustre les explications précédentes sur les figures suivantes :



## Loi d'Henry

Comme on l'a mentionné dans l'introduction, on s'intéresse au problème du stockage des déchets radioactifs dans une formation géologique profonde. Ce stockage provoque à terme une production d'hydrogène issu de la dégradation chimique de certains matériaux de stockage. Pour nous, l'objectif sera de modéliser l'apparition et la disparition de la phase gazeuse. La clé pour obtenir un problème avec des contraintes de type complémentarité réside dans la loi d'Henry qui stipule que :

«À température constante et à saturation, la quantité de gaz dissous dans un liquide est proportionnelle à la pression partielle qu'exerce ce gaz sur le liquide ».

On a la relation suivante :

$$HP_g = \rho_h^l, \quad (2.13)$$

avec  $H = \tilde{H}M^h$  où  $\tilde{H}$  est la constante d'Henry.

### 2.1.4 Hypothèses simplificatrices

Nous faisons les hypothèses suivantes :

1. Le milieu poreux est supposé indéformable ; la température du fluide est supposée constante et ce dernier est à l'équilibre thermodynamique à chaque instant.

2. On suppose que l'eau est incompressible *i.e* :

$$\rho_w^l = cte = \gamma. \quad (2.14)$$

3. L'eau n'est présente que dans la phase liquide *i.e* :

$$\rho_w^g = 0 \quad \text{et} \quad \rho_g = \rho_h^g, \quad (2.15)$$

$$\chi_h^g = \frac{C_h^g}{C_g} = 1 \quad \text{et} \quad \chi_w^g = 0, \quad (2.16)$$

et d'après (2.16)

$$\mathbf{J}_h^g = \mathbf{J}_w^g = 0. \quad (2.17)$$

4. Pour la phase liquide, l'eau est le solvant et l'hydrogène est le soluté ; la solution liquide est une solution diluée idéale  $\Rightarrow C_h^l \ll C_w^l$ .

5. Le gaz est légèrement compressible, ie :

$$\rho_g = \beta_g P_g, \quad (2.18)$$

où  $\beta_g$  est une constante de compressibilité.

Donc, on a en utilisant (2.6) et (2.7) et les hypothèses simplificatrices 2 et 4,

$$\chi_h^l = \frac{C_h^l}{C_l} = \frac{C_h^l}{C_h^l + C_w^l} \approx \frac{C_h^l}{C_w^l} = \frac{\rho_h^l M^w}{\rho_w^l M^h}. \quad (2.19)$$

Ainsi en utilisant (2.19)

$$\rho_h^l = \beta_l \chi_h^l \quad (2.20)$$

avec  $\beta_l = \gamma \frac{M^h}{M^w}$ .

### 2.1.5 Modèle d'étude

Finalement, après simplifications, les équations de conservation de chaque composant s'écrivent grâce à (2.9), (2.10), (2.20), (2.14), (2.15) et l'Hypothèse 2.18,

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\phi\gamma S_l) + \operatorname{div}(\gamma\mathbf{q}_l - \mathbf{J}_h^l) = Q_w, \\ \frac{\partial}{\partial t}[\phi\rho_h^l S_l + \phi\beta_g P_g S_g] + \operatorname{div}[\rho_h^l \mathbf{q}_l + \beta_g P_g \mathbf{q}_g + \mathbf{J}_h^l] = Q_h. \end{cases} \quad (2.21)$$

Étant donné que le problème se pose dans un régime où la phase liquide sera toujours présente (seule la phase gazeuse peut être amenée à disparaître), il est bien commode de prendre comme inconnue principale, outre la saturation de la phase liquide  $S_l$ , la pression dans la phase liquide  $P_l$  et la fraction molaire de l'hydrogène dans la phase liquide  $\chi_h^l$ .

### 2.1.6 Système d'équations aux dérivées partielles avec inéquations variationnelles

Dans un premier temps, la phase gazeuse n'existant pas, on se situe donc dans le cas d'un écoulement monophasique contenant de l'eau et de l'hydrogène en très faible quantité complètement dissous (des détails sur les écoulements monophasiques peuvent être trouvés dans [6]). Dans la réalité, ceci correspond à la situation où les déchets sont stockés dans une couche profonde sans qu'il y ait de production de gaz. Au bout d'un certain temps, les matériaux de stockage vont se dégrader chimiquement, ce qui va se traduire par un dégagement d'hydrogène gazeux. Pour modéliser et traduire mathématiquement ce processus, on injecte de l'hydrogène dans l'eau liquide. Au bout d'un certain temps, l'hydrogène ne pourra plus se dissoudre, la solution initiale va donc se saturer en hydrogène. Il y aura in extremis un dégagement d'hydrogène gazeux. On sera ainsi dans la configuration d'un écoulement diphasique liquide-gaz.

On aimerait donc traiter en même temps l'apparition et la disparition de la phase gazeuse. Si la phase gazeuse existe,  $S_g > 0$ , et d'après (2.8),

$$1 - S_l > 0. \quad (2.22)$$

D'après la loi d'Henry (2.13), (2.20) et (2.12),

$$HP_g = \rho_h^l = \beta_l \chi_h^l = H(P_l + P_c(S_l)). \quad (2.23)$$

Si la phase gazeuse n'existe pas, d'après (2.8),

$$S_l = 1 \quad \text{et} \quad P_c(S_l) = 0 \quad (2.24)$$

et

$$HP_l - \beta_l \chi_h^l \geq 0. \quad (2.25)$$

On obtient ainsi grâce à (2.23) et (2.22) un problème avec des contraintes :

$$\begin{cases} (1 - S_l) (H(P_l + P_c(S_l)) - \beta_l \chi_h^l) = 0, \\ 1 - S_l \geq 0, \\ H(P_l + P_c(S_l)) - \beta_l \chi_h^l \geq 0. \end{cases} \quad (2.26)$$

Finalement, en se servant de (2.26), (2.10) et (2.9), le problème de dissolution de l'hydrogène dans l'eau peut être formulé sous la forme d'un système avec comme inconnues principales  $S_1$ ,  $P_1$ , et  $\chi_h^1$  :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t}(\phi \gamma S_1) + \text{div}(\gamma \mathbf{q}_1 - \mathbf{J}_h^1) = Q_w, \\ \frac{\partial}{\partial t} [\phi \rho_h^1 S_1 + \phi \beta_g P_g S_g] + \text{div} [\rho_h^1 \mathbf{q}_1 + \beta_g P_g \mathbf{q}_g + \mathbf{J}_h^1] = Q_h, \\ \mathbf{J}_h^1 = -M^h S_1 C_1 D_h^1 \nabla \chi_h^1, \\ \mathbf{q}_i = -K \frac{k_{ri}(S_i)}{\mu_i} (\nabla P_i - \rho_i g \nabla z) \quad i = \{1, g\}, \\ (1 - S_1) [H(P_1 + P_c(S_1)) - \beta_1 \chi_h^1] = 0 \quad \text{et} \quad 1 - S_1 \geq 0 \quad \text{et} \quad H(P_1 + P_c(S_1)) - \beta_1 \chi_h^1 \geq 0, \end{array} \right. \quad (2.27)$$

avec  $P_g = P_1 + P_c(S_1)$  et  $\rho_h^1 = \beta_1 \chi_h^1$ .

Notre problème s'écrit donc sous la forme du système (2.27) formé d'équations aux dérivées partielles non linéaires et de conditions de complémentarité non linéaires. Nous venons ainsi de montrer comment construire le système (2.1) posé en début de ce chapitre. Pour en savoir plus sur la notion de complémentarité non linéaire voir [3].

## 2.2 Discrétisation

### 2.2.1 Quelques généralités

Nous avons construit précédemment un modèle pour les écoulements liquide-gaz en milieu poreux capable de prendre en compte l'apparition et la disparition de la phase gazeuse. Nous allons présenter une technique de discrétisation permettant la simulation numérique du modèle en nous appuyant sur une discrétisation implicite en temps et une méthode de volumes finis en espace. Le système étudié est le système (2.27). Pour la discrétisation en temps, on considère  $\{t^n\}_{0 \leq n \leq N_t}$  une suite croissante de temps  $\geq 0$ , tel que  $t^0 = 0$ ,  $t^{N_t} = T$  et on introduit l'intervalle  $I_n = (t^{n-1}, t^n]$  et le pas de temps  $\tau^n = t^n - t^{n-1} = \Delta t$ ,  $\forall 1 \leq n \leq N_t$ . Nous utilisons un schéma d'Euler implicite en temps. En espace, nous discrétisons l'intervalle  $(0, L)$  en  $N_x$  intervalles de longueurs  $h$  et nous utilisons une méthode de volumes finis centrés sur les mailles. Les notations des indices sont définies sur la Figure 2.1 :

La discrétisation numérique par une méthode de volumes finis s'appuie sur une écriture des équations avec l'opérateur divergence, sur une intégration des équations dans un volume de contrôle (ou cellule) s'appuyant sur un maillage, et sur la construction de flux numériques pour clore le système. On considère un maillage uniforme. Soit donc un nombre de cellules  $N_x > 0$  et un pas de maillage  $h = \frac{L}{N_x}$ .



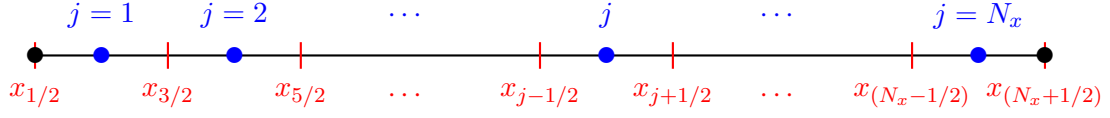


FIGURE 2.1 – Illustration méthode volumes finis en 1D. Les centres des cellules sont en bleu et numérotés de 1 à  $N_x$  ; les nœuds sont en rouge. La distance entre deux nœuds est  $h$ . Les points noirs illustrent les extrémités du maillage.

On définit  $N_x + 1$  points  $(x_{j+1/2})_{j=0,\dots,N_x}$  par  $x_{j+1/2} = jh$ . La cellule d'indice  $j$  est située entre les points  $x_{j-1/2}$  et  $x_{j+1/2}$  pour  $j \in [1, N_x]$  et a pour longueur  $h$ .

**Notation 6.** Pour une fonction  $u$  quelconque, la solution numérique au point  $(x_j, t_n)$  sera notée  $u_j^n$ . A priori  $u_j^n \neq u(x_j, t_n)$ .

Pour discrétiser la dérivée temporelle on utilise un schéma d'Euler rétrograde :

$$\frac{\partial}{\partial t} S_1(x_j, t_{n+1}) \approx \frac{S_{1,j}^{n+1} - S_{1,j}^n}{\Delta t}.$$

Pour discrétiser les termes en espace, on utilise un schéma aux volumes finis. Par exemple, pour l'équation de conservation du composant eau :

$$\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \text{div}(\gamma \mathbf{q}_1 - \mathbf{J}_h^1) dx = (\gamma \mathbf{q}_1 - \mathbf{J}_h^1)(x_{j+1/2}) - (\gamma \mathbf{q}_1 - \mathbf{J}_h^1)(x_{j-1/2}) \quad \forall j \in \{1 \dots N_x\}, \quad (2.28)$$

d'après la formule de Green.

Pour le composant en eau, l'équation de conservation discrétisée est donc :

$$\phi \gamma \frac{S_{1,j}^{n+1} - S_{1,j}^n}{\Delta t} + \frac{\gamma(\mathbf{q}_{1,j+1/2}^{n+1} - \mathbf{q}_{1,j-1/2}^{n+1}) - ((\mathbf{J}_h^1)_{j+1/2}^{n+1} - (\mathbf{J}_h^1)_{j-1/2}^{n+1})}{h} = Q_{w,j}^{n+1} \quad (2.29)$$

$\forall j \in \{1 \dots N_x\}$ , avec, en servant de (2.20), (2.10) et du fait que le domaine  $\Omega$  soit vertical, ie  $\nabla z = 1$  ;

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{1,1/2}^{n+1} &= -K k_{1,1/2}^{*n+1} \left\{ \frac{P_{1,1}^{n+1} - P_{1,0}^{n+1}}{h/2} - (\gamma + \beta_1(\chi_h^1)_0^{n+1}) g \right\}, \\ \mathbf{q}_{1,j+1/2}^{n+1} &= -K k_{1,j+1/2}^{*n+1} \left\{ \frac{P_{1,j+1}^{n+1} - P_{1,j}^{n+1}}{h} - (\gamma + \beta_1(\chi_h^1)_j^{n+1}) g \right\}, \\ j &= 1 \dots N_x - 1 \\ \mathbf{q}_{1,N_x+1/2}^{n+1} &= -K k_{1,N_x+1/2}^{*n+1} \left\{ \frac{P_{1,N_x+1}^{n+1} - P_{1,N_x}^{n+1}}{h/2} - (\gamma + \beta_1(\chi_h^1)_{N_x}^{n+1}) g \right\}, \end{aligned}$$

et

$$k_{1,j+1/2}^{*n+1} = \frac{k_{r1,j+1/2}^{n+1}(S_1)}{\mu_1} \quad \forall j \in \{1, \dots, N_x\}. \quad (2.30)$$

Pour le composant en hydrogène, l'équation de conservation discrétisée est :

$$\begin{aligned} \phi \left[ \frac{\beta_1(S_{l,j}^{n+1}(\chi_h^1)_j^{n+1} - S_{l,j}^n(\chi_h^1)_j^{n+1})}{\Delta t} + \frac{\rho_{g,j}^{n+1}(1 - S_{l,j}^{n+1}) - \rho_{g,j}^n(1 - S_{l,j}^n)}{\Delta t} \right] \\ + \beta_1 \frac{\mathbf{q}_{l,j+1/2}^{n+1}(\chi_h^1)_{j+1}^{n+1} - \mathbf{q}_{l,j-1/2}^{n+1}(\chi_h^1)_j^{n+1}}{h} + \frac{\rho_{g,j+1/2}^{n+1}\mathbf{q}_{g,j+1/2}^{n+1} - \rho_{g,j-1/2}^{n+1}\mathbf{q}_{g,j-1/2}^{n+1}}{h} \\ + \frac{(\mathbf{J}_h^1)_{j+1/2}^{n+1} - (\mathbf{J}_h^1)_{j-1/2}^{n+1}}{h} = Q_{h,j}^{n+1} \quad (2.31) \end{aligned}$$

$\forall j \in \{1 \dots N_x\}$ ,

avec

$$\rho_{g,j}^{n+1} = \beta_g [P_{l,j}^{n+1} + P_c(S_{l,j}^{n+1})] \text{ d'après l'Hypothèse 2.18 et (2.12).}$$

$$\rho_{g,j+1/2}^{n+1} = \frac{\rho_{g,j}^{n+1} + \rho_{g,j+1}^{n+1}}{2},$$

$$\mathbf{q}_{g,1/2}^{n+1} = -Kk_{g,1/2}^{*n+1} \left\{ \frac{P_{l,1}^{n+1} + P_c(S_{l,1}^{n+1}) - P_{l,0}^{n+1} - P_c(S_{l,0}^{n+1})}{h/2} - \rho_{g,1/2}^{n+1}g \right\},$$

$$\mathbf{q}_{g,j+1/2}^{n+1} = -Kk_{g,j+1/2}^{*n+1} \left\{ \frac{P_{l,j+1}^{n+1} + P_c(S_{l,j+1}^{n+1}) - P_{l,j}^{n+1} - P_c(S_{l,j}^{n+1})}{h} - \rho_{g,j+1/2}^{n+1}g \right\},$$

$j = 1 \dots N_x - 1$

$$\mathbf{q}_{g,N_x+1/2}^{n+1} = -Kk_{g,N_x+1/2}^{*n+1} \left\{ \frac{P_{l,N_x+1}^{n+1} + P_c(S_{l,N_x+1}^{n+1}) - P_{l,N_x}^{n+1} - P_c(S_{l,N_x}^{n+1})}{h/2} - \rho_{g,N_x+1/2}^{n+1}g \right\},$$

$$(\mathbf{J}_h^1)_{1/2}^{n+1} = -M^h D_h^l S_{l,0}^{n+1} \left\{ \frac{\gamma}{M^w} + \frac{\beta_1}{M^h} (\chi_h^1)_0^{n+1} \right\} \left( \frac{(\chi_h^1)_1^{n+1} - (\chi_h^1)_0^{n+1}}{h/2} \right),$$

$$(\mathbf{J}_h^1)_{j+1/2}^{n+1} = -M^h D_h^l S_{l,j}^{n+1} \left\{ \frac{\gamma}{M^w} + \frac{\beta_1}{M^h} (\chi_h^1)_j^{n+1} \right\} \left( \frac{(\chi_h^1)_{j+1}^{n+1} - (\chi_h^1)_j^{n+1}}{h} \right),$$

$j = 1 \dots N_x - 1$

$$(\mathbf{J}_h^1)_{N_x+1/2}^{n+1} = -M^h D_h^l S_{l,N_x}^{n+1} \left\{ \frac{\gamma}{M^w} + \frac{\beta_1}{M^h} (\chi_h^1)_{N_x}^{n+1} \right\} \left( \frac{(\chi_h^1)_{N_x+1}^{n+1} - (\chi_h^1)_{N_x}^{n+1}}{h/2} \right).$$

Dans la suite, pour simplifier les notations, on pose  $\mathbf{y}^n$ , ( $n = 1 \dots N_t$ ), le vecteur des inconnues discrétisées et  $\mathbf{H}$  les équations de conservations discrétisées définies par :

$$(\mathbf{y}^T)^n = (S_{l,1}^n, S_{l,2}^n, \dots, S_{l,N_x}^n, P_{l,1}^n, P_{l,2}^n, \dots, P_{l,N_x}^n, (\chi_h^1)_1^n, (\chi_h^1)_2^n, \dots, (\chi_h^1)_{N_x}^n)$$

et d'après (2.29) et (2.31),

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{H}_{j,\mathbf{w}}(\mathbf{y}^{n+1}) = \phi \gamma \frac{S_{1,j}^{n+1} - S_{1,j}^n}{\Delta t} + \frac{\gamma(\mathbf{q}_{1,j+1/2}^{n+1} - \mathbf{q}_{1,j-1/2}^{n+1}) - ((\mathbf{J}_{\mathbf{h}}^1)_{j+1/2}^{n+1} - (\mathbf{J}_{\mathbf{h}}^1)_{j-1/2}^{n+1})}{h} - Q_{\mathbf{w},h}^{n+1} \\ \text{(pour l'eau)} \quad \forall j \in \{1 \dots, N_x\}, \\ \mathbf{H}_{j,\mathbf{h}}(\mathbf{y}^{n+1}) = \phi \left[ \frac{\beta_1(S_{1,j}^{n+1}(\chi_{\mathbf{h}}^1)_j^{n+1} - S_{1,j}^n(\chi_{\mathbf{h}}^1)_j^{n+1})}{\Delta t} + \frac{\rho_{g,j}^{n+1}(1 - S_{1,j}^{n+1}) - \rho_{g,j}^n(1 - S_{1,j}^n)}{\Delta t} \right] \\ + \beta_1 \frac{\mathbf{q}_{1,j+1/2}^{n+1}(\chi_{\mathbf{h}}^1)_{j+1/2}^{n+1} - \mathbf{q}_{1,j-1/2}^{n+1}(\chi_{\mathbf{h}}^1)_j^{n+1}}{h} + \frac{\rho_{g,j+1/2}^{n+1} \mathbf{q}_{g,j+1/2}^{n+1} - \rho_{g,j-1/2}^{n+1} \mathbf{q}_{g,j-1/2}^{n+1}}{h} \\ + \frac{(\mathbf{J}_{\mathbf{h}}^1)_{j+1/2}^{n+1} - (\mathbf{J}_{\mathbf{h}}^1)_{j-1/2}^{n+1}}{h} - Q_{j,\mathbf{h}}^{n+1} \\ \text{(pour l'hydrogène)} \quad \forall j \in \{1 \dots N_x\}. \end{array} \right. \quad (2.32)$$

à  $n$  fixé,  $n \in \{0 \dots N_t - 1\}$ ,  $\forall j \in \{1 \dots N_x\}$  et  $\forall d = \{\mathbf{w}, \mathbf{h}\}$ , le système (2.32) s'écrit  $\mathbf{H}_{j,d}(\mathbf{y}^{n+1}) = 0$ .

Soit  $\mathbf{F}$  la fonction discrétisant  $1 - S_1$  définie par :

$$\mathbf{F} : \mathbb{R}^{3N_x} \rightarrow \mathbb{R}^{N_x}$$

$$\mathbf{y}^n \mapsto \begin{pmatrix} 1 - S_{1,1}^n \\ 1 - S_{1,2}^n \\ \vdots \\ 1 - S_{1,N_x}^n \end{pmatrix}.$$

Soit  $\mathbf{G}$  la fonction discrétisant  $H(P_1 + P_1(S_1)) - \beta_1 \chi_{\mathbf{h}}^1$  définie par :

$$\mathbf{G} : \mathbb{R}^{3N_x} \rightarrow \mathbb{R}^{N_x}$$

$$\mathbf{y}^n \mapsto \begin{pmatrix} H(P_{1,1}^n + P_c(S_{1,1}^n)) - \beta_1(\chi_{\mathbf{h}}^1)_1^n \\ H(P_{1,2}^n + P_c(S_{1,2}^n)) - \beta_1(\chi_{\mathbf{h}}^1)_2^n \\ \vdots \\ H(P_{1,N_x}^n + P_c(S_{1,N_x}^n)) - \beta_1(\chi_{\mathbf{h}}^1)_{N_x}^n \end{pmatrix}.$$

Les équations de conservations (2.32) ne donnent que  $2N_x$  équations alors que le vecteur  $\mathbf{y}^n$  est de taille  $3N_x$ . L'idée alors est de transformer les contraintes de complémentarités données par (2.26) en une équation. Cela sera détaillé dans les pages suivantes avec l'introduction de la fonction min. Pour simplifier la suite on posera  $\mathbf{y}^n = \mathbf{y}$ .

A chaque pas de temps le problème peut s'écrire sous la forme compacte suivante :

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{y}) &= 0, \\ \mathbf{F}(\mathbf{y}) \top \mathbf{G}(\mathbf{y}) \quad \text{et} \quad \mathbf{F}(\mathbf{y}) \geq 0 \quad \text{et} \quad \mathbf{G}(\mathbf{y}) \geq 0, \end{aligned} \quad (2.33)$$

Le symbole  $\top$  désignant l'orthogonalité entre  $\mathbf{F}$  et  $\mathbf{G}$ .

## 2.3 Méthode de résolution

On peut exprimer le problème de complémentarité précédent :

$$\mathbf{F}(\mathbf{y}) \geq 0, \quad \mathbf{G}(\mathbf{y}) \geq 0, \quad \mathbf{F}(\mathbf{y}) \top \mathbf{G}(\mathbf{y}) \quad (2.34)$$

au moyen d'équations en général non lisses, *i.e* non différentiables. Les fonctions qui interviennent dans cette formulation et dont on cherche un zéro sont appelées des C-fonctions (C pour complémentarité). Cette formulation est utilisée pour des algorithmes de résolution. Pour plus de détails voir [3].

### 2.3.1 Étude préliminaire des C-fonctions

**Définition 12.** On dit que  $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  est une C-fonction si

$$\forall (a, b) \in \mathbb{R}^2 \quad f(a, b) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad a \geq 0, \quad b \geq 0, \quad ab = 0. \quad (2.35)$$

La C-fonction qui va nous intéresser est la fonction min :

$$f_{\min}(a, b) = \min(a, b). \quad (2.36)$$

On note que la fonction min n'est pas différentiable. Pour s'en convaincre il suffit de calculer les dérivées partielles en a et b de la fonction  $f_{\min}$ . En revanche, la fonction min est lipschitzienne en norme  $l_1$ . La preuve du caractère lipschitzien de la fonction min figure dans [3].

**Définition 13.** On introduit la fonction  $\zeta$  définie par :

$$\zeta(\mathbf{y}) = \min(\mathbf{F}(\mathbf{y}), \mathbf{G}(\mathbf{y})). \quad (2.37)$$

En se servant de cette nouvelle définition, les contraintes de complémentarités (2.33) sont équivalentes à résoudre  $\zeta(\mathbf{y}) = 0$ . Le problème (2.33) peut se réécrire

$$\begin{cases} \mathbf{H}(\mathbf{y}) &= 0, \\ \zeta(\mathbf{y}) &= 0, \end{cases} \quad (2.38)$$

ou encore

$$\mathbf{\Pi}(\mathbf{y}) = \begin{pmatrix} \mathbf{H}(\mathbf{y}) \\ \zeta(\mathbf{y}) \end{pmatrix} = 0. \quad (2.39)$$

C'est un système non différentiable à cause de la fonction min présente dans la seconde équation. Nous proposons de le résoudre par une méthode de Newton non lisse présentée dans la section suivante.

### 2.3.2 Algorithme Newton–Min

Avant de présenter l'algorithme de Newton-min, on va rappeler brièvement l'algorithme de Newton classique adapté à notre problème. En effet, la méthode Newton-min est une extension de la méthode de Newton classique. Dans toute la suite,  $\|\cdot\|_2$  désignera la norme  $L^2$ . On note  $\varepsilon > 0$  la tolérance utilisée pour l'acceptation d'une solution approchée. On s'intéresse à la méthode de Newton pour construire à l'aide d'une suite, des approximations du zéro  $\mathbf{y}^*$  d'une fonction différentiable  $\Pi : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{R}^{3N}$ . Le principe de la méthode est le suivant. On choisit un élément  $\mathbf{y}^0 \in \mathbb{R}^{3N}$ , si possible assez proche de  $\mathbf{y}^*$ . C'est le premier terme de la suite, placé sur l'axe des abscisses en  $(\mathbf{y}^0, 0)$ . On considère le point correspondant  $(\mathbf{y}^0, \Pi(\mathbf{y}^0))$  sur la courbe de  $\Pi$ . Le point d'intersection de la tangente à la courbe représentative de  $\Pi$  en ce point avec l'axe des abscisses est noté  $(\mathbf{y}^1, 0)$ . En considérant la tangente à  $C_\Pi$  au point  $(\mathbf{y}^1, \Pi(\mathbf{y}^1))$  on construit  $\mathbf{y}^2$ , puis  $\mathbf{y}^3, \dots$ . On s'arrête dès que  $\|\Pi(\mathbf{y}^s)\|_2 < \varepsilon$   $s \in \{1, 2, \dots\}$ . Ainsi, l'algorithme de Newton se décline de la manière suivante :

---

#### Algorithm 1 Méthode de Newton

---

**Initialization :**  $\mathbf{y}^0 \in \mathbb{R}^{3N}$  and set  $k = 0$   
**while**  $\|\Pi(\mathbf{y}^k)\|_2 > \varepsilon$  **do**  
     $\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{y}^k - \Pi'^{-1}(\mathbf{y}^k)\Pi(\mathbf{y}^k)$   
     $k = k + 1$   
**end while**

---

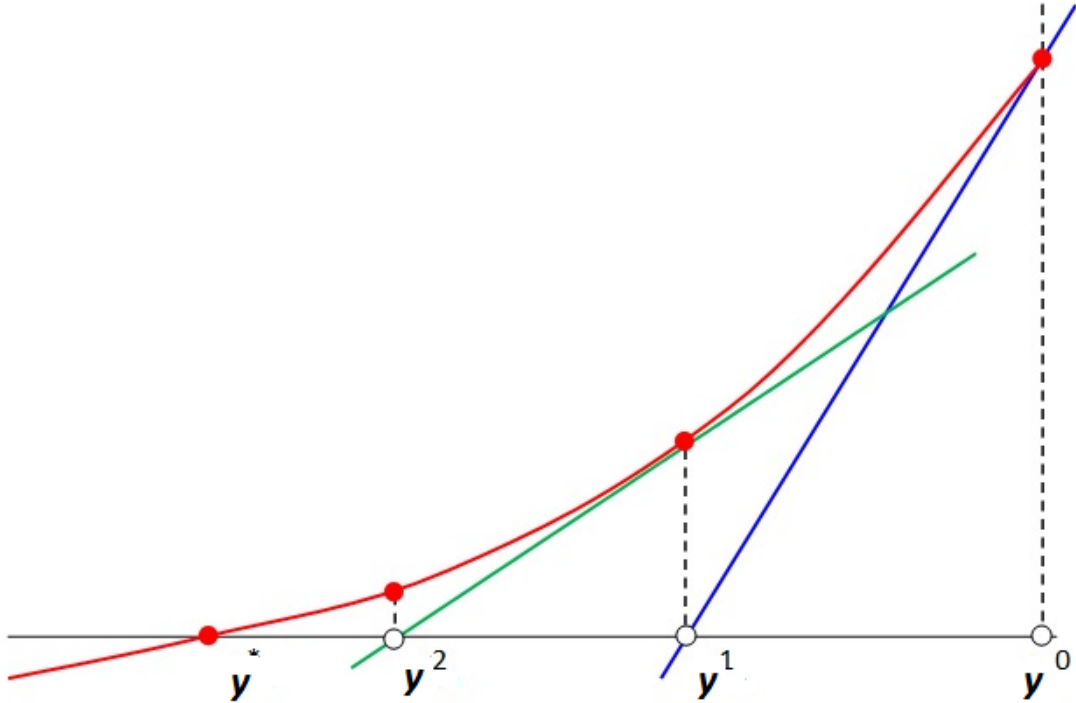


FIGURE 2.2 – illustration de la méthode de Newton

Présentons à présent l'algorithme de Newton-min pour résoudre le système précédent ( $\Pi(\mathbf{y}) = 0$ ) basé comme nous venons de l'annoncer sur la méthode de Newton

classique. Comme la fonction  $\mathbf{\Pi}$  composée de la fonction min n'est pas différentiable, on ne peut appliquer simplement la méthode de Newton "classique". L'algorithme de Newton-min permettra de contourner cette difficulté. On commence par choisir un vecteur  $\mathbf{y}^0 \in \mathbb{R}^{3N}$ . Ensuite, on considère un entier naturel  $k \in \mathbb{N}^*$ . On construit deux ensembles d'indices complémentaires :

$$\begin{cases} A^k &= \{i : \mathbf{G}_i(\mathbf{y}^k) \leq \mathbf{F}_i(\mathbf{y}^k)\} \subset \{1 \dots N\}, \\ I^k &= \{i : \mathbf{G}_i(\mathbf{y}^k) > \mathbf{F}_i(\mathbf{y}^k)\} \subset \{1 \dots N\}. \end{cases} \quad (2.40)$$

Par définition,

$$\zeta = \min(\mathbf{F}, \mathbf{G}) = \min \left( \begin{pmatrix} \mathbf{F}_1 \\ \mathbf{F}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{F}_i \\ \vdots \\ \mathbf{F}_n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1 \\ \mathbf{G}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{G}_i \\ \vdots \\ \mathbf{G}_n \end{pmatrix} \right), \quad (2.41)$$

qui est équivalent à

$$\zeta = \begin{pmatrix} \min(\mathbf{F}_1, \mathbf{G}_1) \\ \min(\mathbf{F}_2, \mathbf{G}_2) \\ \vdots \\ \min(\mathbf{F}_i, \mathbf{G}_i) \\ \vdots \\ \min(\mathbf{F}_n, \mathbf{G}_n) \end{pmatrix}. \quad (2.42)$$

En s'inspirant de la méthode de Newton classique, on obtient que  $\mathbf{y}^k$  est solution de

$$\begin{cases} \mathbf{H}(\mathbf{y}^k) + \mathbf{H}'(\mathbf{y}^k)(\mathbf{y}^{k+1} - \mathbf{y}^k) = 0, \\ \zeta(\mathbf{y}^k) + \mathbf{J}_{\mathbf{y}^k}(\mathbf{y}^{k+1} - \mathbf{y}^k) = 0. \end{cases} \quad (2.43)$$

Ici,  $\mathbf{J}_{\mathbf{y}^k}$  est la pseudo-jacobienne de  $\zeta$  en  $\mathbf{y}^k$  définie par

$$(\mathbf{J}_{\mathbf{y}^k})_i = \begin{cases} \mathbf{G}'_i(\mathbf{y}^k) & \text{si } i \in A^k, \\ \mathbf{F}'_i(\mathbf{y}^k) & \text{si } i \in I^k. \end{cases} \quad (2.44)$$

Si  $\|\mathbf{\Pi}(\mathbf{y}^{k+1})\|_2 \leq \varepsilon$  alors  $\mathbf{y}^{k+1}$  est bien une bonne approximation du zéro. Dans le cas contraire on répète le procédé. Finalement, l'algorithme de Newton-min alterne les pseudo-Jacobienes  $\mathbf{G}'_i$  et  $\mathbf{F}'_i$ , en choisissant la plus petite des deux au point  $\mathbf{y}^k$  dans les ensembles  $A^k$  et  $I^k$ .

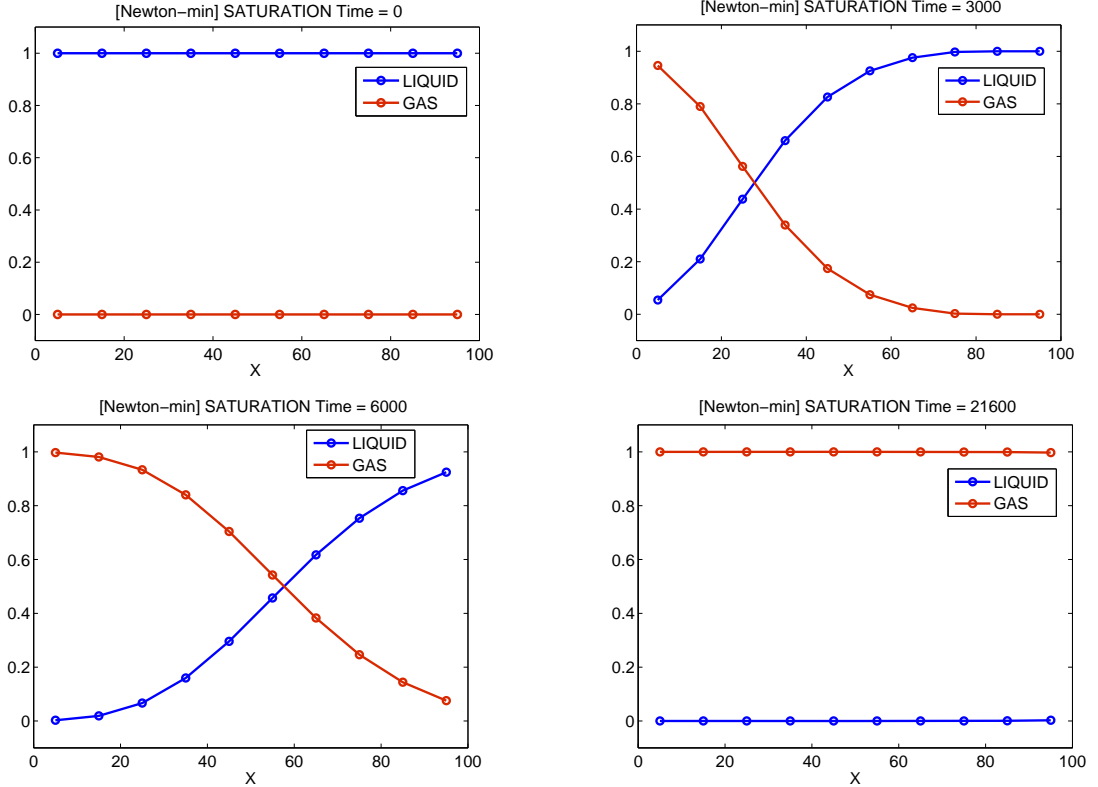
### 2.3.3 Simulation numérique matlab

Nous présentons dans les figures suivantes la solution numérique à divers instants  $n$ . Nous choisissons de représenter les courbes de la saturation de la phase liquide et de la pression liquide. Les résultats ont été obtenus en utilisant le code Matlab de Mademoiselle Ibtihiel BenGharbia.

On choisit comme longueur pour  $\Omega$ ,  $L = 100m$ . Chaque intervalle  $N_x$  a pour longueur  $h = 10m$  et on considère un pas de temps  $\Delta t = 10s$ . Pour les termes sources on prend  $Q_h = 1 m.s^{-1}$  et  $Q_w = 0 m.s^{-1}$ . Pour les paramètres du système présentés au début de ce chapitre, nous choisissons arbitrairement les valeurs suivantes :

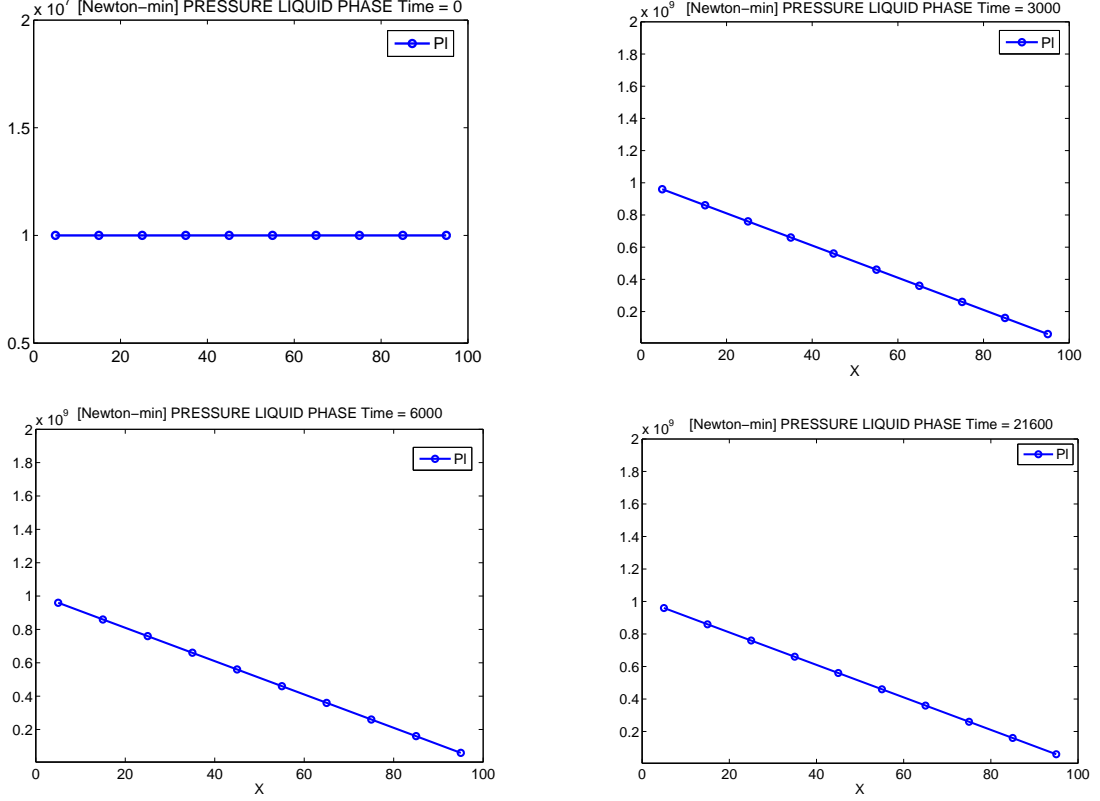
- $\phi = 0.1$ ,
- $\mu_g = 10^{-3} kg.m^{-1}.s^{-1}$ ,
- $\rho_l = 10^{-3} kg.m^{-1}$ ,
- $R = 8,314 J.mol^{-1}.K^{-1}$ ,
- $M^h = 10^{-2} kg.mol^{-1}$ ,
- $M^w = 10^{-2} kg.mol^{-1}$ ,
- $T = 303$  Kelvin,
- $g = 0 m.s^{-2}$ ,
- $D = 3e - 10 m^2.s^{-1}$ ,
- $P_0 = 1 \times 10^7 Pa$
- $P_L = 1 \times 10^7 Pa$ ,
- $\beta_g = \frac{M^h}{RT} kg.m^{-1}.Pa^{-1}$ ,
- $H = 10^{-9} kg.Pa^{-1}.m^{-3}$ ,
- $K = 100 \times 10^{-15} m.s^{-1}$ .

De plus, à l'instant initial, comme nous sommes dans un écoulement monophasique  $S_l = 1$ .



**Quelques commentaires** Nous observons qu'au cours du temps, la saturation de la phase liquide décroît. Cela est cohérent avec l'étude menée au début de ce chapitre. En effet, nous avons expliqué qu'à l'instant  $t=0$ , nous sommes dans le cas d'un écoulement monophasique (phase liquide) contenant seulement de l'eau

et donc  $S_l = 1$  et  $S_g = 0$ . Ensuite, nous injectons de l'hydrogène dans la solution liquide ce qui provoque un dégagement d'hydrogène gazeux et on se retrouve ainsi au cœur d'un problème diphasique liquide-gaz ( $S_l + S_g = 1$ ). On remarque que plus on avance dans le temps, plus le domaine sera concentré en gaz. Ce qui est normal vu qu'à l'origine on injecte du gaz de manière constante et uniforme. Ainsi à l'instant  $t = 3000s$  on trouvera du gaz dans les 60 premières mailles et à l'instant  $t = 6$  heures, le milieu sera complètement gazeux. On peut en conclure que l'algorithme de Newton-min présente des résultats encourageants.



**Quelques commentaires** A l'état initial,  $P_l = 1$ . Cela est cohérent avec l'étude menée au début de ce chapitre. En effet, à l'instant  $t = 0$ , nous sommes dans le cas d'un écoulement monophasique (phase liquide) et donc la pression capillaire est nulle. Les graphes suivants font apparaître que dans le cas diphasique (liquide-gaz) la pression liquide décroît en variable d'espace jusqu'à la valeur de  $6 \times 10^7 Pa$ . Cela correspond également à l'étude menée au préalable. Plus on avance dans le temps, la phase gazeuse devenant dominante, la pression liquide diminue.







# Conclusion

Dans ce rapport, nous avons abordé deux problèmes physiques différents sur bien des aspects. En effet, dans le Chapitre 1 il a été question d'étudier le comportement de deux membranes, et dans le Chapitre 2 un écoulement diphasique a été considéré. Le point commun de ses deux problèmes est leur formulation sous forme d'inégalités variationnelles avec des contraintes de complémentarités.

Ainsi, on a étudié le problème de deux membranes modélisé par un système d'équations aux dérivées partielles linéaires relié par des conditions de complémentarités linéaires. Le but était de pouvoir construire un estimateur d'erreur a posteriori pour ce problème modèle en suivant la méthodologie employé dans [8]. On s'est focalisé sur la construction des flux équilibrés dans les espaces de Raviart–Thomas–Nédélec, nous permettant ensuite de construire les estimateur d'erreurs. Le Chapitre 1 s'est terminé par une question non résolue compte tenu du temps imparti. On aurait en effet aimé appliquer l'algorithme de Newton–min à ce problème. Cela sera traité par la suite en thèse où nous changerons la définition 1.19 afin d'obtenir des contraintes de complémentarités équivalentes à la fonction min. La suite naturelle consistera à trouver une version adaptative du solveur non linéaire Newton–min.

Dans le Chapitre 2, on a abordé un cas pratique, à savoir le problème du stockage des déchets radioactifs. Il s'agissait là d'étudier un système d'équations aux dérivées partielles non linéaires relié par des conditions de complémentarités non linéaires. Dans la même philosophie que l'étude menée dans le Chapitre 1, nous avons discrétisé notre problème, cette fois ci par la méthode des volumes finis et le système discrétisé a été résolu par l'algorithme de Newton–min. Les résultats obtenus furent encourageants compte tenu des similitudes observées avec l'étude menée au début de ce chapitre. De plus, les modèles diphasiques sont d'une grande complexité car nous n'avons pas de résultats d'existence de solutions faibles (voir [7]). L'objectif à terme serait là également de trouver un critère d'arrêt pour le solveur Newton–min non linéaire et de construire un estimateur d'erreur a posteriori robuste.

Enfin, au vu des résultats probants de ce rapport, une extension en dimension 2 et 3 d'espace de ces études menées dans les Chapitres 1 et 2 est prévue dans le cadre de mon doctorat.



# Bibliographie

- [1] Faker Ben Belgacem, Christine Bernardi, Adel Blouza, and Martin Vohralík. A finite element discretization of the contact between two membranes. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 43(1) :33–52, 2009.
- [2] Faker Ben Belgacem, Christine Bernardi, Adel Blouza, and Martin Vohralík. On the unilateral contact between membranes. Part 2 : *a posteriori* analysis and numerical experiments. *IMA J. Numer. Anal.*, 32(3) :1147–1172, 2012.
- [3] Ibtihel Ben Gharbia. Résolution de problèmes de complémentarité, application à un écoulement diphasique en milieu poreux. *Thèse de Doctorat de mathématique appliquée, INRIA Université Paris Dauphine*, 2012.
- [4] Ibtihel Ben Gharbia and Jérôme Jaffré. Gas phase appearance and disappearance as a problem with complementarity constraints. *Math. Comput. Simulation*, 99 :28–36, 2014.
- [5] Haim Brezis. Functional analysis, sobolev spaces and partial differential equations. *Springer, New York*, pages 138–140, 2011.
- [6] Guy Chavent and Jérôme Jaffré. Book, mathematical models and finite elements for reservoir simulation. *Studies in mathematics and its applications*, pages 9–12, NORTH-HOLLAND 1986.
- [7] Daniele A. Di Pietro, Martin Vohralík, and Soleiman Yousef. An a posteriori-based, fully adaptive algorithm with adaptive stopping criteria and mesh refinement for thermal multiphase compositional flows in porous media. *Comput. Math. Appl.*, 68(12, part B) :2331–2347, 2014.
- [8] Martin Vohralík. A posteriori error estimates for efficiency and error control in numerical simulations. *Course master degree, INRIA/Pierre and Marie Curie University*, 2015.