



UNIVERSITE LOUIS PASTEUR DE STRASBOURG-CNRS
INSTITUT DE MECANIQUE DES FLUIDES ET DES SOLIDES UMR 7507



THESE

Présentée en vue de l'obtention du diplôme de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITE LOUIS PASTEUR DE
STRASBOURG**

Spécialité: Mécanique des Fluides

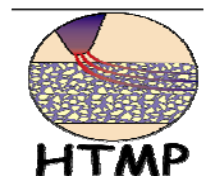
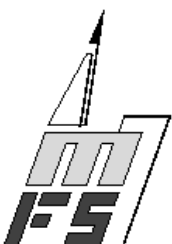
par

Charbel-Pierre EL SOUEIDY

**Éléments finis discontinus multi-domaines en temps pour la modélisation du
transport en milieu poreux saturé**

Soutenue le 20/11/2008 devant le jury constitué de:

MM.	A. YOUNES	Directeur de thèse
	R. MOSÉ	Rapporteur interne
	R. ABABOU	Rapporteur externe
	B. AMAZIANE	Rapporteur externe
	Ph. ACKERER	Examineur
	L. LOTH	Membre invité



AVANT-PROPOS

Les travaux de recherche présentés dans ce mémoire ont été conduits au sein de l'Institut de Mécanique des Fluides et des Solides de Strasbourg. Ils ont bénéficié du soutien financier de l'Agence Nationale pour la Gestion des Déchets Radioactifs.

Mes tous premiers remerciements vont à Philippe Ackerer et Anis Younes qui ont été mes guides sur le sentier de la recherche. Je retiens qu'ils m'ont toujours soutenu et encouragé. Sans eux, je n'aurai sans doute pas surmonté les différentes épreuves rencontrées.

Je pense également à mes collègues qui m'ont accompagné durant ce travail : François Lehmann, Benjamin Belfort, Vincent Fontaine, Luc Pierrejean, Ingrid Pollet, Markus Konz, Marwan Fahs, Samer Majdalani,... et à tous les autres que j'ai oublié de citer...

J'exprime aussi toute ma reconnaissance aux personnes qui ont accepté d'être membres du jury : MM. Robert Mosé, Professeur à l'École Nationale du Génie de l'Eau et de l'Environnement de Strasbourg, Rachid Ababou, Professeur à l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, Brahim Amaziane, Maître de Conférences à l'Université de Pau et des Pays de l'Adour, et Laurent Loth de l'Agence Nationale pour la gestion des déchets radioactifs.

Je n'oublies pas MM. Bernard Lickel, Jacques Detolle, Paul Delmas et Marie-Odile Contat qui m'ont intégré dans le département Génie Civil de l'IUT Robert Schuman de Strasbourg et ont contribué à mon initiation à l'enseignement supérieur.

Pour terminer, je félicite tout simplement le lecteur qui aura la curiosité (et le courage) de parcourir ce manuscrit. Je lui demande d'être clément s'il croise quelques erreurs oubliées.

Table des matières

Introduction	5
Chapitre 1	8
Modélisation de l'écoulement et du transport en milieu poreux saturé	
1.1 Le milieu poreux	8
1.1.1 Définition	8
1.1.2 La porosité	9
1.1.3 Théorie de la continuité : le volume élémentaire représentatif	9
1.2 Modélisation de l'écoulement en milieu poreux saturé	11
1.2.1 La loi de Darcy	11
1.2.2 Equation de conservation de la masse	14
1.3 Modélisation du transport en milieu poreux saturé	16
1.3.1 La convection	16
1.3.2 La diffusion moléculaire	17
1.3.3 La dispersion cinématique	17
1.3.4 L'équation de convection-dispersion	19
1.3.5 Convection versus dispersion	20
1.4 Couplage écoulement-transport en milieu poreux saturé	20
1.5 Conclusion	22
Chapitre 2	23
Résolution numérique des équations de l'écoulement et du transport	
2.1 Introduction	23
2.2 Résolution de l'écoulement en milieu poreux saturé	25
2.2.1 Généralités	25
2.2.2 Éléments finis mixtes (EFM) et mixtes hybrides (EFMH)	27
2.2.3 Discrétisation du problème d'écoulement à l'aide des EFMH	28
2.3 Résolution numérique de l'équation de transport	33

2.3.1	La méthode de séparation d'opérateurs	33
2.3.2	Formulation mathématique de la méthode de séparation d'opérateurs	34
2.3.3	Combinaison des méthodes numériques	36
2.4	Résolution numérique de l'équation hyperbolique de conservation par les EFD	39
2.4.1	Formulation variationnelle	40
2.4.2	Discrétisation temporelle	42
2.4.3	Espaces d'approximation	43
2.5	Limitation de pente	46
2.5.1	Limitation de pente dans le cas des éléments quadrangulaires	46
	<i>Limitation de pente dans l'espace Q1</i>	46
	<i>Limitation de pente dans l'espace P1</i>	47
	<i>Résultats numériques dans le cas des éléments quadrangulaires</i>	49
2.5.2	Limitation de pente dans le cas des éléments triangulaires	53
	<i>Le limiteur L-Minmod</i>	54
	<i>Le limiteur de Hoteit et al. (2004)</i>	55
	<i>Le limiteur de Cockburn et Shu (1998)</i>	56
	<i>Le limiteur de Burbeau et al. (2001)</i>	58
	<i>Résultats numériques dans le cas des éléments triangulaires</i>	59
2.6	Conclusion	61

Chapitre 3 _____ **63**

Discrétisations temporelles alternatives pour la résolution de la partie hyperbolique de l'équation de transport

3.1	Introduction	63
3.2	Résolution de l'équation de convection par une classe de schémas implicites et semi-implicites en temps	65
3.2.1	Généralités	65
3.2.2	Proposition d'une classe de schémas semi-implicites	67
3.2.3	Résultats numériques	68
	<i>Transport d'un contaminant dans un champ d'écoulement uniforme</i>	68
3.3	Résolution de l'équation de convection par une classe de schémas explicites multi-domaines en temps	76
3.3.1	Généralités	76
3.3.2	Formulation mathématique des schémas explicites multi-domaines en	

temps	78
3.3.3 Résultats numériques	83
<i>Transport d'un contaminant dans un champ d'écoulement uniforme</i>	83
<i>Le problème du transport d'une gaussienne</i>	92
<i>Transport d'un contaminant dans un champ d'écoulement non-uniforme :</i>	
<i>Cas du double puits (injection et pompage)</i>	95
3.4 Conclusion	98
Chapitre 4	100
Application des schémas multi-domaines en temps pour la résolution des écoulements densitaires	
4.1 Introduction	100
4.2 Modèle mathématique des écoulements densitaires	102
4.3 Résolution numérique	103
4.3.1 Résolution de l'équation de l'écoulement	103
4.3.2 Résolution de l'équation de transport	105
4.3.3 Procédure itérative de couplage des équations non-linéaires	106
4.4 Résultats numériques	108
4.4.1 Problème de l'intrusion saline avec présence d'un puits de pompage	108
4.4.2 Expériences d'Oswald	111
4.5 Conclusion	120
Conclusion générale et Perspectives	122
Les Annexes	125
Bibliographie	133
Liste des figures	144
Liste des tableaux	147

Introduction

Sous les effets combinés de l'accroissement de la population et de l'intensification des activités polluantes, la préservation des eaux souterraines est devenue l'un des défis majeurs des sociétés contemporaines. Une gestion réussie de cette richesse exige une connaissance assez approfondie des phénomènes liés à l'écoulement ainsi qu'au transfert de masse en milieu poreux. Les milieux souterrains étant difficiles d'accès, les simulations numériques basées sur des modèles mathématiques, constituent un outil intéressant pour mieux comprendre le phénomène du transfert de polluants dans les aquifères. Cependant la modélisation à grande échelle en trois dimensions, sur une longue période de temps et dans un milieu hétérogène dépasse les capacités actuelles des machines de calcul. Afin de repousser les limitations liées à la puissance des ordinateurs, une réflexion permanente sur le choix et la conception des méthodes numériques est nécessaire. Le présent travail s'inscrit dans cette optique. Nous présentons une contribution à quelques méthodes numériques utilisées pour la simulation du transport des contaminants en milieu poreux saturé.

L'équation qui régit le transport d'un soluté non réactif dans les couches souterraines est composée d'un terme dispersif et d'un terme convectif. La technique de séparation d'opérateurs a l'avantage d'adapter à chaque phénomène physique la méthode de résolution numérique la mieux appropriée. Dans ce cadre, la dispersion est résolue avec la méthode des Éléments Finis Mixtes Hybrides (EFMH) en utilisant une discrétisation implicite en temps. Ce schéma permet d'assurer la continuité de la composante normale du flux dispersif à travers les interéléments du maillage et de préserver le bilan de masse dans chaque élément. Les Éléments Finis Discontinus de Galerkin (EFD) sont utilisés pour résoudre la partie convective de l'équation de transport.

Les EFD sont basés sur une approximation polynomiale par morceaux de la solution au niveau de chaque maille. Afin de supprimer les oscillations non physiques, une étape supplémentaire de limitation de pente est nécessaire pour stabiliser la solution. Pour un maillage quadrangulaire et dans le cadre classique de la théorie des éléments finis, la solution est approximée dans l'espace Q_1 (polynômes quadratiques). Dans ce cas, les degrés de liberté sont les concentrations nodales. Cockburn et Shu (1998) proposent une approche plus astucieuse où les degrés de liberté sont la valeur moyenne de la concentration et ses gradients dans les différentes directions de

l'espace. Dans ce cas, la solution est approximée dans l'espace P_1 (polynômes linéaires). Dans la *première partie* de ce travail, ces deux espaces d'approximation sont considérés. Dans un premier temps, nous explorons plus en détail les deux approches en les comparant pour des maillages quadrangulaires structurés et non-structurés. Dans un second temps, nous appliquons la seconde approche aux maillages triangulaires non-structurés. Plusieurs techniques de limitation de pentes sont exposées afin de trouver la procédure de reconstruction la plus appropriée.

Afin de bien discrétiser les fronts raides de concentration qui caractérisent les phénomènes convectifs, les EFD emploient une discrétisation temporelle explicite en temps. Le choix du pas de temps assurant la stabilité de la solution est dans ce cas contraint par un strict respect du nombre de courant CFL. Ce critère dépend du champ de vitesse ainsi que de la taille des différents éléments du maillage. Dans un problème de transport de contaminants où des puits d'injection et/ou de pompage sont présents par exemple, la vitesse peut varier de plusieurs ordres de grandeur. La condition CFL globale impose dans ce cas une restriction importante sur le pas de temps à utiliser, ce qui augmente significativement les temps de calcul CPU. Dans la *seconde partie* de ce travail, nous présentons deux alternatives qui permettent de pallier à cet inconvénient majeur des schémas explicites traditionnels.

La première alternative consiste à étudier l'apport d'une discrétisation implicite-explicite (θ -schéma) pour la résolution de l'équation de convection. L'objectif étant de créer un schéma qui permet de conserver les avantages des schémas explicites tout en leur donnant la possibilité d'utiliser des pas de temps plus grands à l'instar des schémas implicites. La seconde alternative consiste à adopter une méthode de discrétisation explicite en temps basée cette fois sur une condition de stabilité locale. Le domaine de calcul est découpé en plusieurs zones et différents pas de temps sont affectés à chaque zone en fonction des caractéristiques locales de l'hydrodynamique et du maillage. Ces pas de temps locaux sont des multiples du plus petit pas de temps toléré par la condition de CFL globale. Le raccord entre les différentes zones est réalisé de sorte que le schéma obtenu conserve l'ensemble des propriétés numériques du schéma explicite classique. Pour les deux alternatives étudiées, plusieurs simulations sont effectuées pour différentes valeurs du nombre de Péclet, sur des maillages triangulaires fortement déstructurés.

La *troisième* et dernière *partie* de ce travail est consacrée à la simulation du transport de solutés avec contraste de masse volumique en

deux et trois dimensions. Quand la variation de la densité est non négligeable, l'équation de transport est couplée à celle de l'écoulement par les équations d'état. Il en résulte alors un système difficile à résoudre et une variation continue du champ de vitesse dans le temps. Les schémas multi-domaines en temps nécessitent dans ce cas une répartition en zones qui évolue au cours de la simulation. Les expériences du "salt-pool problem" (Oswald, 1998) qui consistent à étudier l'effet du contraste de masse volumique sur un écoulement dans un cube sont considérées. Les études précédentes montrent que des maillages fins et extrêmement denses sont nécessaires afin de réduire les différences observées entre les solutions numériques et expérimentales. L'utilisation des schémas multi-domaines avec une répartition dynamique assure des gains énormes en temps de calcul dans ce cas de figure. Cet avantage permet de comparer différentes configurations de maillages afin d'étudier la sensibilité des simulations numériques par rapport à la discrétisation spatiale utilisée.

Chapitre 1

Modélisation de l'Écoulement et du Transport en Milieux Poreux Saturé

- 1.1 Le milieu poreux**
 - 1.1.1 Définition
 - 1.1.2 La porosité
 - 1.1.3 Théorie de la continuité : le volume élémentaire représentatif
- 1.2 Modélisation de l'écoulement en milieu poreux saturé**
 - 1.2.1 Loi de Darcy
 - 1.2.2 Équation de conservation de la masse
- 1.3 Modélisation du transport en milieu poreux saturé**
 - 1.3.1 La convection
 - 1.3.2 La diffusion moléculaire
 - 1.3.3 La dispersion cinématique
 - 1.3.4 L'équation de convection-dispersion
 - 1.3.5 Convection versus dispersion
- 1.4 Couplage écoulement-transport en milieu poreux saturé**
- 1.5 Conclusion**

Dans ce premier chapitre, nous rappelons brièvement quelques notions fondamentales liées à la description d'un milieu poreux (porosité et échelle caractéristique). L'objectif est aussi de définir le cadre dans lequel sont appliquées les équations aux dérivées partielles (EDP) que nous allons traiter dans la suite du travail. Ces équations se réfèrent d'une part à l'hydrodynamique d'une nappe d'eau souterraine et d'autre part au transport de masse en milieu poreux saturé. L'hydrodynamique des écoulements en milieu poreux est décrite par un système d'équations composé de la loi de Darcy et de l'équation de continuité. Le transport de masse, associé à l'écoulement de l'eau, est régi par l'équation classique de convection-dispersion.

1.1 Le milieu poreux

1.1.1 Définition

Un milieu poreux est généralement défini comme un ensemble de grains solides autour desquels subsistent des espaces vides appelés

pores (Bear, 1979 ; Dagan, 1989 ; Yeh, 1999). Ces pores sont souvent connectés entre eux et peuvent être occupés par de l'eau, de l'air ou d'autres fluides. Le milieu poreux est dit saturé en eau si les pores sont exclusivement remplis d'eau. Si une phase gazeuse y est également présente, le milieu est dit non saturé en eau. Dans notre étude, nous nous intéressons exclusivement aux milieux poreux saturés en eau. Avant d'aborder la dérivation des différentes EDP régissant l'écoulement et le transport dans un tel milieu, nous rappelons quelques notions de base nécessaires pour établir de telles relations.

1.1.2 La porosité

La porosité totale ϕ [-] d'un milieu poreux est définie comme étant le rapport entre le volume des vides V_{vide} [L^3] et le volume total V_{total} [L^3] :

$$\phi = \frac{V_{vide}}{V_{total}} \quad (1.1)$$

En milieu poreux saturé, tous les vides sont occupés par de l'eau, mais une partie peut être liée (eau de rétention), c'est-à-dire maintenue à la surface des grains par des forces d'attraction moléculaire. Une autre partie peut être aussi coincée physiquement dans des bras morts ou des culs de sacs. Ces volumes morts sont très importants quand le milieu poreux est consolidé. Cela nous amène à définir une autre forme de porosité liée à la circulation du fluide (Bear, 1979). La porosité cinématique ϕ_c [-] est définie comme étant le rapport du volume des vides occupés par le fluide mobile sur le volume total du milieu poreux. La porosité cinématique ϕ_c est celle qui intervient physiquement dans les phénomènes d'écoulement et de transport.

1.1.3 Théorie de la continuité : le volume élémentaire représentatif

Les milieux poreux naturels sont caractérisés par une extrême complexité de la distribution des pores, irrégulière aussi bien en forme qu'en taille. Si en théorie il est possible de décrire ce système à l'échelle du pore, une telle description se révèle utopiste lorsque la taille du système augmente. Par conséquent, il est nécessaire de passer de l'échelle microscopique où les lois fondamentales de la physique s'appliquent mais où les variables sont inaccessibles à la mesure, à l'échelle macroscopique où les phénomènes sont observés.

Les équations qui gouvernent l'évolution des grandeurs macroscopiques ne sont pas nécessairement de la même forme que celles s'appliquant au niveau microscopique. Afin de pouvoir établir de telles équations, nous introduisons la notion du volume élémentaire représentatif (VER) à partir duquel le milieu poreux peut être considéré comme un milieu continu (Bear, 1979). Dans cette théorie, le système physique réel discret est remplacé par un système continu dans lequel les propriétés physiques le décrivant varient continûment dans l'espace. La théorie de la continuité repose sur l'hypothèse qu'un système physique réel peut être approximé par un système dans lequel les variations dans l'espace des propriétés étudiées sont suffisamment lisses pour permettre l'utilisation de calculs différentiels. L'intérêt est donc de pouvoir formuler les changements dans le système en terme d'équations différentielles décrivant les processus qui ont lieu.

Dans la présentation continue d'un milieu poreux, les variables physiques décrivant le milieu, discontinues à l'échelle microscopique, sont remplacées par des fonctions continues à l'échelle macroscopique. La valeur de chaque variable physique affectée à un point mathématique dans l'espace continu est obtenue en moyennant la propriété physique sur un volume élémentaire représentatif (VER). Les dimensions du VER sont généralement suffisamment grandes par rapport à la taille du grain, pour contenir un grand nombre de pores et pouvoir ainsi définir une propriété moyenne globale avec l'assurance d'une fluctuation négligeable d'un pore à l'autre ; mais suffisamment petites pour que les variations du paramètre d'un domaine au domaine voisin puissent être approchées par des fonctions continues (De Marsily, 1981).

Le VER peut être estimé en mesurant la porosité totale ϕ d'une sphère de rayon r [L] centrée sur un point P . Sa dimension est prise égale au rayon r_0 [L] défini par l'apparition d'un palier sur la courbe reliant la porosité totale du milieu à la taille du volume d'observation (figure 1.1). Nous adoptons alors comme porosité totale au point P la valeur $\phi(r_0)$. Pour des sphères de rayon inférieur à r_0 , $\phi(r)$ est sensible aux fluctuations microscopiques du milieu poreux et varie aléatoirement. La valeur de la porosité peut aussi varier au-delà d'une certaine valeur de r si le milieu est hétérogène.

Nous nous placerons dans ces conditions de continuité dans la suite du travail.

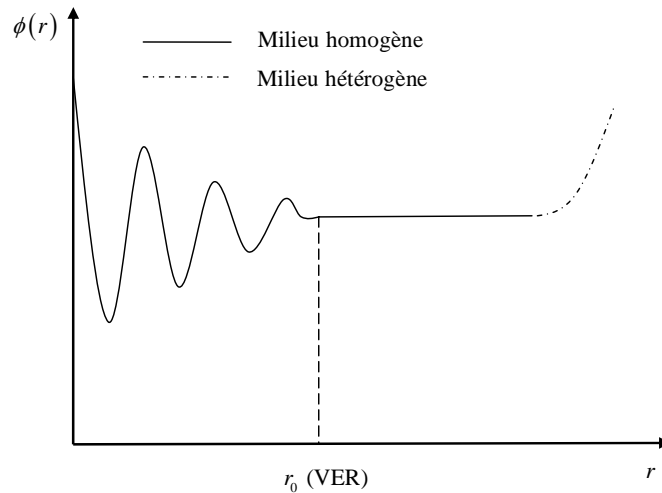


Figure 1.1 : Évolution de la porosité totale d'une sphère centrée en un point P du milieu poreux en fonction de son rayon r.

1.2 Modélisation de l'écoulement en milieu poreux saturé

L'écoulement de l'eau en milieu poreux saturé est décrit par un système d'équations composé de la loi de Darcy et de l'équation de conservation de la masse (ou équation de continuité). La loi de Darcy est d'ailleurs considérée comme l'analogue pour les milieux poreux de l'équation de conservation de la quantité de mouvement de la mécanique des fluides classiques.

1.2.1 Loi de Darcy

L'eau souterraine s'écoule des niveaux d'énergie élevés vers des niveaux d'énergie plus faibles. Cette énergie est essentiellement le résultat de l'altitude et de la pression. La loi de Darcy en milieux poreux exprime la vitesse de filtration en fonction du gradient de pression et de la gravité. Pour un fluide compressible, la loi de Darcy s'écrit sous la forme générale suivante (Bear, 1979) :

$$\mathbf{q} = -\frac{\mathbf{k}}{\mu}(\nabla P + \rho g \nabla z) \quad (1.2)$$

où :

∇ : l'opérateur $(\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$

- \mathbf{q} : le vecteur vitesse de Darcy $[\text{LT}^{-1}]$
 μ : la viscosité dynamique du fluide $[\text{ML}^{-1}\text{T}^{-1}]$
 \mathbf{k} : la perméabilité intrinsèque du milieu $[\text{L}^2]$
 P : la pression $[\text{ML}^{-1}\text{T}^{-2}]$
 ρ : la masse volumique du fluide $[\text{ML}^{-3}]$
 g : l'accélération de la pesanteur $[\text{LT}^{-2}]$
 z : la cote définie selon un axe vertical ascendant $[\text{L}]$

La loi de Darcy (1.2) peut être également écrite en fonction de la charge hydraulique (Huyakorn *et al.*, 1987) :

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}\left(\nabla h + \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \nabla z\right) \quad (1.3)$$

où :

- ρ_0 : la masse volumique de l'eau $[\text{ML}^{-3}]$
 $h = P / \rho_0 g + z$: la charge hydraulique $[\text{L}]$
 $\mathbf{K} = \frac{\mathbf{k}\rho_0 g}{\mu}$: la conductivité hydraulique ou la perméabilité $[\text{LT}^{-1}]$.

Dans le cas d'un traceur de l'eau où la présence de soluté n'affecte pas la densité de l'eau ($\rho \approx \rho_0$), l'équation de Darcy s'écrit :

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}\nabla h \quad (1.4)$$

Du fait de l'anisotropie du milieu, la perméabilité \mathbf{K} est définie par un tenseur symétrique de la forme :

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{xy} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{xz} & K_{yz} & K_{zz} \end{bmatrix} \quad (1.5)$$

En choisissant les axes du repère de manière à ce qu'ils soient parallèles aux directions principales d'anisotropie, \mathbf{K} peut s'écrire sous la forme d'un tenseur diagonal :

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_h & 0 & 0 \\ 0 & K_h & 0 \\ 0 & 0 & K_v \end{bmatrix} \quad (1.6)$$

où K_h est le coefficient de perméabilité horizontale et K_v le coefficient de perméabilité verticale (De Marsily, 1981).

La vitesse de Darcy \mathbf{q} n'est pas la vitesse réelle du fluide qui s'écoule dans le milieu poreux. La vitesse réelle \mathbf{V} [LT^{-1}] du fluide (ou vitesse moyenne de pore) est donnée par la formule suivante :

$$\mathbf{V} = \frac{\mathbf{q}}{\phi_c} \quad (1.7)$$

L'équation (1.2) établit une relation linéaire caractéristique des écoulements de Stokes dans lesquels les forces visqueuses sont prépondérantes par rapport aux forces d'inertie. Cette hypothèse n'est pas vraie pour des grandes vitesses d'infiltration. Nous définissons alors le nombre adimensionnel de Reynolds :

$$\text{Re} = \frac{\rho \|\mathbf{q}\| d}{\mu} \quad (1.8)$$

où d [L] est une longueur caractéristique du milieu (prise souvent comme le diamètre moyen des grains constituant le milieu poreux).

Le nombre de Reynolds s'interprète comme un rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses. L'équation (1.2) est valable pour de faibles vitesses de filtration donc pour des écoulements laminaires et de ce fait pour des écoulements à faible nombre de Reynolds (Freeze et Cherry, 1979). En plus, en deçà d'une certaine valeur de la taille moyenne de pore, les forces capillaires affectent la circulation du fluide à l'intérieur de la matrice poreuse. La limite de validité de l'équation (1.2) est généralement fixée à (Crandall et Majda, 1980 ; Comiti *et al.*, 2000) :

$$1 < \text{Re} < 10 \quad (1.9)$$

La loi de Darcy n'est pas aussi valable pour les très faibles perméabilités ou en cas d'interaction électrostatique entre les ions du fluide et les parois du solide (Jaquin, 1965).

1.2.2 Équation de conservation de la masse

Le principe de conservation de la masse stipule que la variation de la masse dans un volume de l'ordre d'un VER pendant un intervalle de temps dt est égale à la quantité de masse entrante moins la quantité de masse sortante. Ce principe se traduit mathématiquement par l'équation différentielle suivante (Bear, 1979):

$$\frac{\partial(\phi_c \rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{q}) = \rho Q_s \quad (1.10)$$

où Q_s [T^{-1}] représente le terme puits/source par unité de volume.

Deux hypothèses sont communément citées dans la littérature (Holzbecher, 1998) et permettent de simplifier l'équation (1.10) :

- L'approximation d'Oberbeck-Boussinesq où les variations de la densité sont négligées. L'équation précédente devient alors :

$$\frac{\partial \phi_c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = Q_s \quad (1.11)$$

- La variation de la densité dans la direction de l'écoulement est négligeable. Nous obtenons dans ce cas :

$$\frac{\partial(\phi_c \rho)}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \mathbf{q} = \rho Q_s \quad (1.12)$$

L'hypothèse de Boussinesq a un domaine de validité restreint (Evans et Raffensperger, 1992 ; Kolditz *et al.*, 1997 ; Younes, 2003) et sera évitée dans le cadre de ce travail. La seconde hypothèse consistant à négliger le terme $\nabla \rho \cdot \mathbf{q}$ dans l'équation de conservation de la masse n'introduit pas de différences significatives (Bear, 1979 ; Ackerer *et al.*, 2000) et sera adoptée dans la suite.

Nous supposons que la porosité ne dépend que de la pression et que la densité ρ du fluide dépend de la pression P , de la fraction massique du polluant dissous (soluté) C_m [-] (rapport entre la masse du soluté et la masse totale du fluide) et de la température T [K]. En négligeant les effets thermiques au sein du milieu poreux, nous pouvons écrire :

$$\frac{\partial(\phi_c \rho)}{\partial t} = \rho \frac{\partial \phi_c}{\partial t} + \phi_c \frac{\partial \rho}{\partial t} = \left(\rho \frac{\partial \phi_c}{\partial P} + \phi_c \frac{\partial \rho}{\partial P} \right) \frac{\partial P}{\partial t} + \phi_c \frac{\partial \rho}{\partial C_m} \frac{\partial C_m}{\partial t} \quad (1.13)$$

Soit α $[LT^2M^{-1}]$ le coefficient de compressibilité de la matrice poreuse et β $[LT^2M^{-1}]$ le coefficient de compressibilité du fluide définis par Bear (1979) :

$$\beta = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial P} \quad \alpha = \frac{1}{1 - \phi_c} \frac{\partial \phi_c}{\partial P}. \quad (1.14)$$

L'équation (1.13) devient :

$$\frac{\partial(\phi_c \rho)}{\partial t} = \rho S \frac{\partial P}{\partial t} + \phi_c \frac{\partial \rho}{\partial C_m} \frac{\partial C_m}{\partial t}. \quad (1.15)$$

Avec S $[LT^2M^{-1}]$ l'emmagasinement par unité de volume du milieu poreux dû à une variation d'une unité de pression et qui est défini par (Bear, 1979) :

$$S = \alpha(1 - \phi_c) + \phi_c \beta. \quad (1.16)$$

L'équation de conservation de la masse (1.10) devient :

$$\rho S \frac{\partial P}{\partial t} + \phi_c \frac{\partial \rho}{\partial C_m} \frac{\partial C_m}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \mathbf{q} = \rho Q_s. \quad (1.17)$$

L'équation (1.17) peut être également exprimée en fonction de la charge hydraulique :

$$\rho s \frac{\partial h}{\partial t} + \phi_c \frac{\partial \rho}{\partial C_m} \frac{\partial C_m}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \mathbf{q} = \rho Q_s \quad (1.18)$$

où s $[L^{-1}]$ est l'emmagasinement par unité de volume du milieu poreux dû à une variation d'une unité de charge, relié à S par :

$$s = \rho_0 g S \quad (1.19)$$

Dans le cas d'un traceur de l'eau, l'équation de conservation de la masse (1.18) s'écrit alors :

$$s \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = Q_s \quad (1.20)$$

1.3 Modélisation du transport en milieu poreux saturé

La phase fluide se déplaçant dans la matrice poreuse peut transporter avec elle un certain nombre de substances dissoutes. Plusieurs phénomènes physiques ou chimiques peuvent intervenir dans le transport de ces solutés.

Le transport de polluant non réactif en milieu poreux est un processus relativement complexe qui met en jeu trois mécanismes : la convection, la diffusion moléculaire et la dispersion cinématique. La section qui suit décrit brièvement l'ensemble de ces phénomènes.

La concentration C [ML^{-3}] d'un polluant dissous (soluté) définie par sa masse totale sur le volume total du fluide vaut :

$$C = \rho C_m \quad (1.21)$$

Puisque le fluide ne peut être situé physiquement que dans les pores, la quantité caractéristique du soluté à l'échelle du VER est donc égale à $\phi_c \rho C_m$.

1.3.1 La convection

L'entraînement du soluté par le mouvement moyen du fluide qui se déplace est le phénomène le plus intuitif de déplacement. L'équation de transport résultante s'obtient en appliquant la loi de conservation de la masse sur un volume élémentaire. Nous obtenons alors l'équation hyperbolique suivante :

$$\frac{\partial(\phi_c \rho C_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_c \rho C_m \mathbf{V}) = 0 \quad (1.22)$$

Sur la figure 1.2 (Besnard, 2003), la courbe en noir représente l'effet de la convection sur la répartition spatiale du panache. La forme du panache n'est pas modifiée et le soluté avance à la même vitesse que celle du fluide.

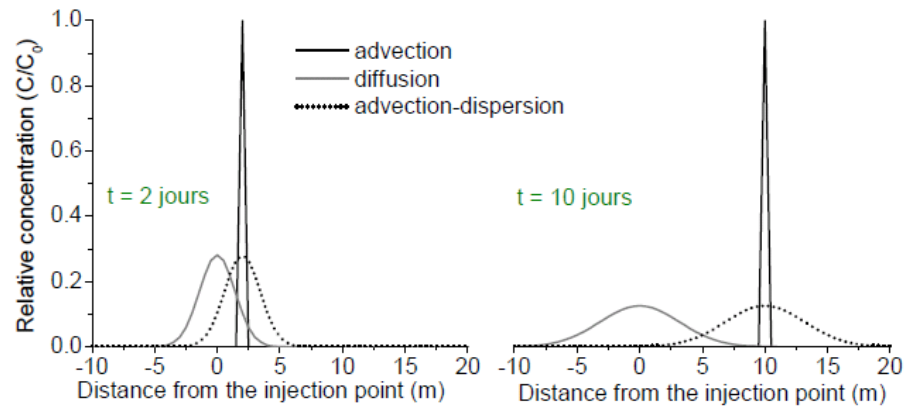


Figure 1.2 : Effets des principaux processus de transport sur la répartition spatiale d'un panache à un temps donné (Besnard, 2003).

1.3.2 La diffusion moléculaire

La diffusion moléculaire est un phénomène physico-chimique qui peut se dérouler même en l'absence de l'écoulement, donc indépendamment de la convection. Ce phénomène est lié à l'agitation moléculaire. Dans un fluide au repos, le mouvement brownien envoie des molécules dans toutes les directions de l'espace. Si la concentration dans le milieu n'est pas homogène, c'est-à-dire qu'il existe un gradient de concentration entre deux points voisins, le point ayant la concentration la plus élevée enverra plus de particules dans toutes les directions que l'autre point. La résultante sera donc un transfert de particules des zones à concentration élevée vers les zones à concentration faible selon une loi de Fick :

$$\frac{\partial(\phi_c \rho C_m)}{\partial t} = \nabla \cdot (\phi_c \rho \mathbf{D}_m \nabla C_m) \quad (1.23)$$

où \mathbf{D}_m est le tenseur diagonal de diffusion moléculaire dans le milieu poreux.

Sur la figure 1.2 (Besnard, 2003), la courbe grise représente l'effet de la diffusion moléculaire pure sur la répartition spatiale du panache. Le centre de masse du panache est fixe, le panache reste symétrique mais s'étale à fur et à mesure.

1.3.3 La dispersion cinématique

Du fait de la microstructure du milieu poreux, le champ de vitesse du fluide est hétérogène. Cette hétérogénéité qui se retrouve au sein du

milieu poreux (quelque soit l'échelle d'observation) entraîne une dilution du soluté appelée dispersion cinématique. Trois processus sont essentiellement à l'origine de ce phénomène :

- la variation des dimensions des pores entraîne une variation de la vitesse moyenne de propagation d'un pore à l'autre ;
- la fluctuation des lignes de courant autour de la direction principale de l'écoulement ;
- le profil des vitesses à l'échelle du pore est parabolique (maximale au milieu et minimale à la surface solide).

En fonction de la direction principale de l'écoulement, nous distinguons :

- la dispersion longitudinale α_L [L] qui a lieu suivant la direction principale de l'écoulement ;
- la dispersion transversale α_T [L] qui a lieu suivant un plan orthogonal à la direction de l'écoulement.

Le rapport (α_L / α_T) contrôle la forme du panache : plus ce rapport est petit, plus le panache sera large. Ce rapport varie généralement entre 5 et 100 (De Marsily, 1981). La théorie conventionnelle considère α_L et α_T comme des propriétés intrinsèques du milieu poreux. Pourtant des expériences (Gelhar *et al.*, 1979 ; Smith et Schwartz, 1980) ont montré que les dispersions dépendent de la distribution des hétérogénéités du milieu ainsi que de l'échelle d'observation. Leur estimation est donc complexe, ayant fait l'objet de plusieurs études sur le terrain (traçages et essais de pompages) ou de modélisations statistiques ou déterministes (Anderson, 1979 ; Dagan, 1987).

Dans la pratique, la diffusion moléculaire et la dispersion cinématique ne peuvent pas être dissociées. L'équation de transport par dispersion-diffusion est donnée par :

$$\frac{\partial(\phi_c \rho C_m)}{\partial t} = \nabla \cdot (\phi_c \rho \mathbf{D}_m \nabla C_m) + \nabla \cdot (\phi_c \rho \mathbf{D}_c \nabla C_m) \quad (1.24)$$

où \mathbf{D}_c est le tenseur de dispersion cinématique. Son expression générale est donnée par Bear (1979) en supposant l'hypothèse d'isotropie dans le plan normal à la vitesse d'écoulement (symétrie du tenseur) :

$$\mathbf{D}_c = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{\mathbf{V} \cdot \mathbf{V}}{\|\mathbf{V}\|} + \alpha_T \|\mathbf{V}\| \mathbf{I} \quad (1.25)$$

Le tenseur de diffusion/dispersion \mathbf{D} représente simultanément la contribution de la diffusion moléculaire et celle de la dispersion cinématique. Il est défini par :

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}_c + \mathbf{D}_m \quad (1.26)$$

1.3.4 L'équation de convection-dispersion

En ajoutant un terme puits/source, l'équation du transport d'un polluant conservatif et non réactif dans un milieu poreux saturé, isotrope et homogène s'écrit (Ogata, 1970 ; Bear, 1979 ; Freeze et Cherry, 1979) :

$$\frac{\partial(\phi_c \rho C_m)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\phi_c \rho C_m \mathbf{V}) + \nabla \cdot (\phi_c \rho \mathbf{D} \nabla C_m) + \rho Q_s C_m^* \quad (1.27)$$

où $C_m^* [-]$ est la fraction massique du soluté à la source. En développant cette équation, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \rho \phi_c \frac{\partial C_m}{\partial t} + C_m \left(\frac{\partial(\rho \phi_c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \phi_c \mathbf{V}) \right) + \phi_c \rho \mathbf{V} \cdot \nabla C_m \\ = \nabla \cdot (\phi_c \rho \mathbf{D} \nabla C_m) + \rho Q_s C_m^* \end{aligned} \quad (1.28)$$

Cette EDP est communément appelée l'équation de convection-dispersion. Sur la figure 1.2 (Besnard, 2003), la courbe en pointillées représente l'effet de convection-dispersion sur un transport monodimensionnel. Le centre de masse du panache se déplace à la vitesse du fluide et le panache s'étale au cours du temps.

La combinaison de cette équation avec l'équation de conservation de la masse (1.10) donne l'équation de transport dans un milieu poreux saturé avec prise en compte des variations de masse volumique :

$$\rho \frac{\partial C_m}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \cdot \nabla C_m = \nabla \cdot (\rho \mathbf{D} \nabla C_m) + \rho \frac{Q_s}{\phi_c} (C_m^* - C_m) \quad (1.29)$$

Dans le cas d'un traceur de l'eau, l'équation (1.29) est écrite avec la concentration comme inconnue :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{V}C) + \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla C) + \frac{Q_s}{\phi_c}(C^* - C) \quad (1.30)$$

où C^* [ML⁻³] est la concentration du soluté à la source.

1.3.5 Convection versus dispersion

L'importance relative du transport par dispersion et/ou diffusion par rapport au transport par convection est exprimée à l'aide du nombre de Péclet, nombre adimensionnel défini en 1-D par :

$$Pe = \frac{\|\mathbf{V}\|d}{D_c + D_m} \quad (1.31)$$

Lorsque le nombre de Péclet est nul, l'équation (1.27) se réduit à une équation de diffusion. C'est le cas par exemple des zones de faibles perméabilités ou à proximité de points d'eau stagnante. A l'inverse si le nombre de Péclet tend vers l'infini, le transport par convection est prépondérant comme c'est le cas, par exemple, des zones de fortes perméabilités ou à proximité de points influencés (ouvrages de captage).

1.4 Couplage écoulement-transport en milieu poreux saturé

Pour les problèmes de transport de masse dans les aquifères où la présence de soluté n'affecte pas la densité du fluide, le couplage entre l'équation de l'écoulement et l'équation de transport se présente de façon simple (1.32). La résolution de l'équation de l'écoulement fournit le champ de vitesse qui nous permet de résoudre l'équation de transport.

Pour la résolution des EDP (écoulement ou transport, avec/ou sans contraste de masse volumique), les conditions initiales (C.I) et les conditions aux limites (C.L) doivent être définies. Elles peuvent être soit des flux imposés (conditions de Neumann), soit des charges ou des concentrations imposées (conditions de Dirichlet).

$$\begin{aligned}
s \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} &= Q_s \\
\mathbf{q} &= -\mathbf{K} \nabla h \\
\text{C.L. :} & \text{charges et/ou flux imposés} \\
\text{C.I. :} & h(t_0) = \text{constante}
\end{aligned}$$

$$\downarrow \mathbf{V} = \frac{\mathbf{q}}{\phi_c}$$

(1.32)

$$\begin{aligned}
\frac{\partial C}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\mathbf{V}C) + \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla C) + \frac{Q_s}{\phi_c} (C^* - C) \\
\text{C.L. :} & \text{concentrations et/ou flux dispersifs imposés} \\
\text{C.I. :} & C(t_0) = \text{constante}
\end{aligned}$$

Quand la variation de densité est non négligeable, l'équation de transport (1.27) est couplée à celle de l'écoulement par les équations d'état. Ces équations traduisent la variation de la masse volumique et de la viscosité en fonction de la fraction massique dans la zone de mélange et jouent un rôle important sur le champ de vitesse. Le plus souvent, c'est un modèle linéaire qui est utilisé pour la densité (Voss, 1984) et une formulation polynomiale pour la viscosité (Herbert *et al.*, 1988) :

$$\begin{cases} \rho = \rho_0 + (\rho_1 - \rho_0) C_m \\ \mu = \mu_0 + \sum_i a_i C_m^i \end{cases} \quad (1.33)$$

avec ρ_1 la masse volumique du fluide saturé en soluté, ρ_0 la masse volumique de l'eau douce, μ_0 la viscosité de l'eau douce et a_i les coefficients de la formulation polynomiale. D'autres relations reliant la densité et la viscosité à la fraction massique peuvent également être utilisées (Carey *et al.*, 2004 ; Griffol *et al.*, 2005).

Le couplage écoulement-transport devient complexe lorsque la densité varie de façon considérable. Le système à résoudre devient dans ce cas fortement non linéaire (1.34). En effet, la propagation du soluté entraîne une variation de la densité qui affecte considérablement le champ de vitesse.

$$\rho s \frac{\partial h}{\partial t} + \phi_c \frac{\partial \rho}{\partial C_m} \frac{\partial C_m}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \mathbf{q} = \rho Q_s$$

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K} \left(\nabla h + \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \nabla z \right)$$

C.L. : charges et/ou flux imposés
 C.I. : $h(t_0) = \text{constante}$

$\downarrow \mathbf{V} = \frac{\mathbf{q}}{\phi_c}$

$\uparrow \begin{matrix} C_m \\ \rho(C_m) \\ \mu(C_m) \end{matrix}$

(1.34)

$$\rho \frac{\partial C_m}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \cdot \nabla C_m = \nabla \cdot (\rho \mathbf{D} \nabla C_m) + \rho \frac{Q_s}{\phi_c} (C_m^* - C_m)$$

C.L. : concentrations et/ou flux dispersifs imposés
 C.I. : $C_m(t_0) = \text{constante}$

A chaque instant de la discrétisation temporelle t , la vitesse de l'écoulement est approchée en résolvant la loi de Darcy et l'équation de continuité indépendamment du problème de transport. Cette vitesse est utilisée ensuite pour simuler le transfert du polluant pour ce même instant t . Les non-linéarités sont souvent à l'origine de la formation de plusieurs cellules de convection et donc d'un champ de vitesse complexe.

1.5 Conclusion

Les équations de l'hydrodynamique et du transport présentées dans ce chapitre sont relatives aux milieux poreux saturés en eau. Il s'agit d'un système d'EDP de plusieurs types (hyperboliques et paraboliques/elliptiques) qui ne se résout analytiquement que dans de très rares et simples cas. Plusieurs méthodes numériques de résolution, pour chaque type d'équation, ont été développées. Le chapitre suivant passe en revue les différentes méthodes classiques utilisées généralement en hydrogéologie et présente en détail celles qui sont retenues.

Chapitre 2

Résolution numérique des équations de l'écoulement et du transport

- 2.1 Introduction**
- 2.2 Résolution de l'écoulement en milieu poreux saturé**
 - 2.2.1 Généralités
 - 2.2.2 Éléments finis mixtes (EFM) et mixtes hybrides (EFMH)
 - 2.2.3 Discrétisation du problème d'écoulement à l'aide des EFMH
- 2.3 Résolution numérique de l'équation de transport**
 - 2.3.1 La méthode de séparation d'opérateurs
 - 2.3.2 Formulation mathématique de la méthode de séparation d'opérateurs
 - 2.3.3 Combinaison des méthodes numériques
- 2.4 Résolution numérique de l'équation hyperbolique de conservation par les EFD**
 - 2.4.1 Formulation variationnelle
 - 2.4.2 Discrétisation temporelle
 - 2.4.3 Espaces d'approximation
- 2.5 Limitation de pente**
 - 2.5.1 Limitation de pente dans le cas des éléments quadrangulaires
 - Limitation de pente dans l'espace Q1*
 - Limitation de pente dans l'espace P1*
 - Résultats numériques dans le cas des éléments quadrangulaires*
 - 2.5.2 Limitation de pente dans le cas des éléments triangulaires
 - Le limiteur L-Minmod*
 - Le limiteur de Hoteit et al. (2004)*
 - Le limiteur de Cockburn et Shu (1998)*
 - Le limiteur de Burbeau et al. (2001)*
 - Résultats numériques dans le cas des éléments triangulaires*
- 2.6 Conclusion**

2.1 Introduction

Les EDP décrivant l'écoulement et le transport en milieux poreux saturés sont généralement résolues soit par des méthodes analytiques (ou quasi-analytiques), soit par des méthodes numériques.

Le principal avantage des méthodes analytiques est de fournir quand cela est possible une solution exacte à l'équation de base. Plusieurs solutions analytiques ont été développées pour les équations de l'écoulement. Cependant, la plupart de ces solutions se limite à des problèmes hydrauliques.

ques relatifs aux puits impliquant une symétrie radiale (Walton, 1962 ; Lohman, 1972 ; Reed, 1980). Des solutions analytiques sont établies également pour la résolution de l'équation de transport. Ogata et Banks (1961), Ogata (1964), Sauty (1980) et Van Genuchten (1981), entre autres, ont présenté des solutions analytiques pour des transports monodimensionnels avec des conditions aux limites respectivement de type Dirichlet, Neumann et Cauchy. De Josselin de Jong (1958), Fried (1975), Bear (1979), Wilson et Miller (1978), Batu (1989, 1993) par exemple présentent des solutions analytiques pour le transport bidimensionnel. Enfin, Domenico et Robbins (1985), Leij Feike et Dane (1990) parmi d'autres, se sont intéressés au transport tridimensionnel. Dans certains cas, il s'avère utile d'utiliser une méthode semi-analytique (Hildebrand, 1962 ; Zoppou et Knight, 1994 ; Wang *et al.*, 1998). Le problème est d'abord résolu analytiquement dans les domaines des transformées de Fourier ou de Laplace et la transformée inverse est ensuite calculée numériquement.

L'application des méthodes analytiques et semi-analytiques nécessite une "idéalisation", peut être d'une façon irréaliste, de la géométrie, des propriétés physiques et des conditions aux limites du domaine d'étude. Or dans la plupart des cas réels, les avantages mathématiques d'avoir une solution analytique sont contrecarrés par les erreurs dues aux hypothèses simplificatrices relatives à l'environnement complexe du terrain et nécessaires à l'application des méthodes précitées. L'utilisation des méthodes analytiques est de ce fait limitée à des systèmes dont la géométrie est simple et aux milieux homogènes.

Pour les problèmes en hydrogéologie où les méthodes précédentes sont inadaptées, les EDP sont résolues numériquement. Dans ce cas, les variables physiques continues sont remplacées par des variables discrètes définies au niveau des mailles ou des nœuds. Ainsi l'équation différentielle continue qui détermine la charge hydraulique ou la concentration des solutés sur l'ensemble du système, est remplacée par un nombre déterminé d'équations algébriques définissant la charge hydraulique ou la concentration en des points spécifiques.

Les équations qui décrivent l'écoulement des eaux souterraines et le transport de masse sont des EDP du second ordre qui sont généralement classées selon la nature et l'importance de leurs coefficients. Nous distinguons trois types d'EDP de second ordre : parabolique, elliptique et hyperbolique (Peaceman, 1977) et chaque type d'équations possède ses propres propriétés mathématiques. Pour obtenir une solution stable et précise, les méthodes numériques les mieux adaptées pour la résolution de chaque type d'équations doivent être développées et étudiées séparément.

Deux groupes principaux de méthodes numériques sont communément utilisés pour résoudre les équations de l'hydrogéologie. Il s'agit de la méthode des différences finies/volumes finis et de la méthode des éléments finis. Nous distinguons ensuite pour chacune de ses méthodes un ensemble de sous-classes et de mises en œuvre alternatives. Des études détaillées traitant l'application des techniques classiques de résolution à des problèmes d'hydrogéologie sont présentées dans Remson *et al.* (1971) et Wang et Anderson (1982). Chaque approche a ses avantages et ses inconvénients. Les méthodes des différences finies/volumes finis sont conceptuellement et mathématiquement plus simples. Les méthodes des éléments finis nécessitent généralement un recours à des approches mathématiques plus sophistiquées, et peuvent être pour certains problèmes numériquement plus précises que les méthodes standard différences finies/volumes finis. L'avantage des éléments finis réside dans la flexibilité du maillage qui permet une approximation spatiale plus fine des limites irrégulières ainsi que des paramètres de l'aquifère.

Dans ce chapitre, nous présentons et étudions en détail les méthodes numériques que nous adoptons pour la résolution des équations de l'écoulement et du transport en milieux poreux saturés.

2.2 Résolution de l'écoulement en milieu poreux saturé

2.2.1 Généralités

Comme nous l'avons vu au chapitre 1, l'écoulement d'un traceur de l'eau en milieu poreux saturé est régi par les deux équations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll} s \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = Q_s & \text{sur } \Omega \times (0, T] \\ \mathbf{q} = -\mathbf{K} \nabla h & \text{sur } \Omega \times (0, T] \\ h = h_0 & \text{sur } \Omega \\ h = h_D & \text{sur } \Gamma^D \times (0, T] \\ \mathbf{q} = \mathbf{q}_N & \text{sur } \Gamma^N \times (0, T] \end{array} \right. \quad (2.1)$$

Ω est le domaine d'étude et T la durée des simulations. Des conditions aux limites de type Dirichlet sont imposées sur une partie de la frontière Γ^D . La deuxième partie de la frontière Γ^N correspond à des conditions aux limites de type Neumann avec un flux imposé. h_0 correspond à la distribution de la charge dans le domaine à $t=0$ (conditions initiales).

L'équation (2.1) est de type elliptique dans le cas d'un régime permanent ($s = 0$) ou parabolique dans le cas d'un régime transitoire ($s \neq 0$).

Un schéma numérique bien adapté à la résolution du problème de l'écoulement doit avoir les propriétés suivantes :

- conservation locale de la masse,
- garantie de la continuité des flux aux interfaces des différents éléments de la discrétisation,
- approximation précise du champ de vitesse en milieu fortement hétérogène,
- préservation de la positivité de la solution du schéma monotone,
- capacité à traiter des problèmes anisotropes,
- flexibilité dans la manipulation de domaines à géométrie complexe,
- traitement satisfaisant des différents types de conditions aux limites,
- résolution efficace du système obtenu.

Pour les problèmes purement paraboliques/elliptiques, les méthodes des volumes finis (VF) ainsi que celle des différences finies (DF) peuvent être utilisées. Les deux schémas possèdent un nombre d'inconnues égal au nombre de mailles, la charge hydraulique étant discrétisée spatialement par une fonction constante par morceau sur chaque maille du domaine. Le bilan de masse est exact au niveau de chaque élément du maillage. Les DF et les VF sont faciles à mettre en œuvre mais présentent toutes les deux des contraintes sur la discrétisation spatiale. En effet, la méthode des DF nécessite un maillage rectangulaire et n'est donc pas bien adaptée pour les domaines à géométrie complexe. Dans le cas d'un maillage triangulaire, la méthode des VF nécessite des triangles qui vérifient le critère de Delaunay. Ce critère est difficile à vérifier dans le cas des tétraèdres en 3-D. En plus, ces deux méthodes ne traitent pas d'une façon rigoureuse l'équation de l'écoulement quand la perméabilité \mathbf{K} est représentée par un tenseur plein discontinu en espace. Ceci est notamment le cas lorsque le milieu poreux est anisotrope avec des axes d'anisotropie ne coïncidant pas avec les axes de coordonnées.

Une manière de pallier à cette difficulté est d'utiliser la méthode des éléments finis (EF). La méthode des éléments finis de plus bas degré consiste à approcher la charge hydraulique par une fonction linéaire sur l'élément. La vitesse, constante sur chaque élément, est obtenue par différenciation de la charge hydraulique. Dans le cas d'un écoulement unidirectionnel, la méthode des EF est identique à celle des DF. Les EF permettent de traiter n'importe quel type de géométrie ainsi que de travailler avec des tenseurs de perméabilités pleins. Le principal inconvénient de cette méthode provient du fait que la composante normale de la vitesse n'est pas assurée d'être continue à travers une interface commune à deux

éléments du maillage. Ces discontinuités qui apparaissent même dans un milieu homogène, engendrent une source d'erreur au niveau du calcul des flux locaux et posent des problèmes pour tracer les lignes de courant ou lors de la simulation du transport de polluants. C'est pour éviter ce genre de soucis numériques qu'ont été développées des méthodes plus efficaces comme la méthode des éléments finis mixtes (EFM) (Chavent et Jaffré, 1986 ; Brezzi et Fortin, 1991).

Nous présentons brièvement dans ce qui suit les deux méthodes EFM et EFMH avant de donner la discrétisation typique du problème de l'écoulement avec la méthode des EFMH. La formulation reprend en partie les notations adoptées dans les articles de références de Thomas (1977) et de Chavent et Roberts (1991).

2.2.2 Éléments finis mixtes (EFM) et mixtes hybrides (EFMH)

Le principe de la méthode des EFM consiste à résoudre simultanément le couple solution formé de la variable d'état (la charge hydraulique) et de son gradient (la vitesse). Cette méthode est issue des recherches dans le domaine de la modélisation en mécanique des structures (Hermann, 1967). Dans le cas de la résolution de l'équation de l'écoulement, la méthode des EFM permet d'assurer un bilan de masse exact au niveau de chaque élément et aboutit à un champ de vitesse précis (même ordre de précision pour h et q). Les maillages non-structurés et les tenseurs de perméabilités pleins discontinus en espace sont aussi efficacement traités.

Plusieurs familles d'éléments mixtes sont proposées dans la littérature. Parmi les plus connues et les plus employées, nous citons celles de Raviart-Thomas RT (Thomas 1977 ; Raviart et Thomas, 1977), de Brezzi-Douglas-Marini BDM introduits dans Brezzi et Fortin (1991) ainsi que celles de Brezzi-Douglas-Fortin-Marini $BDMF$ (Crouzeix et Raviart, 1973 ; Douglas et Wang, 1993). Nous privilégions dans ce travail les méthodes de plus bas degré afin de minimiser le stockage et les temps de calcul CPU. C'est bien donc dans cette perspective que les éléments finis de Raviart-Thomas d'ordre zéro RT_0 seront adoptés dans la suite.

La charge h est discrétisée au moyen d'une fonction constante par maille et la vitesse q est approximée dans l'espace RT_0 . Du fait des propriétés de l'espace d'approximation, le problème se réduit à un système linéaire d'équations dont les inconnues sont les charges hydrauliques moyennes par maille et les flux à travers les arêtes (ou les facettes en 3-D). La matrice associée à ce système est symétrique mais non définie positive. La résolution d'un tel système est difficile avec les méthodes classiques (Brezzi et Fortin, 1991 ; Chavent et Roberts, 1991).

Afin de remédier à cet inconvénient, une formulation alternative a été proposée, il s'agit de la méthode des éléments finis mixtes hybrides (EFMH). Elle permet de transformer, après quelques manipulations algébriques, le système matriciel issu de la méthode des EFM en un système symétrique défini positif. Les inconnues dans ce cas sont des multiplicateurs de Lagrange qui correspondent à la charge hydraulique moyenne par arête (ou facette en 3-D). La matrice associée à ce système est cette fois-ci symétrique définie positive (Marini, 1985). Le système peut donc être résolu avec les méthodes classiques. C'est pour cela que la méthode des EFMH est préférable à celle des EFM.

Différentes études ont été menées afin de comparer les formulations mixtes EFM et EFMH aux méthodes numériques classiques DF, VF et EF. Dans le cas d'un milieu homogène, Mosé (1990) montre que le champ de vitesse obtenu par les méthodes mixtes est plus précis que celui obtenu avec les DF. Kaaschieter (1990) et Mosé *et al.* (1994) montrent que les méthodes issues de la formulation mixte sont plus robustes que celles issues des éléments finis classiques.

Nous présentons dans ce qui suit la discrétisation classique du problème d'écoulement en régime transitoire à l'aide des éléments finis mixtes hybrides (EFMH).

2.2.3 Discrétisation du problème d'écoulement à l'aide des EFMH

Le domaine Ω est discrétisé à l'aide d'un maillage Υ_h d'éléments E triangulaires ou quadrangulaires (h étant la longueur caractéristique du maillage). Sur un élément E possédant N_f arêtes, nous définissons l'arête Γ_j celle commune à l'élément E et son élément voisin E_j ($\Gamma_j = \partial E \cap \partial E_j$). L'espace de Raviart-Thomas de plus bas degré $RT_0(E)$ est généré par les fonctions de base ω_i^E , $i = 1, \dots, N_f$, telles que (Brezzi et Fortin, 1991 ; Chavent et Roberts, 1991) :

$$\int_{\Gamma_j} \omega_i^E \cdot \boldsymbol{\eta}_j = \delta_{ij}, \quad j = 1, \dots, N_f, \quad (2.2)$$

où $\boldsymbol{\eta}_j$ est la normale unitaire à l'arête Γ_j dirigée vers l'extérieur et δ_{ij} est le symbole de Kronecker. Ainsi les fonctions de base ω_i^E de l'espace $RT_0(E)$ sont telles que les flux de ω_i^E à travers les arêtes de E sont tous nuls sauf celui à travers l'arête Γ_i qui vaut un. Nous avons également, grâce à la formule de Green et à la définition (2.2), la propriété suivante qui sera utile dans la suite :

$$\int_E \nabla \cdot \boldsymbol{\omega}_i^E = \sum_{j=1}^{N_f} \int_{\Gamma_j} \boldsymbol{\omega}_i^E \cdot \boldsymbol{\eta}_j = 1, \quad i = 1, \dots, N_f. \quad (2.3)$$

Sur chaque élément E , la vitesse de Darcy \mathbf{q}_E est approximée dans l'espace $RT_0(E)$ comme une combinaison linéaire de ses flux \overline{Q}_i^E à travers chacune des arêtes de E :

$$\mathbf{q}_E = \sum_{i=1}^{N_f} \overline{Q}_i^E \boldsymbol{\omega}_i^E. \quad (2.4)$$

En utilisant la relation (2.3), nous pouvons écrire :

$$\int_E \nabla \cdot \mathbf{q}_E = \sum_{i=1}^{N_f} \overline{Q}_i^E. \quad (2.5)$$

L'expression des fonctions de base du plus bas ordre $\boldsymbol{\omega}_i^E$ étant complexes sur l'élément réel E , nous transférons le problème sur un élément de référence \hat{E} (figure 2.1 et figure 2.2). Les fonctions de base de l'espace $RT_0(\hat{E})$ ainsi que les formules qui permettent de passer de l'élément de référence à l'élément réel sont présentées dans l'annexe A.

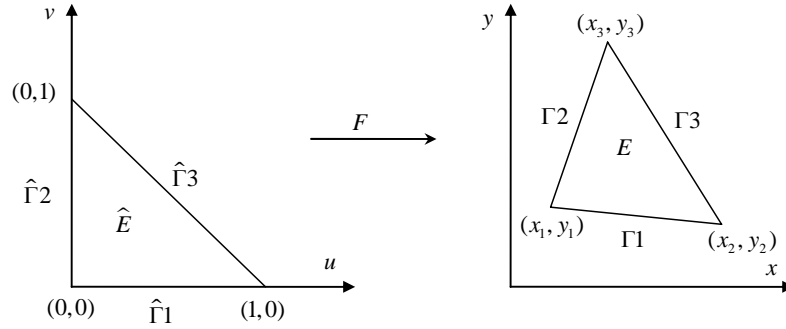


Figure 2.1 : Élément de référence et élément réel pour un maillage triangulaire.

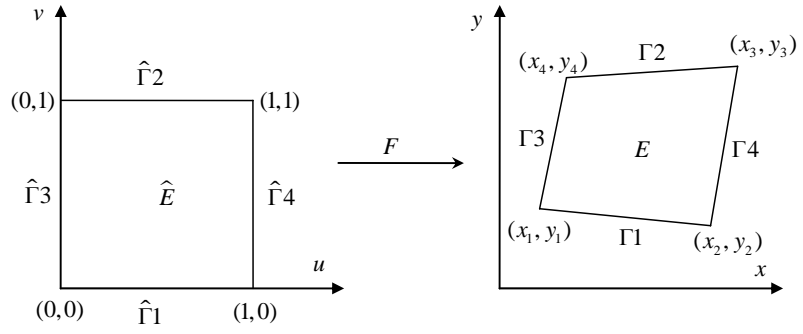


Figure 2.2 : Éléments de référence et élément réel pour un maillage quadrangulaire.

En inversant sur un élément E le tenseur \mathbf{K}_E des perméabilités, la loi de Darcy se réécrit sous la forme suivante :

$$\mathbf{K}_E^{-1} \mathbf{q}_E = -\nabla h. \quad (2.6)$$

Pour obtenir une formulation faible, nous multiplions (2.6) par chacune des fonctions de base ω_i^E et nous intégrons sur un élément E . En appliquant la formule de Green, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \int_E \mathbf{K}_E^{-1} \mathbf{q}_E \cdot \boldsymbol{\omega}_i^E &= - \int_E \nabla h \cdot \boldsymbol{\omega}_i^E \\ &= \int_E h \nabla \cdot \boldsymbol{\omega}_i^E - \sum_{j=1}^{N_f} \int_{\Gamma_j} th_j^E \boldsymbol{\omega}_i^E \cdot \boldsymbol{\eta}_j \\ &= h_E - th_i^E, \quad i = 1, \dots, N_f, \end{aligned} \quad (2.7)$$

où h_E est la charge hydraulique moyenne sur l'élément E et th_i^E la charge hydraulique moyenne sur l'arête Γ_i de l'élément E . En posant :

$$B_{ij}^E = \int_E \mathbf{K}_E^{-1} \boldsymbol{\omega}_j^E \cdot \boldsymbol{\omega}_i^E \quad \text{et} \quad \alpha_i^E = \sum_{j=1}^{N_f} (B_{ij}^E)^{-1}, \quad (2.8)$$

l'équation de Darcy discrétisée peut se réécrire sous la forme suivante :

$$\bar{Q}_i^E = \alpha_i^E h_E - \sum_{j=1}^{N_f} (B_{ij}^E)^{-1} th_j^E, \quad i = 1, \dots, N_f. \quad (2.9)$$

Nous en déduisons alors la relation suivante :

$$\sum_{i=1}^{N_f} \overline{Q}_i^E = \alpha_E h_E - \sum_{j=1}^{N_f} \alpha_j^E th_j^E, \quad (2.10)$$

avec $\alpha_E = \sum_{j=1}^{N_f} \alpha_j^E$.

La discrétisation de la première équation de (2.1) à l'aide d'un schéma volumes finis en espace et une discrétisation temporelle implicite donne :

$$s_E |E| \frac{h_E^{n+1} - h_E^n}{\Delta t} + \sum_{i=1}^{N_f} \left(\overline{Q}_i^E \right)^{n+1} = Q_s^E \quad (2.11)$$

où s_E est la valeur moyenne du coefficient d'emménagement s et $Q_s^E = \int_E Q_s$.

En combinant l'équation (2.10) à l'équation (2.11), nous pouvons écrire :

$$h_E^{n+1} = \sum_{j=1}^{N_f} \delta_j^E \left(th_j^E \right)^{n+1} + F_E, \quad (2.12)$$

avec :

$$\delta_j^E = \frac{\Delta t}{\alpha_E \Delta t + s_E |E|} \alpha_j^E \quad \text{et} \quad F_E = \frac{|E| s_E h_E^n + Q_s^E \Delta t}{|E| s_E + \alpha_E \Delta t}.$$

Les inconnues sont les charges moyennes h_E , les flux \overline{Q}_i^E et les traces de charges sur les arêtes th_i^E . Le système linéaire mixte hybride, dont les seules inconnues sont les traces de charges th_i^E , est obtenu en exprimant les h_E et les \overline{Q}_i^E en fonction des th_i^E . Il faudra aussi imposer la continuité des flux et de la charge à l'interface entre deux éléments E et E' du maillage. Soient alors E et E' deux éléments adjacents, la continuité de la charge se traduit par :

$$th_i^E = th_j^{E'}, \quad (2.13)$$

Tandis que la continuité du flux se traduit par :

$$\overline{Q}_i^E + \overline{Q}_j^{E'} = 0. \quad (2.14)$$

Les conditions de Neumann (flux q_N imposé sur une arête) s'intègrent aisément en modifiant l'équation (2.14) comme suit :

$$\overline{Q}_i^E + q_N = 0. \quad (2.15)$$

De même les conditions de Dirichlet (charge h_D imposée sur une arête) sont prises en compte en modifiant (2.13) comme suit :

$$th_i^E = h_D. \quad (2.16)$$

La continuité des flux (2.14) se transforme, grâce à (2.9) en :

$$\alpha_i^E h_E^{n+1} - \sum_{k=1}^{N_f} (B_{ik}^E)^{-1} (th_k^E)^{n+1} + \alpha_j^{E'} h_{E'}^{n+1} - \sum_{k=1}^{N_f} (B_{jk}^{E'})^{-1} (th_k^{E'})^{n+1} = 0. \quad (2.17)$$

L'expression de h_E^{n+1} donnée par (2.12) est maintenant injectée dans (2.17) pour obtenir :

$$\begin{aligned} \alpha_i^E \left(\sum_{k=1}^{N_f} \delta_k^E (th_k^E)^{n+1} + F_E \right) - \sum_{k=1}^{N_f} (B_{ik}^E)^{-1} (th_k^E)^{n+1} \\ + \alpha_j^{E'} \left(\sum_{k=1}^{N_f} \delta_k^{E'} (th_k^{E'})^{n+1} + F_{E'} \right) - \sum_{j=1}^{N_f} (B_{jk}^{E'})^{-1} (th_k^{E'})^{n+1} = 0. \end{aligned} \quad (2.18)$$

En réordonnant, le système final se réécrit :

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{N_f} (\alpha_i^E \delta_k^E - (B_{ik}^E)^{-1}) (th_k^E)^{n+1} + \sum_{k=1}^{N_f} (\alpha_j^{E'} \delta_k^{E'} - (B_{jk}^{E'})^{-1}) (th_k^{E'})^{n+1} \\ = -\alpha_i^E F_E - \alpha_j^{E'} F_{E'}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

La matrice associée à ce système est symétrique définie positive (Chavent et Roberts, 1991). Sa résolution peut donc être effectuée avec la méthode des gradients conjugués.

Dans le cas de la prise en compte d'un contraste de densité, l'équation de continuité ainsi que la loi de Darcy sont modifiées ainsi que la formulation discrète de ces équations. Nous étudierons ce point plus en détail au chapitre 4.

2.3 Résolution numérique de l'équation de transport

2.3.1 La méthode de séparation d'opérateurs

En l'absence du terme puits/source et dans le cas du transport d'un traceur, l'équation de convection-dispersion s'écrit :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{V}C) + \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla C) \quad (2.20)$$

Le caractère mixte de l'équation de transport avec une dérivée première exprimant la convection et une dérivée seconde exprimant la diffusion/dispersion rend la résolution numérique de cette équation plus difficile que celle de l'hydrodynamique souterraine étudiée dans la section précédente.

En effet, les propriétés mathématiques de l'équation (2.20) varient en fonction du terme dominant dans l'équation pour une situation particulière. Quand le transport de soluté est dû à un transport par convection, l'équation (2.20) se rapproche d'une équation de type hyperbolique. En revanche si le système est dominé par des flux dispersifs (zones où les vitesses du fluide sont relativement faibles et les dispersions dans l'aquifère relativement élevées) alors l'équation (2.20) se rapproche d'une équation du type parabolique (comme pour l'équation de l'hydrodynamique souterraine en régime transitoire (2.1)).

Les méthodes numériques les mieux adaptées pour la résolution des équations de type parabolique ne sont pas nécessairement celles qui marchent le mieux pour résoudre les équations de type hyperbolique et inversement. Ainsi, il n'existe pas de méthode numérique unique et idéale pour l'ensemble des problèmes de transport souterrain susceptibles d'être rencontrés dans la pratique. Cette difficulté est accrue par le fait que sur le terrain, la vitesse d'écoulement des eaux souterraines varie fortement, même si les propriétés de l'aquifère sont relativement homogènes (du fait de l'influence des conditions aux limites complexes). Ainsi, dans les zones de faibles perméabilités ou à proximité de points d'eau stagnante, la vitesse peut être proche de zéro et le transport sera dominé par des processus de dispersion ; dans les zones de fortes perméabilités ou à proximité de points influencés (comme les ouvrages de captage), la vitesse peut atteindre des valeurs importantes (de l'ordre de plusieurs mètres par jour) et le transport est alors dominé par la convection. En d'autres termes, pour un même système, l'équation de base peut être de type hyperbolique dans une zone donnée (à un moment donné) et de type parabolique dans une autre partie du domaine (à un autre moment). Par conséquent quelque

soit la méthode numérique utilisée, elle ne sera pas optimale sur l'ensemble du domaine considéré, et il se peut que des erreurs numériques importantes soient introduites quelque part dans la solution.

Comme aucune des méthodes numériques standards n'est idéale pour l'éventail très large des problèmes de transport, beaucoup de recherches s'intéressent au développement de méthodes combinées dont le but est de minimiser les erreurs numériques et d'allier au mieux les meilleures caractéristiques des approches alternatives courantes : il s'agit de la méthode de séparation d'opérateurs (Dawson et Wheeler, 1992 ; Karlsen et Risebro, 1997 ; Dawson et Aizinger, 1988; Evje et Karlsen, 1999 ; Hundsdorfer et Verwer, 2003). L'objectif est de séparer l'équation (2.20) en deux sous-équations qui seront traitées séquentiellement, chacune de façon spécifique. Dans ce cas, les processus physiques mis en jeu, à savoir la convection et la diffusion/dispersion, sont résolus séparément voir successivement. En terme numérique le principal intérêt de cette technique est de pouvoir choisir la méthode numérique la mieux adaptée à chacun des deux opérateurs physiques qui constituent l'équation de transport, ceci apporte également un grand avantage en terme de modularité des codes informatiques résultants (Sportisse, 2000).

Nous nous contentons dans cette étude d'une séparation à l'ordre un car les résultats obtenus avec des techniques de séparation d'opérateurs d'ordre supérieur ne sont pas convaincants (Sboui, 2007). Dans un premier temps, seule la partie convective est résolue et dans un second temps, la partie dispersive est résolue en se servant comme condition initiale de la concentration déjà obtenue par convection. La concentration calculée à la fin de cette deuxième étape représente alors la solution numérique recherchée. Cette approche peut donc créer une erreur due à la séparation des deux phénomènes physiques (Karlsen *et al.*, 2001). La minimisation de cette erreur est cependant rendue possible en fonction du pas de temps de la discrétisation (Descombes, 2001).

2.3.2 Formulation mathématique de la méthode de séparation d'opérateurs

La formulation mathématique de la technique de séparation d'opérateurs peut être décrite comme suit (Kirby, 2000) :

Soit $\varepsilon_A^{\Delta t}$ un opérateur qui permet de résoudre le problème de convection pure suivant :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (VC) = 0 \quad (2.21)$$

Si C^n est la valeur de la concentration au temps t^n , alors la concentration obtenue uniquement par convection au temps $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ est :

$$C^{n+1} = \varepsilon_A^{\Delta t}(C^n) \quad (2.22)$$

De la même façon, soit $\varepsilon_D^{\Delta t}$ un opérateur qui permet de résoudre le problème de dispersion pure suivant :

$$\frac{\partial C}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla C) = 0 \quad (2.23)$$

La concentration au temps t^{n+1} obtenue uniquement par dispersion est :

$$C^{n+1} = \varepsilon_D^{\Delta t}(C^n) \quad (2.24)$$

La technique de séparation d'opérateurs peut donc être décrite par :

$$C^{n+1} = \varepsilon_D^{\Delta t} \circ \varepsilon_A^{\Delta t}(C^n) \quad (2.25)$$

Les problèmes (2.21) et (2.23) admettent chacun une solution (qui peut être éventuellement faible). Soit C^{n+1} la solution numérique obtenue par (2.25) et C_{ex}^{n+1} la solution exacte du problème (2.20), Karlsen *et al.* (2001) montrent que C^{n+1} tend vers C_{ex}^{n+1} lorsque le pas de temps Δt tend vers zéro. Dans la pratique, les opérateurs $\varepsilon_A^{\Delta t}$ et $\varepsilon_D^{\Delta t}$ sont remplacés par des opérateurs discrets, à savoir les schémas numériques que nous utilisons.

Les méthodes numériques utilisées pour résoudre la partie convective sont généralement explicites en temps alors que celles utilisées pour résoudre la partie dispersive sont implicites. Ackerer *et al.* (1999) et Mazzia et Putti (2000) entre autres, proposent dans ce cas d'adopter un pas de temps différent par opérateur et définissent Δt_A et Δt_D les pas de temps respectifs de ε_A et ε_D . Contrairement aux schémas explicites, les schémas implicites sont inconditionnellement stables et Δt_D est généralement choisi supérieur à Δt_A . Un entier $M \geq 1$ peut alors être choisi de sorte que $\Delta t_D = M \Delta t_A$. Dans ce cas plusieurs opérations numériques de ε_A sont effectuées pour une opération de ε_D pendant un pas de temps Δt_D .

La technique de séparation d'opérateurs peut donc être reformulée comme suit :

Soit $\varepsilon_A^{\Delta t_A}(C)$ l'opérateur représentant la méthode numérique qui permet de résoudre l'équation hyperbolique de convection avec un pas de temps Δt_A . La concentration calculée au temps $t^{n+i/M} = t^n + i\Delta t_A$ ($i=1, \dots, M$) est :

$$C^{n+i/M} = \varepsilon_A^{\Delta t_A} \left(C^{n+(i-1)/M} \right) \quad (2.26)$$

Au temps $t^{n+1} = t^n + \Delta t_D$, la concentration C^{n+1} calculée par le schéma de convection pure s'exprime par la forme récursive suivante :

$$\begin{aligned} C^{n+1} &= \varepsilon_A^{\Delta t_A} \left(C^{n+(M-1)/M} \right) = \varepsilon_A^{\Delta t_A} \circ \varepsilon_A^{\Delta t_A} \left(C^{n+(M-2)/M} \right) \\ &= \underbrace{\varepsilon_A^{\Delta t_A} \circ \dots \circ \varepsilon_A^{\Delta t_A}}_{M \text{ fois}} \left(C^n \right) = \left(\varepsilon_A^{\Delta t_A} \right)^M \left(C^n \right) \end{aligned} \quad (2.27)$$

De la même façon, soit $\varepsilon_D^{\Delta t_D}(C)$ l'opérateur représentant la méthode numérique qui permet de résoudre l'équation purement parabolique de dispersion avec un pas de temps Δt_D . La concentration au temps t^{n+1} s'écrit :

$$C^{n+1} = \varepsilon_D^{\Delta t_D} \left(\left(\varepsilon_A^{\Delta t_A} \right)^M \left(C^n \right) \right) \quad (2.28)$$

Cette nouvelle formulation conduit à des gains en temps de calcul puisque les opérations de diffusion-dispersion sont généralement plus coûteuses que celles de la convection : elles impliquent la résolution d'un système linéaire de grande taille.

Plusieurs combinaisons de schémas numériques sont envisageables pour les opérateurs ε_A et ε_D . Les sections qui suivent passent en revue les différentes techniques qui existent pour chaque type de problème et présentent plus en détail celles qui sont retenues.

2.3.3 Combinaison des méthodes numériques

Considérons tout d'abord le terme dispersif. L'équation de diffusion/dispersion (2.23) peut être réécrite sous la forme mixte suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_D = 0 \\ \mathbf{q}_D = -\mathbf{D} \nabla C \end{cases} \quad (2.29)$$

La résolution numérique de cette équation est identique à celle utilisée pour le système (2.1) décrivant l'écoulement en milieu poreux saturé. Les méthodes des éléments finis (EF) et des éléments finis mixtes (EFM) ont été employées par Dawson (1991, 1993). Pour assurer la continuité de la composante normale du flux dispersif à travers les différentes interfaces et pour préserver le bilan de masse dans chaque élément, nous utilisons la méthode des EFMH pour résoudre l'équation (2.29). La formulation mathématique est détaillée dans l'annexe B (Siegel *et al.* 1997 ; Ackerer *et al.*, 1999).

La résolution numérique du terme convectif est un peu plus délicate. En effet, les équations de type hyperbolique sont caractérisées par des solutions comportant des discontinuités ou des fronts raides même si la condition initiale est régulière (Lax et Wendroff, 1960 ; Crandall et Majda, 1980). Afin de prendre en compte ces zones à forts gradients, plusieurs schémas numériques stables et efficaces ont été développés.

Les méthodes Lagrangiennes par exemple (Prickett *et al.*, 1981 ; O'Neill, 1981 ; Mas-Gallic, 1987 ; Sun, 1999) ne requièrent aucun maillage. La technique la plus fréquemment utilisée pour résoudre la convection est la méthode standard de suivi de particules. Le principe consiste à représenter le nuage de polluants par un grand nombre de particules discrètes. Ces particules se déplacent selon le champ de vitesse local et sont donc soumises à un déplacement déterministe dû à la convection. Cette méthode est exempte de toute diffusion numérique (contrairement aux méthodes Eulériennes). Mais son inconvénient majeur est le nombre important de particules à utiliser surtout en milieu tridimensionnel ce qui implique un temps de calcul très important. La dispersion peut être également prise en compte (Kinzelbach, 1988) en introduisant dans le modèle la notion de marche aléatoire (ou méthode de marche au hasard). Cependant les solutions obtenues dans ce cas comportent des fluctuations non-négligeables dues aux déplacements aléatoires des particules. Ces fluctuations empêchent tout couplage du modèle avec d'autres processus tels que la chimie ou le contraste de masse volumique.

Une autre alternative consiste à utiliser des méthodes Eulériennes. La discrétisation de l'équation hyperbolique se fait dans ce cas en utilisant un maillage fixe. Les dérivées spatiales sont approchées en utilisant les variables définies dans les mailles ou sur les nœuds voisins. Les méthodes Eulériennes standards (DF, VF et EF) ne sont pas adaptées à la résolution des équations hyperboliques (2.21). Elles génèrent souvent des oscillations non physiques et de la diffusion numérique.

Pour pallier à ce problème, des schémas d'ordre supérieur plus précis dans la discrétisation du front ont été établis (Harten, 1983 ; Osher, 1985).

Ces schémas utilisent une approximation polynomiale discontinue de la solution. En effet, la solution est approchée par un polynôme d'ordre k sur chaque élément du maillage mais n'est pas nécessairement continue à l'interface de deux mailles voisines. Il s'agit alors en quelque sorte d'une approche continue par morceaux. L'équation de convection (ou de conservation) est ensuite intégrée sur chaque maille, ce qui fait apparaître des flux aux interfaces. Ces flux numériques aux points de discontinuité sont approchés numériquement en résolvant un problème de Riemann (Alcurdo et Garcia-Navarro, 1993) et peuvent revêtir plusieurs formes. Pour les problèmes de convection linéaire c'est souvent un simple décentrage amont qui est utilisé. Nous parlons alors de schémas Eulériens amont. Lorsque les polynômes utilisés localement ne sont pas constants ($k \geq 1$), une étape de limitation de pente (ou de flux) est nécessaire pour stabiliser la solution qui présente des oscillations dans les zones de choc, en diminuant ses gradients sur chaque maille (Sweby, 1984 ; Osher et Chakravarthy, 1984). Le but de cette étape est donc de forcer la solution à respecter certains critères (dits entropiques) de manière à converger vers la solution physique. Cependant cette étape nécessaire introduit toujours de la diffusion numérique (Peyret et Taylor, 1983) qui vient dégrader la précision de la solution dans les zones à forts gradients (zones de chocs). L'objectif est donc de réduire au maximum cette diffusion numérique.

La méthode des éléments finis discontinus de Galerkin (EFD) est une méthode Eulérienne d'ordre supérieur qui combine astucieusement les avantages des éléments finis (EF) et des volumes finis (VF) (Cockburn et Shu, 1998). La différence principale avec les éléments finis classiques (EF) réside dans le fait que nous n'imposons plus à la solution numérique d'être continue à travers les interfaces entre différents éléments du maillage.

Cette méthode a été introduite par Reed et Hill (1973) pour résoudre l'équation de transport des neutrons. Lesaint et Raviart (1974) montrent que si la solution est suffisamment régulière et si les polynômes utilisés sont de degré k , l'ordre de la méthode est $k+1$ (autrement dit est un $O(h^{k+1})$ où h est le pas de discrétisation spatiale). Chavent et Salzano (1982) utilisent les EFD pour la résolution du transport en milieu poreux et proposent un schéma d'Euler (du premier ordre) explicite en temps utilisant des fonctions affines par morceaux. Chavent et Cockburn (1989) stabilisent le schéma pour des $CFL \leq 0.5$ en rajoutant une étape de limitation de pente de type Van Leer (1977). Le schéma obtenu possède en plus la propriété TVD (Total Variation Diminishing), propriété clé pour capturer des solutions entropiques (Toro, 1997). Les schémas TVD sont bien adaptés pour les problèmes hyperboliques, mais Goodman et Leveque (1985) montrent que tout schéma TVD ne peut qu'être au plus d'ordre un en espace. Cockburn et Shu (1991) introduisent une discrétisation temporelle d'ordre deux (schéma de Runge-Kutta). Cependant, la combinaison

des schémas de Runge-Kutta d'ordre $k+1$ avec une procédure de limitation de pente appliquée sur des polynômes de degré k donne des schémas qui ne sont plus TVD. Les limiteurs ne parviennent plus à supprimer totalement les oscillations dans les zones à fort gradient mais possèdent néanmoins le caractère plus faible de TVB (Total Variation Bounded). En d'autres termes, la solution numérique peut éventuellement toujours présenter des oscillations mais celles-ci sont contrôlées du fait qu'elles sont bornées. Siegel *et al.* (1997) montrent la supériorité des EFD par rapport à la méthode des VF d'ordre supérieur dans le cas d'un maillage fortement déstructuré. Il est également démontré dans Lin et Zhou (1993) que, même en présence de fortes discontinuités dans la solution exacte, la méthode des éléments finis discontinus de Galerkin converge.

Comme les EFD et les EFMH recherchent des solutions dans les mêmes espaces d'approximation, et comme ils possèdent des propriétés de conservation similaire, leur combinaison à l'aide d'une méthode de séparation d'opérateurs produit un schéma localement conservatif qui permet de résoudre efficacement les équations de transport par convection-dispersion (Siegel *et al.*, 1997 ; Ackerer *et al.*, 1999 ; Kirby, 2000). Chavent et Jaffré (1986) proposent pour la première fois l'idée pour résoudre l'équation de saturation des écoulements diphasiques. La partie convective est résolue à l'aide des EFD alors que les phénomènes diffusifs due à la pression capillaire sont résolus par les EFMH. Dawson et Aizinger (1998) proposent une combinaison des EFD avec différents espaces d'approximation pour les EFM montrant l'efficacité et la convergence des schémas obtenus. Siegel *et al.* (1997) montrent la stabilité des schémas EFD-EFMH pour des maillages triangulaires fortement déstructurés quelque soit la valeur du nombre de Péclet.

Nous détaillons dans la section suivante la formulation mathématique de la méthode des EFD retenue pour résoudre l'équation hyperbolique (2.21)

2.4 Résolution numérique de l'équation hyperbolique de conservation par les EFD

La méthode des EFD présente deux étapes de calcul indépendantes. La première étape fournit une prédiction de la solution numérique obtenue en utilisant des polynômes discontinus par morceaux incluant une évaluation des flux numériques sur les arêtes de la discrétisation (ou facettes en 3-D). La seconde étape consiste en une limitation de pente afin de stabiliser la solution numérique. La présentation qui suit concerne les maillages 2-D (triangulaires et quadrangulaires) et nécessite l'introduction de quelques notations inspirées des travaux de Chavent et Salzano (1982) et Cockburn (2003).

2.4.1 Formulation variationnelle

La méthode des éléments finis discontinus (EFD) est différente de la méthode des éléments finis classique (EF) par rapport au choix de l'espace d'approximation de la solution. En effet, la concentration est approchée dans un espace V_h formé des fonctions discontinues par morceaux :

$$V_h = \left\{ v \in L^\infty(\Omega) : v_h|_E \in V(E), \forall E \in \Upsilon_h \right\},$$

où $V(E)$ est l'ensemble des fonctions d'approximation de la solution sur un élément E du maillage Υ_h .

Soit N_E la dimension de l'espace $V(E)$ et soit $\{\phi_i^E\}$, $i=1, \dots, N_E$ une base de $V(E)$. La solution recherchée $C_h(\mathbf{x}, t)$ s'exprime donc sur chaque maille sous la forme d'une pondération des fonctions ϕ_i^E comme suit :

$$C_h(\mathbf{x}, t)|_E = \sum_{i=1}^{N_E} C_i^E(t) \phi_i^E(\mathbf{x}) \quad (2.30)$$

où $C_i^E(t)$, ($i=1, \dots, N_E$) représentent les inconnues du problème ou les degrés de liberté. Pour déterminer la solution numérique de (2.21), il suffit alors de trouver l'ensemble des inconnues $C_i^E(t)$.

La formulation variationnelle du problème est obtenue en multipliant l'équation (2.21) par chacune des fonctions de base ϕ_i^E et en intégrant sur chaque maille E . L'intégration par parties donne :

$$\sum_{j=1}^{N_E} \frac{dC_j^E}{dt} \int_E \phi_j^E \phi_i^E - \sum_{j=1}^{N_E} \int_E C_j^E \phi_j^E \mathbf{V} \cdot \nabla \phi_i^E + \int_{\partial E} C^* \phi_i^E \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\eta}_{\partial E} = 0 \quad (2.31)$$

Le troisième terme $\int_{\partial E} C^* \phi_i^E \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\eta}_{\partial E}$ correspond à la somme des intégrales de bord le long de toutes les arêtes de l'élément E . La vitesse, définie par $\mathbf{V} = \frac{\mathbf{q}}{\phi_c}$, est approximée dans l'espace de Raviart-Thomas du plus bas degré $RT_0(E)$ sur chaque élément E par :

$$\mathbf{V}_E = \sum_{i=1}^{N_f} Q_i^E \boldsymbol{\omega}_i^E \quad (2.32)$$

$$\text{avec } Q_i^E = \frac{\overline{Q}_i^E}{\phi_c} \quad (i=1, \dots, N_f).$$

Cette formulation du champ de vecteur vitesse satisfait la relation suivante :

$$\int_{\Gamma_j} \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\eta}_j = |\Gamma_j| \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\eta}_j = Q_j^E \quad (2.33)$$

Nous obtenons alors :

$$\int_{\partial E} C^* \phi_i^E \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\eta}_{\partial E} = \sum_{j=1}^{N_f} \int_{\Gamma_j} C_{\Gamma_j}^* \phi_i^E \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\eta}_j = \sum_{j=1}^{N_f} \frac{Q_j^E}{|\Gamma_j|} \int_{\Gamma_j} C_{\Gamma_j}^* \phi_i^E \quad (2.34)$$

où $|\Gamma_j|$ est la longueur de l'arête Γ_j , $C_{\Gamma_j}^*$ est la concentration définie sur l'arête Γ_j déterminée en résolvant un problème de Riemann local (Toro, 1997). Les schémas amonts étant les mieux adaptés aux équations hyperboliques linéaires (Godunov, 1959), nous définissons $C_{\Gamma_j}^*$ par :

$$C_{\Gamma_j}^* = \lambda_j^E C_h(\Gamma_j, t)|_E + (1 - \lambda_j^E) C_h(\Gamma_j, t)|_{E_j} \quad (2.35)$$

Sur chaque facette Γ_j , λ_j^E est définie par :

$$\lambda_j^E = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\eta}_j \geq 0 \\ 0 & \text{si } \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\eta}_j < 0 \end{cases} \quad (2.36)$$

Considérons finalement un élément E et ses N_f éléments voisins El , le système (2.31) peut être réécrit suivant la formulation matricielle suivante :

$$[\mathbf{A}] \frac{d}{dt} C_E = [\mathbf{B}] C_E - [\mathbf{M}^0] C_E - \sum_{l=1}^{N_f} [\mathbf{M}^l] C_{El} \quad (2.37)$$

où C_E et C_{El} ($l=1, \dots, N_f$) sont des matrices colonnes de dimension N_E contenant les degrés de liberté de l'élément E et de ses voisins El . Les matrices $[\mathbf{A}]$, $[\mathbf{B}]$, $[\mathbf{M}^0]$ et $[\mathbf{M}^l]$ sont carrées de dimension $N_E \times N_E$ définies par :

$$\begin{aligned}
 A_{i,j} &= \int_E \phi_j^E \phi_i^E & B_{i,j} &= \int_E \phi_j^E \mathbf{V} \cdot \nabla \phi_i^E \\
 M_{i,j}^0 &= \sum_{l=1}^{N_f} \lambda_{\Gamma l}^E \frac{Q_{\Gamma l}^E}{|\Gamma l|} \int_{\Gamma l} \phi_i^E \phi_j^E \\
 M_{i,j}^l &= (1 - \lambda_{\Gamma l}^E) \frac{Q_{\Gamma l}^E}{|\Gamma l|} \int_{\Gamma l} \phi_i^E \phi_j^{El}.
 \end{aligned}$$

Les techniques de calcul des différentes intégrales de surface $A_{i,j}$ et $B_{i,j}$ ainsi que des intégrales de contour $M_{i,j}^0$ et $M_{i,j}^l$ sont détaillées en Annexe A.

2.4.2 Discrétisation temporelle

Pour la discrétisation temporelle (dérivée en temps) de l'équation (2.37), nous nous contentons dans ce chapitre des schémas explicites classiques d'ordre un (schéma d'Euler). Des schémas explicites d'ordre supérieur existent et ont été combinés avec la méthode des EFD pour résoudre l'équation hyperbolique (Cockburn et Shu, 1991 ; Gowda et Jaffré, 1993 ; Siegel *et al.*, 1997).

La discrétisation du système (2.37) avec un schéma d'Euler explicite en temps donne :

$$\begin{aligned}
 \tilde{C}_E^{n+1} &= \left(\mathbf{I} + \Delta t [\mathbf{A}]^{-1} [\mathbf{B}] \right) C_E^n - \Delta t [\mathbf{A}]^{-1} [\mathbf{M}^0] C_E^n \\
 &\quad - \Delta t \sum_{l=1}^{N_f} [\mathbf{A}]^{-1} [\mathbf{M}^l] C_{El}^n
 \end{aligned} \tag{2.38}$$

où \tilde{C}_E^{n+1} est le vecteur des degrés de liberté de l'élément E au temps $n+1$ et C_{El}^n ($l=1, \dots, N_f$) les vecteurs des degrés de liberté des éléments voisins El de E au temps n . Le symbole tilde ($\tilde{}$) est utilisé pour identifier les concentrations inconnues obtenues avant l'étape de limitation de pente.

L'intervalle de temps $[0, T]$ est discrétisé en sous-intervalles de temps de même longueur Δt . Pour les schémas explicites, la valeur du pas de temps Δt ne peut pas être choisie au hasard (contrairement aux schémas implicites qui seront étudiés en détail ultérieurement). En effet la stabilité de la solution exige un strict respect du critère CFL. Le nombre CFL est défini sur chaque maille E pour les problèmes multidimensionnels par Putti *et al.* (1990) :

$$(CFL)_E = \frac{\sum_{j=1}^{N_f} |Q_j^E|}{2|E|} \Delta t \quad (2.39)$$

Pour les schémas d'ordre un en temps, la solution est stable si $CFL \leq 0.5$. La discrétisation explicite classique impose le choix d'un pas de temps unique Δt_A pour l'ensemble des mailles du domaine. Ce pas de temps global est limité par une valeur critique Δt_c définie par :

$$\Delta t_A \leq \Delta t_c = \min_E \left(\frac{|E|}{\sum_{j=1}^{N_f} |Q_j^E|} \right) \quad (2.40)$$

Ce critère de stabilité global peut s'avérer très contraignant dans certains cas pratiques. En présence d'un maillage localement raffiné, un champ de perméabilité hétérogène ou encore dans le cas de puits d'injection et/ou de pompage, la taille des différents éléments du maillage ainsi que l'intensité du champ de vitesse peuvent varier de plusieurs ordres de grandeur dans l'ensemble du domaine physique. Il est alors évident que la restriction (2.40) peut conduire à un pas de temps global Δt_A petit, voire très petit, ce qui va augmenter significativement les temps de calcul CPU. Ce point fait l'objet du chapitre suivant où des discrétisations temporelles alternatives sont proposées et étudiées en détail.

La section suivante traite des différents choix possibles pour les espaces d'approximation spatiale.

2.4.3 Espaces d'approximation

La méthode des éléments finis discontinus de Galerkin est basée sur une approximation polynomiale par morceaux de la solution en fonction des degrés de liberté et des fonctions de base de l'espace d'approximation.

Une approche classique généralement utilisée en éléments finis, consiste à utiliser les concentrations inconnues aux nœuds (figure 2.3a) comme degrés de liberté (Chavent et Jaffré, 1986 ; Siegel *et al.*, 1997 ; Ackerer *et al.*, 1999). Cockburn et Shu (1998) et Guillot *et al.* (2002) entre autres, proposent une approche différente et plus astucieuse, basée sur la valeur moyenne par maille de la concentration inconnue et de ses gradients dans les différentes directions de l'espace (figure 2.3b).

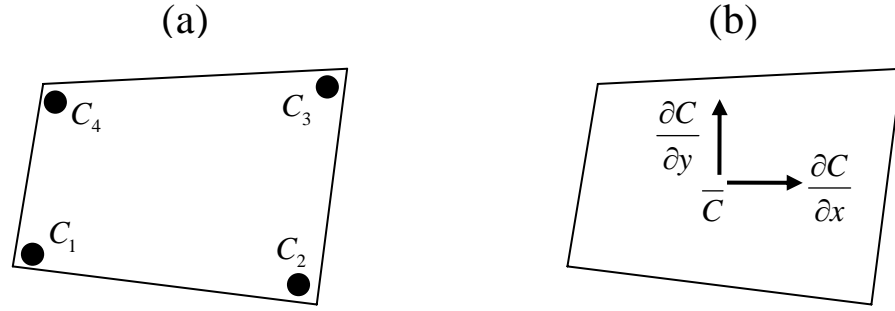


Figure 2.3 : Différents espaces d'approximation dans le cas des EFD.

Pour la première approche, le nombre d'inconnues par maille ainsi que l'expression mathématique des fonctions d'approximation dépendent du type de maillage adopté. Par exemple pour des maillages en 2-D, les fonctions de base sont différentes pour les quadrangles et les triangles. Sur l'élément de référence \hat{E} (figure 2.2), elles s'expriment pour les quadrangles par :

$$\begin{aligned}\phi_1^{\hat{E}}(u, v) &= 1 - u - v + uv, & \phi_2^{\hat{E}}(u, v) &= u - uv, \\ \phi_3^{\hat{E}}(u, v) &= uv, & \phi_4^{\hat{E}}(u, v) &= v - uv,\end{aligned}\quad (2.41)$$

et pour les triangles (figure 2.1) par :

$$\begin{aligned}\phi_1^{\hat{E}}(u, v) &= 1 - u - v, & \phi_2^{\hat{E}}(u, v) &= u, \\ \phi_3^{\hat{E}}(u, v) &= v.\end{aligned}\quad (2.42)$$

L'expression de ces fonctions de base dans l'élément réel E est expliquée dans l'annexe A.

Dans le cas de la seconde approche, les degrés de liberté ainsi que les fonctions de base ϕ_i^E ne dépendent plus de la géométrie de la maille mais de la dimension de l'espace \mathbb{R}^d ($d=2$ ou 3). Pour des maillages en 2-D, elles sont identiques pour les quadrangles et les triangles et s'expriment sur l'élément réel E par :

$$\begin{aligned}
 C_1^E(t) &= \overline{C_h^E}, & \phi_1^E(x, y) &= 1 \\
 C_2^E(t) &= \frac{\partial C_h^E}{\partial x}, & \phi_2^E(x, y) &= x - x_E, \\
 C_3^E(t) &= \frac{\partial C_h^E}{\partial y}, & \phi_3^E(x, y) &= y - y_E.
 \end{aligned} \tag{2.43}$$

où x_E et y_E sont les coordonnées du centre de gravité de l'élément E , $\overline{C_h^E}$ la moyenne de la concentration discrétisée $C_h(\mathbf{x}, t)$ sur l'élément E et $\frac{\partial C_h^E}{\partial x}$, $\frac{\partial C_h^E}{\partial y}$ ses dérivées premières par rapport à chacune des directions de l'espace.

Sur un élément E particulier, la concentration $C_h(\mathbf{x}, t)$ s'écrit :

$$C_h(\mathbf{x}, t)|_E = \overline{C_h^E} + (x - x_E) \frac{\partial C_h^E}{\partial x} + (y - y_E) \frac{\partial C_h^E}{\partial y} \tag{2.44}$$

Dans le cas des triangles, la solution est cherchée dans l'espace P_1 (ensemble des polynômes linéaires) pour les deux approches. Nous avons également le même nombre de degrés de liberté. Pour les quadrangles, l'approche classique (2.41) recherche des solutions dans l'espace des polynômes bilinéaires Q_1 , tandis que pour la seconde approche la solution se trouve localement dans l'espace des polynômes linéaires P_1 . Le nombre d'inconnues utilisées par la seconde approche est inférieure (une en moins) et le système (2.38) est un système 3×3 . Sa résolution est plus facile que celle du système 4×4 obtenu dans le cadre de l'approche classique. En 3-D et dans le cas des hexaèdres (Guillot *et al.*, 2002), la seconde approche est beaucoup plus avantageuse car elle ne consomme que 4 inconnues par maille (au lieu de 8 pour l'approche classique).

Aucune étude comparative entre les deux espaces d'approximation n'est présentée dans la littérature. Dans ce chapitre, nous explorons plus en détail les fonctions (2.43) en les :

- comparant avec ceux de l'espace Q_1 pour des maillages quadrangulaires structurés et non structurés,
- appliquant à des maillages triangulaires non structurés.

Avant de traiter ces deux points cités, une étape supplémentaire et finale, dite de limitation de pente, est nécessaire.

2.5 Limitation de pente

En utilisant une approximation constante par mailles, la méthode des EFD se réduit au schéma des volumes finis de Godunov (Godunov, 1959). Dans ce cas, la diffusion introduite dans le cadre des schémas amonts est suffisante pour stabiliser la solution. Les EFD d'ordre supérieur en espace produisent des oscillations non physiques au voisinage des fronts de discontinuités. Ces défauts peuvent être corrigés par une reconstruction des gradients (Chavent et Cockburn, 1989), qui permet de redistribuer les concentrations dans un élément afin de supprimer les oscillations.

Dans un premier temps, nous nous intéressons aux maillages quadrangulaires. Pour l'espace d'approximation Q_1 , nous adoptons la technique de limitation de pente de Chavent et Jaffré (1986). Pour l'espace P_1 , nous utilisons la procédure de reconstruction proposée par Cockburn et Shu (1998).

2.5.1 Limitation de pente dans le cas des éléments quadrangulaires

Limitation de pente dans l'espace Q_1

L'idée de base consiste à limiter les pentes sur chaque élément E de façon à ce que la valeur de la concentration sur chaque nœud A_i ($i = 1, \dots, 4$) de E soit comprise entre le minimum et le maximum des concentrations moyennes dans E et dans les éléments voisins ayant A_i comme nœud commun. Considérons un élément quadrangulaire E et ses éléments voisins E_l ($l = 1, \dots, 4$) représentés sur la figure 2.4 :

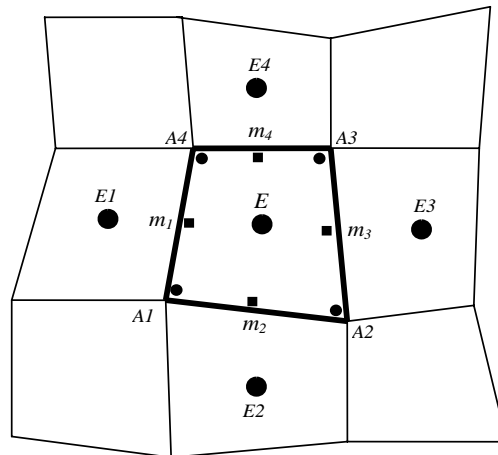


Figure 2.4 : Une maille quadrangulaire E et ses quatre mailles voisines E_1 , E_2 , E_3 et E_4 .

Sur chaque élément E , nous introduisons pour chaque nœud A_i les notations suivantes :

$$\begin{aligned} T(A_i) &= \{F \in \mathcal{Y}_h \text{ tel que } A_i \text{ est un sommet de } F\}, \\ \overline{C}_{\min,i} &= \min_{F \in T(A_i)} \overline{C}_h^F, \\ \overline{C}_{\max,i} &= \max_{F \in T(A_i)} \overline{C}_h^F. \end{aligned}$$

Le problème de limitation se résume au problème d'optimisation suivant :

Pour $\widetilde{C}_E = (\widetilde{C}_1, \widetilde{C}_2, \widetilde{C}_3, \widetilde{C}_4)$, trouver $W_E = (W_1, W_2, W_3, W_4)$ solution du problème :

$$\begin{aligned} \min_{W \in V(E)} \|W - \widetilde{C}_E\|_2 \text{ satisfaisant les contraintes :} \\ \frac{1}{4} \sum_{j=1}^4 W_j = \overline{C}_h^E, \\ \overline{C}_{\min,i} \leq W_i \leq \overline{C}_{\max,i}, \quad \text{pour } i = 1, \dots, 4. \end{aligned}$$

La limitation de pente consiste donc à résoudre sur chaque élément E un problème de minimisation de dimension 4. Une méthode de point selle est utilisée pour la résolution de ce problème (Chavent et Jaffré, 1986). Un autre algorithme basé sur la méthode des contraintes actives est décrit dans Hoteit *et al.* (2004).

Limitation de pente dans l'espace P_1

L'idée principale est cette fois d'empêcher les concentrations reconstituées aux milieux des arêtes de chaque élément de produire de nouveaux extréma. Cette procédure de limitation a une propriété physique importante puisqu'elle limite les flux convectifs à travers les interéléments plutôt que les valeurs de la fonction sur les sommets.

Dans le cas des éléments quadrangulaires, l'approche P_1 permet de transformer le problème bidimensionnel en 2 problèmes unidimensionnels dans chacune des directions de l'espace (Cockburn et Shu, 1998). Dans ce cas, nous n'avons plus affaire à une véritable limitation en 2-D mais plutôt à deux limitations 1-D. La procédure de reconstruction correspond à une extension multidimensionnelle de la technique utilisée pour les EFD en 1-D (Chavent et Jaffré, 1986 ; Hoteit, 2002).

La limitation est effectuée successivement sur les gradients $\frac{\partial \tilde{C}_h^E}{\partial x}$ et $\frac{\partial \tilde{C}_h^E}{\partial y}$; la concentration moyenne \overline{C}_h^E reste inchangée afin de respecter le principe de conservation de masse.

La concentration \tilde{C}_{m_i} définie au point (x_{m_i}, y_{m_i}) , milieu de l'arête Γi (figure 2.4), est obtenue à partir de l'équation (2.44) :

$$\tilde{C}_{m_i} = \overline{C}_h^E + \frac{\partial \tilde{C}_h^E}{\partial x} (x_{m_i} - x_E) + \frac{\partial \tilde{C}_h^E}{\partial y} (y_{m_i} - y_E) \quad (2.45)$$

Les oscillations non physiques aux milieux des arêtes Γi ($i = 1, \dots, 4$) peuvent être évitées si la concentration moyenne reconstruite C_{m_i} est bornée par les concentrations moyennes des deux mailles voisines ayant comme arête commune Γi , c'est-à-dire :

$$\begin{aligned} \min(\overline{C}_h^{E1}, \overline{C}_h^E) &\leq C_{m_1} \leq \max(\overline{C}_h^{E1}, \overline{C}_h^E), \\ \min(\overline{C}_h^{E3}, \overline{C}_h^E) &\leq C_{m_3} \leq \max(\overline{C}_h^{E3}, \overline{C}_h^E), \end{aligned} \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned} \min(\overline{C}_h^{E2}, \overline{C}_h^E) &\leq C_{m_2} \leq \max(\overline{C}_h^{E2}, \overline{C}_h^E), \\ \min(\overline{C}_h^{E4}, \overline{C}_h^E) &\leq C_{m_4} \leq \max(\overline{C}_h^{E4}, \overline{C}_h^E). \end{aligned} \quad (2.47)$$

Le problème de limitation se résume au problème d'optimisation suivant :

Tout d'abord, nous reconstruisons séquentiellement les nouvelles concentrations moyennes C_{m_1} et C_{m_2} respectivement selon les directions Ox et Oy . La reconstruction des autres concentrations moyennes C_{m_3} et C_{m_4} est immédiate. En effet, d'après la relation (2.45), nous avons :

$$\begin{aligned} C_{m_3} &= 2\overline{C}_h^E - C_{m_1} \\ C_{m_4} &= 2\overline{C}_h^E - C_{m_2} \end{aligned} \quad (2.48)$$

Si nous commençons par exemple par la direction Ox , seule l'information sur les mailles $E1$ et $E3$ est nécessaire (Hoteit *et al.*, 2004) :

$$C_{m_1} = \overline{C_h^E} - \min\text{mod}\left(\overline{C_h^E} - \tilde{C}_{m_1}, \overline{C_h^E} - \overline{C_h^{E1}}, \overline{C_h^{E3}} - \overline{C_h^E}\right), \quad (2.49)$$

avec la fonction minmod définie par :

$$\min\text{mod}(a_1, \dots, a_m) = \begin{cases} s \cdot \min_{1 \leq i \leq m} |a_i| & \text{si } s = \text{signe}(a_1) = \dots = \text{signe}(a_m) \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (2.50)$$

De la même façon, nous reconstruisons C_{m_2} dans la direction Oy en appliquant :

$$C_{m_2} = \overline{C_h^E} - \min\text{mod}\left(\overline{C_h^E} - \tilde{C}_{m_2}, \overline{C_h^E} - \overline{C_h^{E2}}, \overline{C_h^{E4}} - \overline{C_h^E}\right), \quad (2.51)$$

Finalement à partir du couple (C_{m_1}, C_{m_2}) , nous calculons un nouveau couple $\left(\frac{\partial C_h^E}{\partial x}, \frac{\partial C_h^E}{\partial y}\right)$ en résolvant le système linéaire de deux équations à deux inconnues (obtenu à partir de (2.44)) suivant :

$$\begin{cases} (x_{m_1} - x_E) \frac{\partial C_h^E}{\partial x} + (y_{m_1} - y_E) \frac{\partial C_h^E}{\partial y} = C_{m_1} - \overline{C_h^E} \\ (x_{m_2} - x_E) \frac{\partial C_h^E}{\partial x} + (y_{m_2} - y_E) \frac{\partial C_h^E}{\partial y} = C_{m_2} - \overline{C_h^E} \end{cases} \quad (2.52)$$

Cette méthode assure qu'aucun maximum n'est créé aux milieux des quatre arêtes.

Nous remarquons que la procédure de limitation de pente associée à l'espace P_1 repose sur une méthode directe et non sur une procédure itérative. Les méthodes directes consomment moins de temps de calcul CPU que les méthodes itératives. Ceci est un avantage additionnel de l'approche P_1 . Il reste maintenant à voir si la diminution du nombre de degrés de liberté entraîne une perte de précision de la solution numérique. Ce sera l'objet de la section suivante.

Résultats numériques dans le cas des éléments quadrangulaires

Dans cette section, nous abordons la résolution numérique du transport convectif d'un contaminant non-réactif dans un domaine rectangulaire où le champ d'écoulement est uniforme (figure 2.5). Les concentrations initiales sont nulles et nous considérons une injection permanente du pol-

uant à l'entrée du domaine, définie par une condition au limite de type Dirichlet avec :

$$\begin{cases} C(0, y) = 0 & \forall y \in [0, 12[\\ C(0, y) = 1 & \forall y \in [12, 28] \\ C(0, y) = 0 & \forall y \in]28, 40] \end{cases}$$

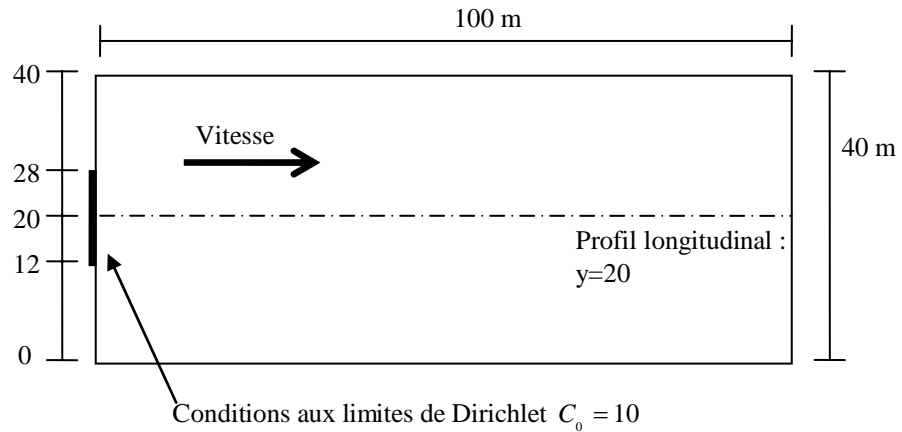


Figure 2.5 : Transport d'un contaminant dans un champ d'écoulement uniforme.

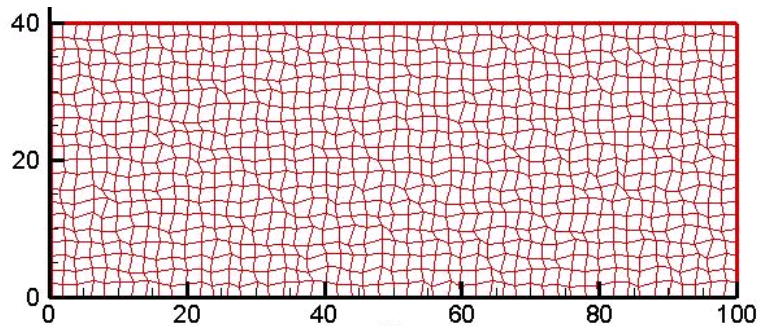


Figure 2.6 : Exemple d'un maillage quadrangulaire non-structuré obtenu à partir d'un maillage structuré avec $\Delta x = \Delta y = 2.0$ m.

Afin de tester l'effet du maillage sur les résultats, les expériences numériques sont menées sur :

- quatre maillages structurés composés d'éléments carrés de cotés $\Delta x = 2$ [m], $\Delta x = 1$ [m], $\Delta x = 0,5$ [m] et $\Delta x = 0,25$ [m].

- quatre maillages non-structurés (figure 2.6) composé d'éléments quadrangulaires quelconques.

Le maillage non-structuré est obtenu en perturbant le maillage structuré pour un Δx donné : les nœuds du carré sont déplacés aléatoirement autour de leurs positions initiales. Cette perturbation est réalisée de façon à ce que les quadrangles ainsi obtenus soient tous convexes et non dégénérés.

Nous considérons la solution numérique au temps $T = 60$ [s]. Pour la comparaison, nous utilisons les distributions de concentrations. Les temps globaux de calcul CPU ainsi que les temps de calcul nécessaires à l'étape de limitation sont également indiqués dans les tableaux 2.1 et 2.2.

$\Delta x = \Delta y$	Temps CPU		Temps CPU	
	total	limitation	Total	limitation
2.0	0.14	0,05	0,05	0,02
1.0	1.2	0.38	0.30	0,08
0.5	11.0	3.8	2.5	0.77
0.25	96.0	35.0	19.0	5.8
Espace Q_1			Espace P_1	

Tableau 2.1 : Temps CPU obtenus avec les deux espaces P_1 et Q_1 dans le cas de maillages quadrangulaires structurés.

$\Delta x = \Delta y$	Temps CPU		Temps CPU	
	total	limitation	total	Limitation
2.0	0.31	0.09	0,08	0,02
1.0	1.9	0.7	0.4	0.1
0.5	16	5.2	3.7	1.2
0.25	110	38.0	28.2	8.4
Espace Q_1			Espace P_1	

Tableau 2.2 : Temps CPU obtenus avec les deux espaces P_1 et Q_1 dans le cas de maillages quadrangulaires non-structurés.

Les figures 2.6 et 2.7 montrent que le front raide de concentration est bien approximé en utilisant les deux espaces d'approximation pour les deux types de maillages traités. En plus, aucune oscillation non physique n'a été détectée. Cependant, un avantage de l'approche P_1 mérite d'être souligné puisqu'un nombre d'inconnues inférieur est utilisé. Le temps de calcul CPU global est, en moyenne, 4 fois moins important, ceci est du également (mais en moindre partie) à la technique de limitation de pente

employée qui est une méthode directe et consomme de ce fait moins de temps de calcul que la procédure itérative de l'espace Q_1 .

Les considérations précédentes nous conduisent à porter notre choix sur l'espace basé sur la moyenne de la concentration et ses dérivées premières par rapport à chacune des directions de l'espace. Le cas test étudié met en évidence qu'il n'est besoin, en toute rigueur, que de connaître la valeur moyenne de la concentration inconnue ainsi que ses gradients suivant les directions x et y . Cet espace sera adopté dans la suite de ce travail pour la résolution de la partie convective de l'équation de transport et cela quelque soit le maillage utilisé.

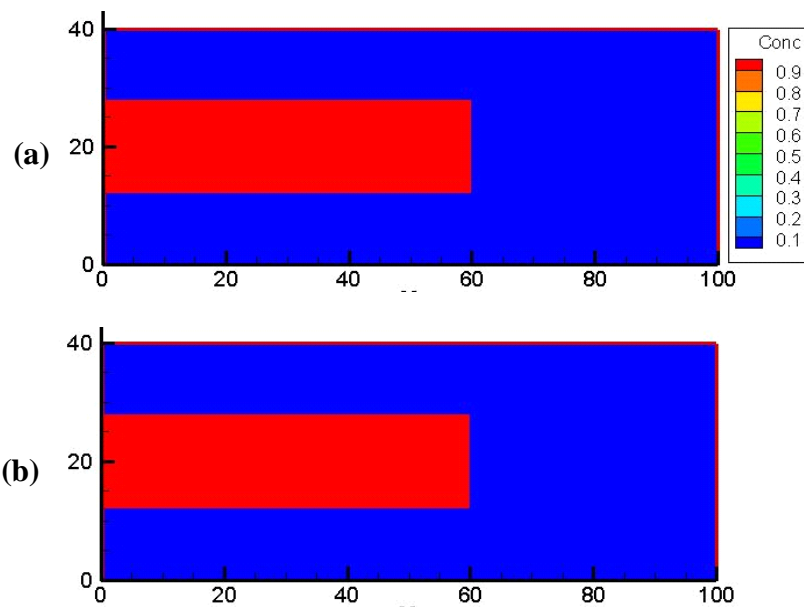


Figure 2.7 : Distributions de concentrations dans le cas d'un maillage structuré et $\Delta x=2.0$ m obtenus avec (a) l'espace Q_1 et (b) l'espace P_1 .

Dans ce qui suit, nous développons cet espace pour les maillages triangulaires. Plusieurs techniques de limitation de pente sont comparées afin de trouver la procédure de reconstruction la plus appropriée.

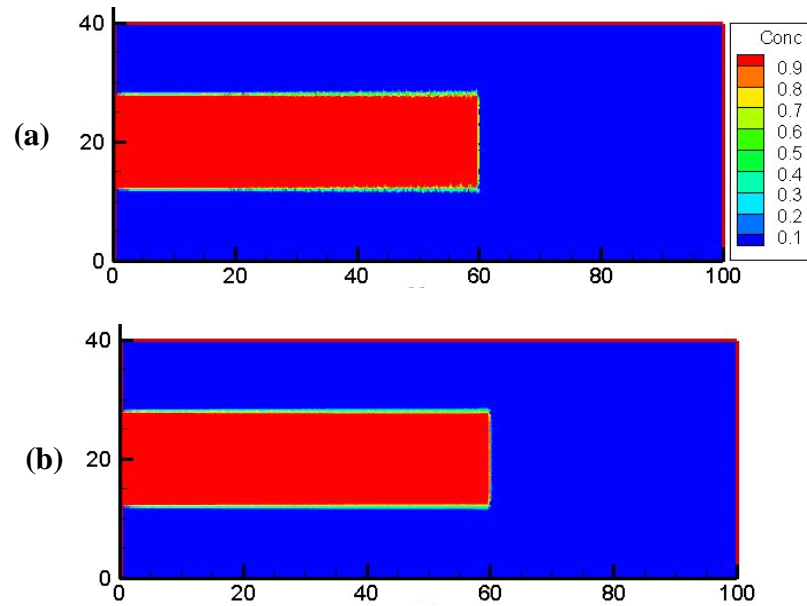


Figure 2.8 : Distributions de concentrations dans le cas d'un maillage non-structuré et $\Delta x=2.0$ m obtenus avec (a) l'espace Q_1 et (b) l'espace P_1 .

2.5.2 Limitation de pente dans le cas des éléments triangulaires

Plusieurs techniques de limitation de pente pour les maillages triangulaires non-structurés sont présentées dans la littérature. Chavent et Jaffré (1986) par exemple, proposent un limiteur basé sur le limiteur MUSCL (Monotonic Upstream Centered Schemes for Conservative Laws) de Van Leer (1979). Cependant, la technique proposée ne réussit pas à éliminer complètement les oscillations numériques et des valeurs non physiques peuvent apparaître aux milieux des arêtes des mailles. Pour éviter ce problème, une nouvelle technique qui consiste à limiter les concentrations aux milieux des arêtes a été proposée par Hoteit *et al.* (2004). Les concentrations aux nœuds (qui sont les degrés de liberté) sont ensuite recalculées en utilisant les nouvelles concentrations aux milieux des arêtes. Cockburn et Shu (1998) et Burbeau *et al.* (2001) proposent d'autres techniques de limitation appliquée aux maillages triangulaires utilisant comme degrés de liberté les concentrations aux milieux des arêtes.

L'objectif de cette section est de trouver une procédure de limitation efficace dans le cas de l'approximation polynomiale (2.43) que nous désirons étendre pour les éléments triangulaires déstructurés. Pour cela plusieurs procédures de reconstruction pour les éléments triangulaires sont présentées et comparées. La meilleure procédure est celle qui supprime les oscillations et introduit le moins de diffusion numérique tout en consommant un temps de calcul raisonnable.

La limitation est effectuée uniquement sur les gradients $\frac{\partial \tilde{C}_h^E}{\partial x}$ et $\frac{\partial \tilde{C}_h^E}{\partial y}$ afin d'obtenir les nouvelles valeurs recalculées $\left(\frac{\partial C_h^E}{\partial x}, \frac{\partial C_h^E}{\partial y}\right)$. La valeur moyenne \overline{C}_h^E de la concentration sur la maille E reste inchangée afin de vérifier le principe de conservation de la masse à l'échelle locale.

Le limiteur L-Minmod

Ce limiteur, comme son nom l'indique, est basé sur la fonction standard minmod (2.50). La limitation est effectuée en trois étapes à l'aide d'une méthode directe (sans itérations) :

Les concentrations aux milieux des arêtes \tilde{C}_{m_i} ($i=1, \dots, 3$) calculées à partir de l'équation (2.45) sont d'abord reconstruites (figure 2.8) :

$$C_{m_i} = \begin{cases} \min(\overline{C}_h^E, \overline{C}_h^{Ei}) & \text{si } \tilde{C}_{m_i} < \min(\overline{C}_h^E, \overline{C}_h^{Ei}) \\ \max(\overline{C}_h^E, \overline{C}_h^{Ei}) & \text{si } \tilde{C}_{m_i} > \max(\overline{C}_h^E, \overline{C}_h^{Ei}) \\ \tilde{C}_{m_i} & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.53)$$

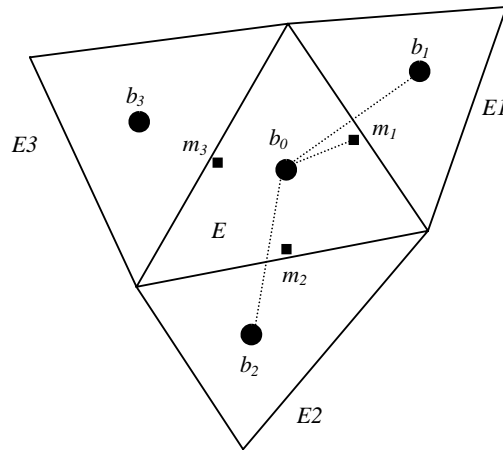


Figure 2.9 : Une maille triangulaire E et ses trois mailles voisines E₁, E₂ et E₃.

Ensuite à partir de chacun des couples $(C_{m_i}, C_{m_j})_{i \leq 3, j \leq 3, i \neq j}$, nous calculons

un nouveau couple $\left(\left(\frac{\partial C_h^E}{\partial x} \right)_{ij}, \left(\frac{\partial C_h^E}{\partial y} \right)_{ij} \right)$ en résolvant le système linéaire

de deux équations à deux inconnues suivant (obtenu à partir de (2.44)) :

$$\begin{cases} (x_{m_i} - x_E) \left(\frac{\partial C_h^E}{\partial x} \right)_{ij} + (y_{m_i} - y_E) \left(\frac{\partial C_h^E}{\partial y} \right)_{ij} = C_{m_i} - \overline{C_h^E} \\ (x_{m_j} - x_E) \left(\frac{\partial C_h^E}{\partial x} \right)_{ij} + (y_{m_j} - y_E) \left(\frac{\partial C_h^E}{\partial y} \right)_{ij} = C_{m_j} - \overline{C_h^E} \end{cases} \quad (2.54)$$

Finalement, pour s'assurer qu'aucun maximum n'est créé aux milieux des

arêtes, $\left(\frac{\partial C_h^E}{\partial x}, \frac{\partial C_h^E}{\partial y} \right)$ est obtenu par :

$$\begin{cases} \frac{\partial C_h^E}{\partial x} = \text{minmod} \left(\left(\frac{\partial C_h^E}{\partial x} \right)_{12}, \left(\frac{\partial C_h^E}{\partial x} \right)_{13}, \left(\frac{\partial C_h^E}{\partial x} \right)_{23} \right) \\ \frac{\partial C_h^E}{\partial y} = \text{minmod} \left(\left(\frac{\partial C_h^E}{\partial y} \right)_{12}, \left(\frac{\partial C_h^E}{\partial y} \right)_{13}, \left(\frac{\partial C_h^E}{\partial y} \right)_{23} \right) \end{cases} \quad (2.55)$$

Le limiteur de Hoteit et al. (2004)

Nous étendons le principe de limitation développé par Hoteit *et al.* (2004) à la famille des degrés de liberté et des fonctions de base définis par (2.43).

Les valeurs reconstruites aux milieux des arêtes C_{m_i} doivent vérifier les propriétés suivantes :

La concentration moyenne C_{m_i} doit être comprise entre $\overline{C_h^E}$ et $\overline{C_h^{Ei}}$, qui sont respectivement les concentrations moyennes des mailles E et Ei ayant Γ_i comme arête commune.

Les concentrations reconstituées C_{m_i} sont tenues le plus proche possible des concentrations initiales \tilde{C}_{m_i} .

Le problème d'optimisation précédent est équivalent donc à la formulation suivante : pour des concentrations initiales $\tilde{C}_E = (\tilde{C}_{m_1}, \tilde{C}_{m_2}, \tilde{C}_{m_3})$, trouver $\hat{C}_E = (C_{m_1}, C_{m_2}, C_{m_3})$ solution du problème :

$$\min \|\hat{C}_E - \tilde{C}_E\|_2 \text{ satisfaisant les contraintes linéaires :}$$

$$\sum_{i=1}^3 C_{m_i} = \sum_{i=1}^3 \tilde{C}_{m_i} = 3\overline{C}_h^E \quad (2.56)$$

$$\min \left(\overline{C}_h^E, \overline{C}_h^{Ei} \right) \leq C_{m_i} \leq \max \left(\overline{C}_h^E, \overline{C}_h^{Ei} \right) \text{ pour } i=1, \dots, 3$$

Le problème est résolu alors à l'aide d'une procédure itérative (Hoteit *et al.*, 2004).

Finalement à partir d'un des couples de concentrations moyennes reconstituées $(C_{m_i}, C_{m_j})_{i \leq 3, j \leq 3, i \neq j}$, nous calculons un nouveau couple $\left(\frac{\partial C_h^E}{\partial x}, \frac{\partial C_h^E}{\partial y} \right)$ en résolvant un des systèmes linéaires précédents (2.54).

Le limiteur de Cockburn et Shu (1998)

Le limiteur de Cockburn et Shu (1998) est basé sur l'observation géométrique simple suivante : considérons l'élément triangulaire de la figure 2.8, où m_1 est le point milieu d'une des arêtes de l'élément E et b_1 le centre de gravité de l'élément $E1$. Nous pouvons établir la relation :

$$m_1 - b_0 = \alpha_1(b_1 - b_0) + \alpha_2(b_2 - b_0) \quad (2.57)$$

où α_1, α_2 sont deux coefficients réels positifs définis uniquement par un calcul géométrique et b_0, b_2 les centres de gravité des éléments E et $E2$. Nous pouvons ainsi écrire pour toute fonction linéaire C_h (2.44) :

$$C_h(m_1) - C_h(b_0) = \alpha_1(C_h(b_1) - C_h(b_0)) + \alpha_2(C_h(b_2) - C_h(b_0)),$$

or

$$\overline{C}_h^{Ei} = \frac{1}{|Ei|} \int_{Ei} C_h(x, t) = C_h(b_i, t), \text{ pour } i = (0, \dots, 3).$$

Nous en déduisons alors la relation suivante :

$$\begin{aligned} \Delta C_h(m_1, E) &= C_h(m_1) - C_h(b_0) = \alpha_1 \left(\overline{C_h^{E1}} - \overline{C_h^E} \right) \\ &+ \alpha_2 \left(\overline{C_h^{E2}} - \overline{C_h^E} \right). \end{aligned} \quad (2.58)$$

La quantité $\Delta C_h(m_1, E)$ peut également s'exprimer différemment à partir de la relation (2.44) en fonctions des gradients de la concentration dans un élément E . Nous notons cette deuxième notation $\Delta C_h^g(m_1, E)$:

$$\Delta C_h^g(m_1, E) = (x_{m_1} - x_E) \left(\frac{\partial \tilde{C}_h^E}{\partial x} \right) + (y_{m_1} - y_E) \left(\frac{\partial \tilde{C}_h^E}{\partial y} \right) \quad (2.59)$$

Pour calculer les valeurs limitées $\frac{\partial C_h^E}{\partial x}$ et $\frac{\partial C_h^E}{\partial y}$, nous calculons au départ les valeurs $\tilde{\Delta}_i$ ($i=1, \dots, 3$) définies par :

$$\tilde{\Delta}_i = \text{minmod} \left(\Delta C_h(m_i, E), \nu \Delta C_h^g(m_i, E) \right), \quad (2.60)$$

où ν est un réel strictement supérieur à 1. Cockburn et Shu (1998) proposent d'adopter la valeur $\nu = 1.5$. Deux cas se présentent alors :

Si $\sum_{i=1}^3 \tilde{\Delta}_i = 0$, nous résolvons le système suivant pour obtenir les gradients reconstitués :

$$\begin{cases} (x_{m_1} - x_E) \left(\frac{\partial C_h^E}{\partial x} \right) + (y_{m_1} - y_E) \left(\frac{\partial C_h^E}{\partial y} \right) = \tilde{\Delta}_1 - \overline{C_h^E} \\ (x_{m_2} - x_E) \left(\frac{\partial C_h^E}{\partial x} \right) + (y_{m_2} - y_E) \left(\frac{\partial C_h^E}{\partial y} \right) = \tilde{\Delta}_2 - \overline{C_h^E} \end{cases} \quad (2.61)$$

Si $\sum_{i=1}^3 \tilde{\Delta}_i \neq 0$, nous calculons les coefficients suivants :

$$\begin{aligned} pos &= \sum_{i=1}^3 \max(0, \tilde{\Delta}_i), \quad neg = \sum_{i=1}^3 \max(0, -\tilde{\Delta}_i) \\ \theta^+ &= \min\left(1, \frac{neg}{pos}\right), \quad \theta^- = \min\left(1, \frac{pos}{neg}\right) \end{aligned} \quad (2.62)$$

Les Δ_i corrigées sont calculées à partir de la relation suivante :

$$\Delta_i = \theta^+ \max(0, \tilde{\Delta}_i) - \theta^- \max(0, -\tilde{\Delta}_i). \quad (2.63)$$

Pour obtenir les gradients reconstitués (ou limités), nous utilisons la relation (2.61) en remplaçant les $\tilde{\Delta}_i$ par les Δ_i .

Le limiteur de Burbeau et al. (2001)

Le limiteur introduit par Burbeau *et al.* (2001) apporte une amélioration au limiteur de Cockburn et Shu (1998). En effet, la quantité $\Delta C_h^g(m_i, E) = C_h(m_i, E) - C_h(b_0)$ est calculée cette fois de deux façons différentes :

$$\begin{aligned} \Delta^- C_h^g(m_i, E) &= C_h^-(m_i, E) - C_h(b_0) \\ \Delta^+ C_h^g(m_i, E) &= C_h^+(m_i, E) - C_h(b_0) \end{aligned}$$

où $C_h^-(m_i, E)$ et $C_h^+(m_i, E)$ sont les concentrations calculées en m_i respectivement à partir de l'élément E et de son élément voisin Ei . Nous définissons ensuite les variables suivantes :

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}_{i,m} &= \minmod(\Delta C_h(m_i, E), v\Delta^- C_h^g(m_i, E)) \\ \tilde{\Delta}_{i,max} &= \minmod(\Delta^- C_h^g(m_i, E), \Delta^+ C_h^g(m_i, E)), \end{aligned} \quad (2.64)$$

Les valeurs à limiter $\tilde{\Delta}_i$ ($i=1, \dots, 3$) sont définies en introduisant la fonction maxmod afin de relaxer les effets de la fonction minmod par rapport à la "régularité" de la solution approchée :

$$\tilde{\Delta}_i = \maxmod(\tilde{\Delta}_{i,m}, \tilde{\Delta}_{i,max}). \quad (2.65)$$

avec la fonction maxmod définie par :

$$\max\text{mod}(a_1, \dots, a_m) = \begin{cases} s \cdot \max_{1 \leq i \leq m} |a_i| & \text{si } s = \text{signe}(a_1) = \dots = \text{signe}(a_m) \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (2.66)$$

La reconstruction des gradients est similaire à celle du limiteur précédent et se fait à l'aide des équations (2.61)-(2.63).

Résultats numériques dans le cas des éléments triangulaires

Nous considérons à présent la simulation du transport bidimensionnel d'une gaussienne dans le cas d'un champ d'écoulement non-uniforme et d'un maillage fortement déstructuré comme l'indique la figure 2.10. Ce problème représente un cas test pratique pour les schémas numériques amonts (Kirby, 2000). En effet, il est souvent utilisé pour évaluer la diffusion numérique des nouveaux schémas de résolution des équations hyperboliques.

Le domaine est un carré $\Omega = (-0.5, 0.5) \times (-0.5, 0.5)$ [m²], le champ de vitesse tournant est donné par $V_1(x, y) = -4y$ [m/s], $V_2(x, y) = -4x$ [m/s], et le temps de simulation est $T = \pi/2$ [s] qui correspond à une rotation entière de la gaussienne. La concentration initiale est donnée par :

$$C_0(x, y) = \exp\left(-\frac{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (2.67)$$

avec (x_c, y_c) et σ les coordonnées du centre de gravité et l'écart type de la Gaussienne. La solution analytique correspondante à ce problème de transport est donnée par :

$$C(x, y, t) = \frac{2\sigma^2}{2\sigma^2 + 4Dt} \exp\left(-\frac{(\bar{x} - x_c)^2 + (\bar{y} - y_c)^2}{2\sigma^2 + 4Dt}\right) \quad (2.68)$$

avec $\bar{x} = x \cos(4t) + y \sin(4t)$ et $\bar{y} = -x \sin(4t) + y \cos(4t)$.

Dans les expériences numériques suivantes, nous adoptons les valeurs suivantes : $D = 10^{-8}$ [m²/s], $x_c = 0.25$ [m], $y_c = 0$ [m] et $\sigma = 0.0447$ [m²/s].

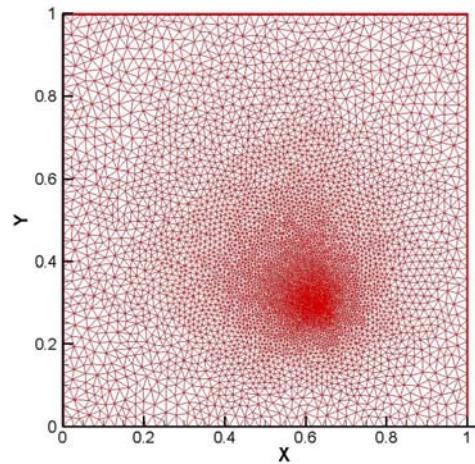


Figure 2.10 : Maillage fortement déstructuré dans le cas du transport d'une gaussienne.

Le tableau 2.3 donne pour les simulations effectuées avec les différentes procédures de limitation de pente, la concentration numérique maximale obtenue après un tour complet, l'erreur RMS définie par :

$$\text{Erreur RMS} = \frac{1}{N_e} \sqrt{\sum_{i=1}^{N_e} (\bar{C}_i^{\text{calculée}} - \bar{C}_i^{\text{analytique}})^2}, \quad (2.69)$$

où N_e est le nombre d'éléments, les temps de calcul CPU globaux et les temps de calcul consommés par l'étape de limitation. A partir des résultats du tableau 2.3, nous pouvons établir les remarques suivantes :

- L'erreur RMS obtenue par le limiteur de Hoteit *et al.* (2004) est la plus faible ($9.8 \cdot 10^{-5}$) comparée à celles obtenues par les autres techniques de limitation de pente.
- Les concentrations maximales calculées après une simulation complète sont toutes inférieures à la concentration maximale initiale. Ceci est dû à la diffusion numérique développée par les schémas amonts. Cette diffusion numérique est aussi accentuée dans ce cas à cause du maillage fortement déstructuré. Cependant, le meilleur résultat (0.74) correspond au limiteur de Hoteit *et al.* (2004). C'est donc ce limiteur qui introduit le moins de diffusion numérique.
- Concernant les temps de calcul CPU totaux et consommés lors de l'étape de limitation, c'est le limiteur L-Minmod qui est le plus efficace. Nous rappelons que ce limiteur est basé sur une procédure directe. Le limiteur de Hoteit *et al.* (2004) est par contre basé sur une procédure itérative. Cependant, les résultats montrent que le temps CPU consommé par le second limiteur n'est supérieur que de 7%.

Se basant sur ces remarques, notre choix sera donc porté sur le limiteur de Hoteit *et al.* (2004) pour la résolution du terme convectif dans le cas des maillages triangulaires.

	Limiteur L-Minmod	Limiteur de Hoteit <i>et al.</i> (2004)	Limiteur de Cockburn et Shu (1998)	Limiteur de Burbeau <i>et al.</i> (2001)
Erreur RMS	$1.7 \cdot 10^{-4}$	$9.8 \cdot 10^{-5}$	$1.7 \cdot 10^{-4}$	$1.5 \cdot 10^{-4}$
Concentration maximale	0.61	0.74	0,59	0,65
Temps CPU total	191	205	197	211
Temps CPU limitation	36	53	44	61

Tableau 2.3 : Résultats obtenus pour les différentes techniques de limitation de pente dans le cas du transport d'une gaussienne.

2.6 Conclusion

Dans ce chapitre, la résolution numérique des équations de l'écoulement et de transport de masse en milieu poreux saturé a été abordée. Le transport d'un polluant non réactif est régi par la somme de deux opérateurs : la convection et la diffusion/dispersion. Nous utilisons la technique de séparation d'opérateurs pour discrétiser l'équation de transport.

L'équation de l'écoulement et la partie dispersive de l'équation du transport sont résolues par la méthode des éléments finis mixtes hybrides (EFMH). La méthode des éléments finis discontinus de Galerkin (EFD) a été retenue pour résoudre la partie convective de l'équation de transport. Les EFD sont basés sur une approximation polynomiale de la solution en fonction des degrés de liberté et des fonctions de base de l'espace d'approximation. Deux approches ont été considérées : la première consiste à utiliser les concentrations inconnues aux nœuds comme degrés de liberté, la seconde est basée sur la valeur moyenne par maille de la concentration et de ses gradients dans les différentes directions de l'espace.

Dans un premier temps, nous avons cherché à comparer ces deux espaces d'approximation pour des maillages quadrangulaires structurés et non structurés. Les expériences numériques montrent, que même si les deux approches sont équivalentes, le second schéma permet des gains en temps de calcul importants : il utilise moins d'inconnues par maille et repose sur

une procédure directe de limitation de pente. Dans un second temps, nous avons développé cet espace d'approximation pour des maillages triangulaires non structurés. Les expériences numériques montrent que le limiteur de Hoteit *et al.* (2004) constitue la méthode de reconstruction la plus appropriée pour ce type d'espace.

Dans le chapitre suivant, la discrétisation temporelle des EFD est étudiée. Le choix du pas du temps des schémas explicites classiques est conditionné par le respect d'un critère de CFL global. Cette condition peut imposer dans certains cas des pas de temps très petits ce qui va augmenter de façon significative les temps de calcul CPU. Pour éviter cet inconvénient majeur des schémas traditionnels, deux alternatives intéressantes sont étudiées et présentées.

Chapitre 3

Discrétisations temporelles alternatives pour la résolution de la partie hyperbolique de l'équation de transport

- 3.1. Introduction**
- 3.2. Résolution de l'équation de convection par une classe de schémas implicites et semi-implicites en temps**
 - 3.2.1 Généralités
 - 3.2.2 Proposition d'une classe de schémas semi-implicites
 - 3.2.3 Résultats numériques
 - Transport d'un contaminant dans un champ d'écoulement uniforme*
- 3.3. Résolution de l'équation de convection par une classe de schémas explicites multi-domaines en temps**
 - 3.3.1 Généralités
 - 3.3.2 Formulation mathématique des schémas explicites multi-domaines en temps
 - 3.3.3 Résultats numériques
 - Transport d'un contaminant dans un champ d'écoulement uniforme*
 - Le problème du transport d'une gaussienne*
 - Transport d'un contaminant dans un champ d'écoulement non-uniforme : cas du double puits (injection et pompage)*
- 3.4 Conclusion**

3.1. Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté une méthode de séparation d'opérateurs combinant les méthodes des éléments finis discontinus et mixtes hybrides pour la résolution de l'équation de transport. Un des avantages de cette technique est de pouvoir utiliser des pas de temps différents pour la dispersion et la convection de sorte que les pas adoptés correspondent à l'échelle de temps de ces différents phénomènes.

Dans ce cadre, la résolution du terme dispersif avec la méthode des éléments finis mixtes hybrides (EFMH) se fait à l'aide d'une discrétisation temporelle implicite. A chaque nouveau pas de temps, les concentrations inconnues sont calculées simultanément par la résolution d'un seul système dont le nombre d'inconnues est proportionnel au nombre total de mailles. Les schémas implicites étant incondi-

nellement stables, aucune restriction particulière concernant le choix du pas de temps n'est nécessaire dans ce cas.

La partie convective de l'équation de transport est résolue par les éléments finis discontinus (EFD) explicites en temps. L'avantage des schémas explicites par rapport aux schémas implicites est la simplicité de leur mise en œuvre. Par contre, un problème se pose pour cette classe de schémas qui est celui du choix du pas de temps à utiliser pour la discrétisation temporelle. Pour des raisons de stabilité numérique, ce choix ne se fait pas de façon arbitraire et il est limité par le critère CFL. Ce critère de stabilité global peut s'avérer très contraignant dans certains cas pratiques. En présence d'un maillage localement raffiné, un champ de perméabilité hétérogène ou encore dans le cas de puits d'injection et/ou de pompage, la taille des différents éléments du maillage ainsi que l'intensité du champ de vitesse peuvent varier de plusieurs ordres de grandeur. Du fait de ces fortes hétérogénéités, les pas de temps locaux vont varier de façon considérable d'une région à une autre (d'une maille à l'autre dans certains cas) dans l'ensemble du domaine physique.

Afin de garantir la stabilité numérique, la condition de CFL globale communément utilisée par les schémas explicites traditionnels, exige de prendre comme pas de temps unique Δt_A le minimum des pas de temps locaux. Il est alors évident que cette restriction peut conduire à un Δt_A petit, voire très petit, ce qui augmente significativement les temps de calcul CPU. Cette difficulté est également rendue accrue à cause des échelles d'études et des durées de simulations des écoulements souterrains. Considérons par exemple le cas des déchets nucléaires, l'échelle d'étude pour le transport des contaminants est typiquement de l'ordre de dizaine de kilomètres voire de centaine de kilomètres sur des dizaines ou des centaines de milliers d'années (Sbouï, 2007).

Nous présentons dans ce chapitre deux alternatives intéressantes au schéma explicite traditionnel. La première classe de schémas est celle des schémas semi-implicites (les θ -schémas). Nous étudions l'apport d'un schéma implicite-explicite basé sur les éléments finis discontinus. Ce schéma permet de s'affranchir du critère de stabilité du nombre CFL sur les pas de temps et il est alors possible d'utiliser des pas de temps plus grands que ceux requis par les méthodes explicites classiques. En outre, il gardera les techniques performantes de limitation de pente et de résolution du problème de Riemann aux interfaces dans sa partie explicite.

Dans la deuxième partie, nous présentons une méthode de discrétisation explicite en temps basée cette fois sur une condition de stabilité locale. Le domaine de calcul est découpé en plusieurs zones et différents pas de temps sont affectés à chaque zone en fonction des caractéristiques locales de l'hydrodynamique et du maillage. La condition de CFL n'est plus considérée d'un point de vue global mais local et chaque cellule peut utiliser un pas de temps qui lui est propre. Le raccord entre les différentes zones est réalisé de sorte que le schéma obtenu conserve l'ensemble des propriétés numériques du schéma explicite classique sur lequel il est basé.

3.2. Résolution de l'équation de convection par une classe de schémas implicites et semi-implicites en temps

3.2.1 Généralités

La discrétisation temporelle implicite des équations hyperboliques monodimensionnelles est analysée dans plusieurs travaux (Stoufflet, 1984 ; Steve, 1988). Les études théoriques montrent que le schéma Eulérien implicite a une diffusion numérique proportionnelle au nombre de CFL, soit au pas de discrétisation temporelle.

Les schémas implicites sont largement utilisés pour la résolution des équations hyperboliques non-linéaires dans le cas des régimes stationnaires, notamment les équations d'Euler pour les fluides compressibles. La solution des problèmes stationnaires est considérée dans ce cas comme étant la solution limite aux temps longs d'un processus pseudo-stationnaire (Desideri et Hemker, 1990). Il est démontré dans Steve (1988) que la diffusion numérique introduite par les schémas implicites est sans grande incidence sur la qualité de la solution stationnaire. L'utilisation de cette classe de schémas pour ce type de problèmes permet une réduction notable des temps de calcul, soit une convergence plus rapide vers la solution. Beam et Warming (1976) ont été parmi les premiers à combiner les schémas implicites avec la méthode des différences finies. Le schéma proposé aboutit à une résolution de systèmes symétriques définis positifs et tridiagonaux par blocs en 1-D. La procédure a été également efficacement étendue au cas bidimensionnel par l'utilisation de la méthode des directions alternées et d'une viscosité appropriée. Lerat (1981) y apporte une amélioration en développant une classe de schémas implicites centrés d'ordre deux. En éléments finis, plusieurs travaux sur le sujet ont été aussi réalisés. Angrand *et al.* (1989) proposent une résolution implicite de type Richtmyer des équations d'Euler. L'adaptation des schémas implicites linéarisés au cas des maillages non-structurés a été étudiée par Stoufflet (1984). Des solutions sta-

tionnaires précises à l'ordre deux et sans oscillations numériques sont obtenues à l'aide d'un schéma implicite sans stockage matriciel (Stève, 1988). Kaddouri (1993) utilise la méthode des éléments finis discontinus pour résoudre les équations d'Euler pour les fluides compressibles. L'intérêt des méthodes implicites dans le cas des équations de Barré de Saint-Venant a été également mis en évidence dans de nombreux travaux (Alcrudo *et al.*, 1994 ; Delis *et al.*, 2000).

Si les schémas implicites sont efficaces pour la simulation des problèmes hydrauliques de type stationnaire, ils sont néanmoins moins convenables pour les problèmes transitoires (Leveque, 2002). En plus, pour un même pas de temps les schémas explicites permettent une meilleure approximation du front de concentration que les schémas implicites (Siegel, 1995). Cependant un "compromis" consistant à combiner une discrétisation explicite en temps avec une discrétisation implicite a été exploré par plusieurs auteurs dans la littérature. L'objectif étant de créer un schéma temporel qui permet de conserver les avantages des schémas explicites tout en leur donnant la possibilité d'utiliser des pas de temps supérieurs à l'instar des schémas implicites.

Gjesdal et Teigland (1997) proposent une discrétisation temporelle dans laquelle le terme de flux est décomposé en une partie explicite et une autre implicite. La discrétisation spatiale considérée est un schéma de différences finies de second ordre en espace en 1-D. Le terme de flux est divisé en deux parties : une première partie qui correspond à la discrétisation spatiale amont d'ordre un est traité implicitement. La deuxième partie, considérée comme une correction du second ordre, est traitée explicitement. Le schéma obtenu est inconditionnellement stable, mais une étape de limitation de pente est toujours nécessaire pour stabiliser le schéma. Son utilisation est limitée pour des pas de temps modérés car il introduit de la diffusion numérique pour des pas de temps supérieurs. La diffusion introduite est équivalente à celle obtenue par les schémas implicites classiques. L'efficacité de ce schéma est légèrement améliorée pour des discrétisations temporelles d'ordre deux. Dans le cadre des éléments finis discontinus, l'idée d'une décomposition temporelle des flux issus de la formulation variationnelle en deux parties explicites et implicites a été également utilisée pour résoudre l'équation de transport instationnaire en 3-D (Guillot *et al.*, 2002). Le maillage adopté est hexaédrique avec une famille linéaire de fonctions d'approximation. Les intégrales le long des contours horizontaux sont résolues explicitement alors que celles le long des contours verticaux sont résolues implicitement. Cette décomposition spatiale des flux conduit à des systèmes triangulaires par blocs.

Une autre idée qui consiste cette fois à ajouter des termes implicites artificiels aux termes issus de la formulation variationnelle explicite, a été explorée par Geijselaers et Huétink (2003). Afin d'étendre la région de stabilité du schéma explicite classique, la méthode consiste à introduire une légère diffusion numérique afin d'éliminer les oscillations qui apparaissent pour les pas de temps supérieurs à ceux utilisés dans le cadre d'une discrétisation explicite traditionnelle. Les résultats sont satisfaisants mais pour des valeurs de CFL ne dépassant pas 0.95.

3.2.2 Proposition d'une classe de schémas semi-implicites

Dans ce travail, nous explorons la voie d'une discrétisation temporelle hybride explicite-implicite avec la méthode des EFD et un maillage triangulaire pour la résolution de la partie convective de l'équation de transport. Notre choix est motivé par les résultats d'une étude mathématique d'une classe de θ -schémas effectuée dans le cas des volumes finis 1-D (Stève, 1988). En effet, cet étude montre que lorsque $\theta \geq 1/2$ le schéma est toujours diffusif quelque soit le CFL (schéma inconditionnellement stable) et que la diffusion est minimisée dans le cas du schéma de Crank-Nicholson ($\theta = 1/2$). Cette propriété semble être intéressante dans la mesure où la diffusion numérique introduite peut être moins dépendante de la valeur du pas de temps pour les θ -schémas que pour les schémas implicites.

Dans le cas des EFD, la discrétisation temporelle générale de l'équation (2.37) avec les θ -schémas s'écrit :

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{\Delta t} [A] \begin{bmatrix} \tilde{C}_1^E \\ \tilde{C}_2^E \\ \tilde{C}_3^E \end{bmatrix}^{n+1} - \theta [B] \begin{bmatrix} \tilde{C}_1^E \\ \tilde{C}_2^E \\ \tilde{C}_3^E \end{bmatrix}^{n+1} + \theta [M^0] \begin{bmatrix} \tilde{C}_1^E \\ \tilde{C}_2^E \\ \tilde{C}_3^E \end{bmatrix}^{n+1} \\
 & + \theta \sum_{l=1}^3 [M^l] \begin{bmatrix} \tilde{C}_1^{El} \\ \tilde{C}_2^{El} \\ \tilde{C}_3^{El} \end{bmatrix}^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} [A] \begin{bmatrix} C_1^E \\ C_2^E \\ C_3^E \end{bmatrix}^n \\
 & + (1-\theta) [B] \begin{bmatrix} C_1^E \\ C_2^E \\ C_3^E \end{bmatrix}^n - (1-\theta) [M^0] \begin{bmatrix} C_1^E \\ C_2^E \\ C_3^E \end{bmatrix}^n - (1-\theta) \sum_{l=1}^3 [M^l] \begin{bmatrix} C_1^{El} \\ C_2^{El} \\ C_3^{El} \end{bmatrix}^n
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Pour $\theta = 0$, nous retrouvons l'équation (2.38), soit le schéma d'Euler du premier ordre explicite en temps étudié au chapitre précédent.

Pour $\theta=1$, nous avons le schéma d'Euler du premier ordre implicite en temps.

Comme nous l'avons déjà vu au chapitre précédent, les EFD requièrent une étape de limitation de pente qui permet de stabiliser la solution numérique. Du fait de leur non-linéarité, les schémas numériques basés sur des procédures de reconstruction de pente (ou de flux) sont difficiles à analyser d'un point de vue mathématique (Gjesdal et Teigland, 1997). C'est pour cela, nous nous contentons dans ce chapitre d'examiner les propriétés des θ -schémas à partir des résultats numériques.

Les transports dispersifs sont également étudiés. La résolution de la dispersion se fait toujours par la méthode des EFMH implicites en temps. Cependant, une différence se distingue par rapport au cas étudié dans le chapitre précédent. Dans le cas d'une discrétisation temporelle explicite pour les EFD et à cause du problème de stabilité, le pas de temps Δt_A est inférieur à Δt_D ($\Delta t_D = M \Delta t_A$ tel que $M \geq 1$). Dans le cas d'une discrétisation semi-implicite (ou implicite) pour le terme convectif, le critère de stabilité n'est plus un facteur limitant pour Δt_A et nous pouvons prendre $\Delta t_A = \Delta t_D$. Les deux opérateurs sont alors discrétisés avec le même pas de temps (bien que les méthodes numériques soient différentes).

3.2.3 Résultats numériques

Transport d'un contaminant dans un champ d'écoulement uniforme

Pour ce premier cas test, nous considérons le problème du transport d'un contaminant dans un champ d'écoulement uniforme étudié au chapitre 2 (figure 2.5). Un maillage triangulaire composé de 4004 mailles et fortement déstructuré est utilisé (figure 3.1) et différentes valeurs des paramètres de diffusion, correspondant à différentes valeurs du nombre de Péclet, sont considérées afin de prendre en compte l'effet des phénomènes dispersifs (tableau 3.1).

Une solution analytique bidimensionnelle existe pour cet exemple et est définie par (Leij Feike et Dane, 1990) :

$$C(x, y, t) = \frac{x C_0}{(16\pi\alpha_L)^{1/2}} \int_0^t \tau^{-3/2} \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{a+y}{(4\alpha_T\tau)^{1/2}} \right] + \operatorname{erf} \left[\frac{a-y}{(4\alpha_T\tau)^{1/2}} \right] \right\} \times \exp \left[- \left(\frac{x-U\tau}{(4\alpha_L\tau)^{1/2}} \right)^2 \right] d\tau \quad (3.2)$$

où :

- C_0 est la valeur de la concentration imposée (conditions de Dirichlet).

- erf est la fonction erreur : $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\tau^2} d\tau$.

a (L) un réel strictement positif, défini tel que : $C(0, y, t) = C_0$ pour y compris entre $-a$ et a .

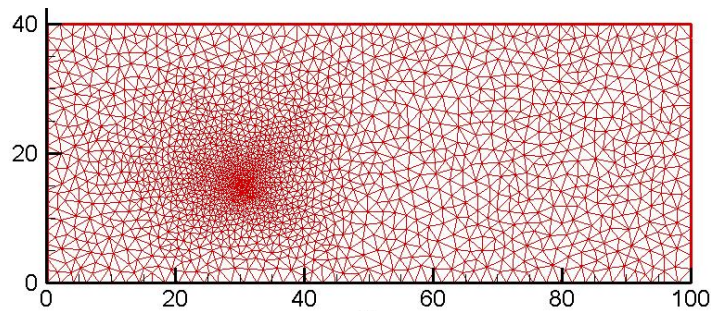


Figure 3.1 : Le maillage triangulaire fortement déstructuré

Cas	α_l	α_t	D_m	Pe
1	0.002	0.0005	0	[101,1467]
2	0.2	0.05	0	[1.01,14.67]
3	2.0	0.5	0	[0.101,1.467]

Tableau 3.1 : Différentes valeurs du nombre de Péclet utilisées pour le problème du transport dans un champ d'écoulement uniforme.

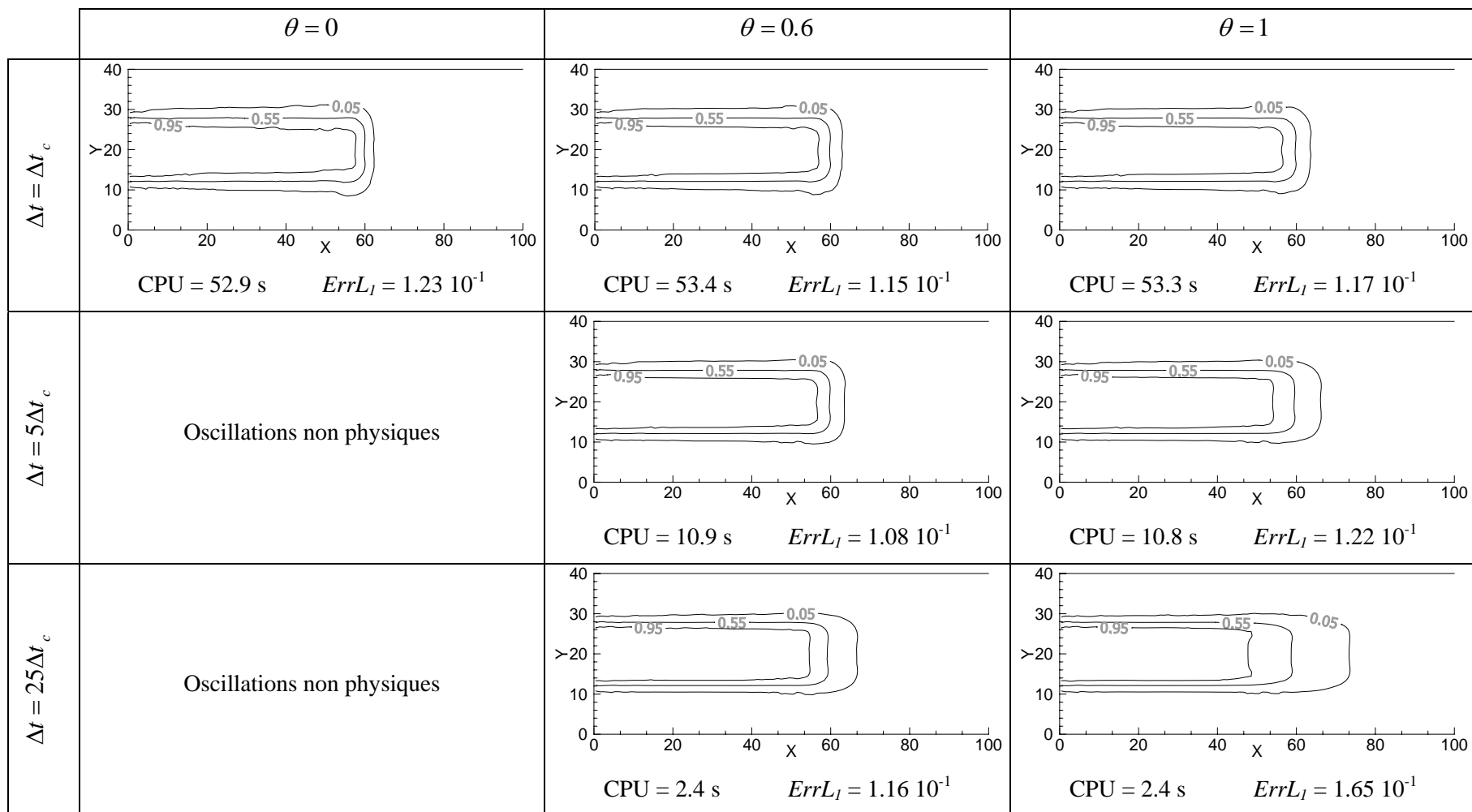


Figure 3.2 : Profils d'isoconcentrations, erreurs et temps de calcul CPU obtenus à l'aide de la méthode EFD_EFMH pour différentes valeurs de θ pour Cas 1.

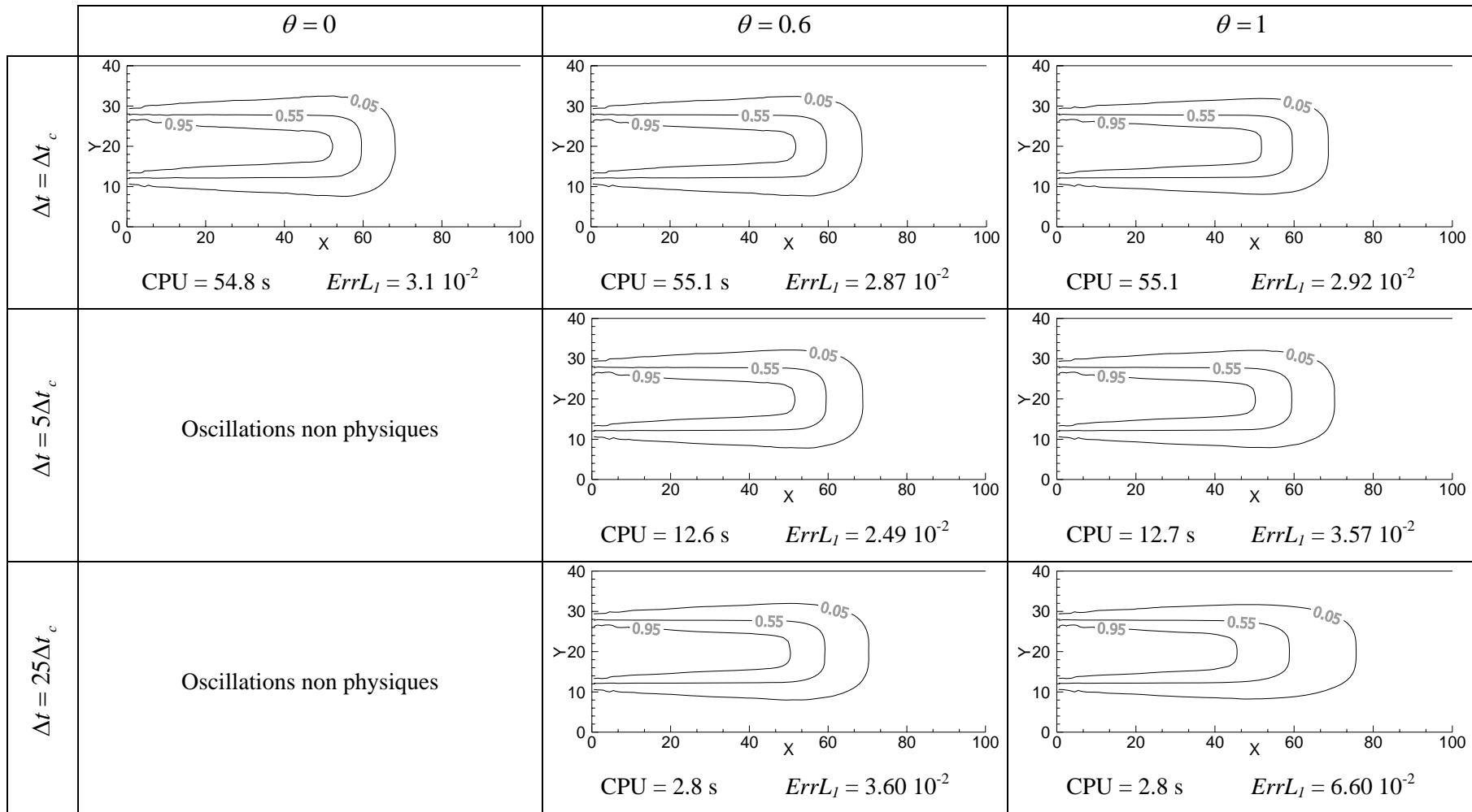


Figure 3.3 : Profils d'isoconcentrations, erreurs et temps de calcul CPU obtenus à l'aide de la méthode EFD_EFMH pour différentes valeurs de θ pour Cas 2.

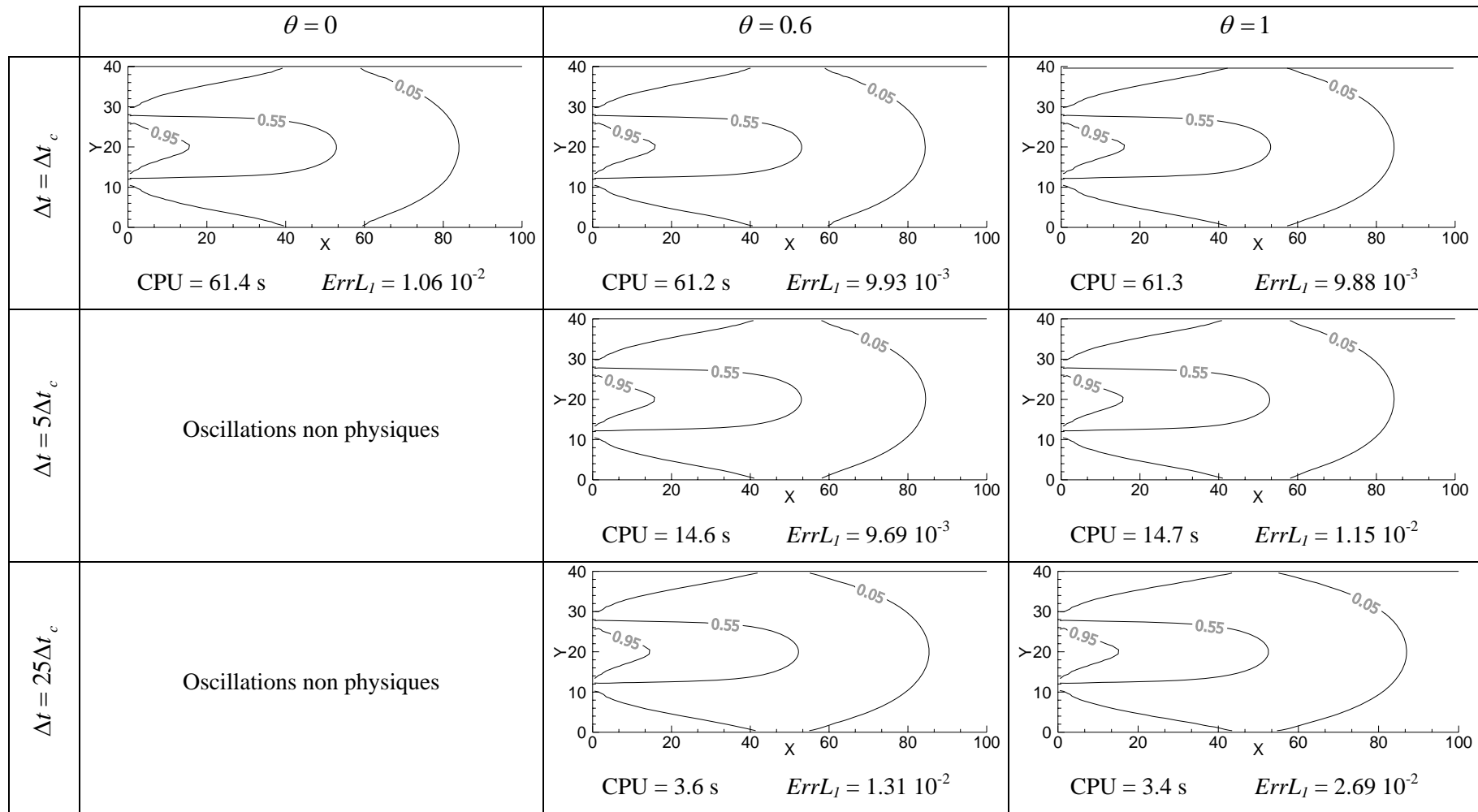


Figure 3.4 : Profils d'isoconcentrations, erreurs et temps de calcul CPU obtenus à l'aide de la méthode EFD_EFMH pour différentes valeurs de θ pour Cas 3.

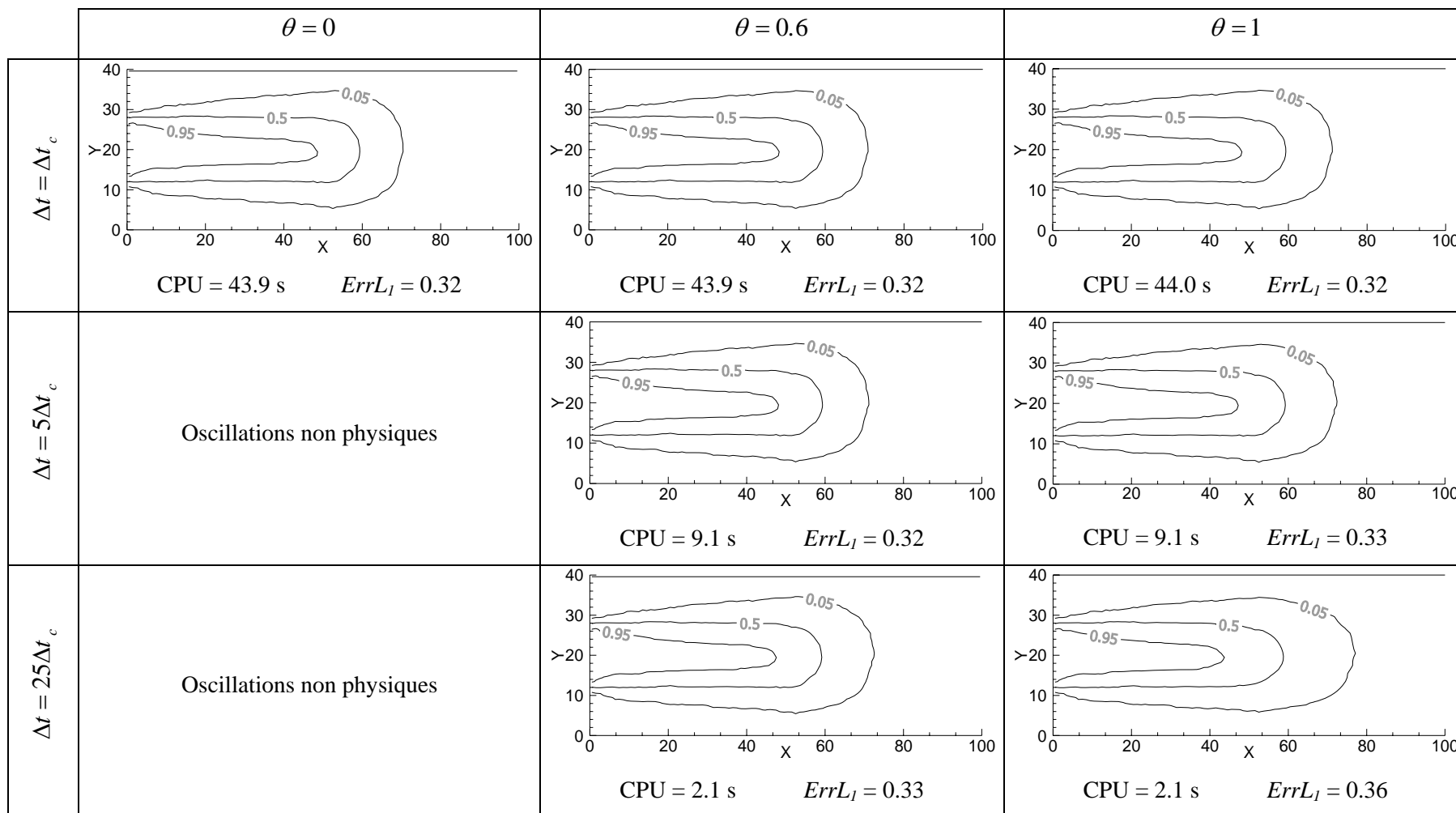


Figure 3.5 : Profils d'isoconcentrations, erreurs et temps de calcul CPU obtenus à l'aide de la méthode VF_EFMH pour différentes valeurs de θ et Cas 1.

Toutes les simulations sont effectuées en utilisant un solveur direct basé sur l'algorithme unifrontal/multifrontal (Davis et Duff, 1997). Ce solveur est inclus dans la librairie UMFPAK2.2. Les résultats des simulations effectuées à $T = 60$ [s] avec $\theta = 0$, $\theta = 0.6$ et $\theta = 1.0$ sont comparés avec ceux de la solution analytique (3.2) et cela pour différentes valeurs du nombre de Péclet.

Pour l'ensemble des simulations effectuées, nous adoptons successivement différents pas de temps ($\Delta t_c = 0.4s$, $5\Delta t_c$ et $25\Delta t_c$) afin de mieux comprendre le comportement de la classe des schémas semi-implicites et implicites. Les résultats obtenus sont représentés dans les figures 3.2-3.4. Ces figures donnent également le temps de calcul CPU et l'erreur relative Erreur L_1 définie par :

$$\text{Erreur } L_1 = \frac{\sum_{i=1}^{N_e} E_i \left| \bar{C}_i^{\text{calculée}} - \bar{C}_i^{\text{analytique}} \right|}{\sum_{i=1}^{N_e} E_i \bar{C}_i^{\text{analytique}}}. \quad (3.3)$$

Le tableau 3.2 donne les concentrations maximales des simulations numériques :

	$\theta = 0$	$\theta = 0.6$	$\theta = 1.0$	$\theta = 0$	$\theta = 0.6$	$\theta = 1.0$	$\theta = 0$	$\theta = 0.6$	$\theta = 1.0$
$\Delta t = \Delta t_c$	1.00	1.02	1.04	1.00	1.00	1.01	1.00	1.00	1.00
$\Delta t = 5 \Delta t_c$	-	1.05	1.06	-	1.02	1.02	-	1.00	1.00
$\Delta t = 25 \Delta t_c$	-	1.08	1.09	-	1.03	1.03	-	1.00	1.00
Cas	1			2			3		

Tableau 3.2 : Concentrations maximales obtenues à l'aide de la méthode des EFD_EFMH pour différentes valeurs de θ .

Nous déduisons que :

- Les trois schémas ($\theta = 0$, $\theta = 0,6$ et $\theta = 1$) donnent de bons résultats ainsi que de faibles erreurs quand le plus petit pas de temps est employé ($\Delta t = \Delta t_c$).
- Les deux schémas temporels semi-implicite ($\theta = 0.6$) et implicite ($\theta = 1$) ne dépendent pas du critère de CFL global. Cependant, ils génèrent de la diffusion numérique pour de grands pas de temps.

Cette diffusion numérique est mise en évidence pour le premier cas dominé par la convection.

- Les deux schémas ($\theta=0.6$) et ($\theta=1$) consomment des temps de calcul CPU similaires. Par contre le schéma semi-implicite ($\theta=0.6$) est moins diffusif que le schéma implicite ($\theta=1$). Nous remarquons dans ce sens que l'erreur introduite par le schéma semi-implicite est, dans la majorité des cas, inférieure à celle introduite par le schéma implicite.
- Le schéma semi-implicite utilisé avec un pas de temps égal à $5\Delta t_c$ donne des profils d'isoconcentrations similaires au schéma explicite ($\theta=0$) utilisé avec un pas de temps égal à $\Delta t = \Delta t_c$. Les erreurs obtenues sont également légèrement inférieures. Concernant les temps de calcul, ils sont réduits par un facteur 4.
- Dans le cas où le pas de temps est égal à $25\Delta t_c$, les résultats obtenus par le schéma semi-implicite sont moins satisfaisants que ceux obtenus dans le cas précédent pour le premier et le second cas. Pour le troisième cas, où la dispersion physique devient prépondérante, les profils d'isoconcentrations sont identiques à ceux obtenus dans le cas explicite. Le temps de calcul est réduit par un facteur 10 dans ce cas. Nous concluons alors que pour les schémas semi-implicites, le pas de temps à adopter résulte d'un compromis précision-temps de calcul.

La concentration maximale des solutions numériques est notée dans le tableau 3.2. Nous remarquons que malgré l'utilisation de la technique de limitation de pente pour les schémas semi-implicite et implicite, de légères oscillations apparaissent pour les pas de temps $5\Delta t_c$ et $25\Delta t_c$. Quand elles sont présentes, ces oscillations sont du même ordre de grandeur pour les deux schémas et leurs amplitudes sont inversement proportionnelles à la valeur de la dispersion physique. Dans le cas dispersif (cas 3), la dispersion physique permet de lisser la solution numérique obtenue. Ceci permet donc de compenser la perte de monotonie caractérisant la combinaison des EFD avec la classe des schémas semi-implicites.

Une formulation volumes finis du modèle précédent peut être facilement obtenue en supprimant la seconde et la troisième équations du système (3.1) pour chaque élément du maillage. Dans ce cas particulier, le problème est résolu avec une seule inconnue globale qui est la concentration moyenne par élément. Nous obtenons alors le schéma des volumes finis amonts standard utilisé pour la résolution du terme convectif. Le cas convectif (cas 1) est simulé à l'aide du schéma VF_EFMH. Les comparaisons entre les figures 3.2 et 3.5 montrent

que, et contrairement à la méthode EFD_EFMH, les VF_EFMH introduisent une diffusion numérique plus importante pour les trois valeurs de θ .

Nous concluons alors que le schéma semi-implicite ($\theta = 0.6$) utilisé avec la méthode des EFD constitue une alternative intéressante aux schémas explicites traditionnels pour des maillages triangulaires fortement déstructurés. Les expériences numériques montrent que cette classe de schémas permet de s'affranchir du critère de stabilité du nombre de Courant sur les pas de temps. En plus la diffusion numérique introduite reste largement inférieure à celle développée par les schémas implicites. Cependant pour des pas de temps relativement grands, de légères oscillations non-physiques peuvent toujours apparaître malgré l'utilisation d'une procédure de limitation de pente. Pour les transports dispersifs, la dispersion physique a tendance à venir compenser la diffusion numérique en lissant la solution. Les oscillations non-physiques sont de ce fait supprimées et l'erreur introduite dans ce cas est moins importante.

Nous présentons dans la section suivante une autre classe de discrétisation temporelle qui permet de réduire le temps de calcul CPU tout en supprimant les oscillations numériques même pour des transports convectifs purs.

3.3. Résolution de l'équation de convection par une classe de schémas explicites multi-domaines en temps

3.3.1 Généralités

Dans cette section, nous explorons une deuxième classe de schémas temporels. Jusqu'à présent, nous avons toujours considéré des schémas Eulériens explicites, implicites ou semi-implicites pour lesquels le pas de temps adapté est le même dans l'ensemble du domaine physique. Nous nous intéressons dans cette partie aux schémas multi-domaines en temps. L'idée principale consiste à utiliser des pas de temps différents dans différentes régions de l'espace et cela en fonction des conditions locales (dimensions du maillage et conditions hydrodynamiques).

Hughes et Liu (1978) sont parmi les premiers à avoir combiner les schémas multi-domaines en temps avec la méthode des éléments finis dans le cas de la dynamique des structures. Le domaine physique est alors partagé en deux sous-domaines dont l'un est explicite en temps et l'autre implicite en temps : selon un schéma de type prédiction-correction, les éléments appartenant à la zone explicite sont calculés

plusieurs fois au départ et les valeurs obtenues à l'issue de l'étape de correction sont utilisées par la suite comme conditions initiales par la procédure implicite agissant sur le reste des éléments (Liu et Belytschko, 1982 ; Liu *et al.*, 1984).

Une autre catégorie de schémas multi-domaines en temps est celle des schémas explicites à pas de temps local largement utilisée dans des applications diverses en ingénierie. L'idée principale consiste à considérer la condition CFL d'un point de vue local plutôt que d'un point de vue global. En électronique par exemple, Fumeaux *et al.* (2004) proposent un schéma intéressant pour la modélisation des équations de Maxwell en 2-D. L'idée consiste à découper le domaine en régions qui nécessitent des pas de temps locaux et qui sont en puissance de 2 du plus petit pas de temps. Il s'agit ensuite de résoudre l'équation de transport dans chaque région avec le pas de temps local correspondant. Cette procédure permet un gain en temps de calcul très important. Les schémas explicites multi-domaines sont utilisés aussi pour résoudre des problèmes de conservation en régime stationnaire. Les expériences numériques, (Zhou et Zhu, 1983 ; Frink, 1992) par exemple, montrent que le fait de permettre à chaque élément du maillage de prendre un pas de temps local accélère la convergence vers la solution stationnaire.

Pour les solutions transitoires de l'équation linéaire de convection, une discrétisation multi-domaines optimale doit non seulement améliorer le temps de calcul mais aussi maintenir les propriétés numériques du schéma sur lequel elle est basée (stabilité, conservation de la masse et bonne approximation du front de discontinuité). La particularité des flux numériques amonts doit être également prise en compte. Osher et Sanders (1983) sont les premiers à proposer une discrétisation temporelle explicite basée sur la condition de CFL local pour l'équation linéaire de convection. La stabilité et la convergence du schéma sont démontrés théoriquement dans le cas monodimensionnel en utilisant une discrétisation spatiale de type volumes finis de premier ordre. Dawson (1995) présente une amélioration de la technique précédente en l'appliquant à des schémas volumes finis d'ordre supérieur et en y intégrant des corrections à l'aide des limiteurs de pentes. Une discrétisation temporelle explicite d'ordre deux en temps y est également examinée (Dawson et Kirby, 2001). Le principe du maximum discret est démontré (Kirby, 2001) et les résultats numériques montrent la stabilité et la robustesse du schéma proposé en une et deux dimensions (Kirby, 2000).

Nous proposons dans cette section un schéma explicite multi-domaines en temps compatible avec les EFD en 2-D pour la résolu-

tion de l'équation de convection linéaire. Nous présentons plusieurs expériences numériques permettant d'évaluer les performances de cette procédure dans le cas d'éléments triangulaires fortement dés-structurés.

Signalons enfin que d'autres techniques de raffinement en temps sont développées pour les EFD. En 1-D, nous citons particulièrement la méthode de décomposition de domaines espace-temps (Lowrie *et al.*, 1998) qui se base sur une formulation variationnelle mixte en temps et en espace. Cependant, cette méthode n'a pas été examinée dans le cadre de notre étude car son extension en dimensions supérieures n'est pas intéressante à cause d'une part du besoin important en mémoire informatique, et d'autre part de la génération plus complexe d'un maillage espace-temps. En 2-D, Flaherty *et al.* (1997) proposent un schéma à pas de temps local pour les écoulements transitoires des fluides parfaits compressibles basé sur un processus d'interpolation. Cette technique ne peut pas être appliquée à l'équation linéaire de convection car elle n'est pas conservative (Kirby, 2000).

3.3.2 Formulation mathématique des schémas explicites multi-domaines en temps

Dans ce qui suit, nous exposons la formulation pour un maillage triangulaire. La discrétisation spatiale de l'équation de convection se fait avec la méthode des EFD et la famille des fonctions de base définies par (2.43). Les inconnues du problème sont la moyenne de la concentration dans l'élément E et ses gradients dans les différentes directions de l'espace (Ox et Oy).

Nous rappelons que le CFL est défini sur chaque maille E en 2-D par (Putti *et al.*, 1990) :

$$(CFL)_E = \frac{\sum_{j=1}^3 |Q_j^E|}{2|E|} \Delta t_E \quad (3.4)$$

où Q_j^E sont les flux d'eau à travers chacune des facettes Γ_j et $|E|$ la surface de la maille E .

La combinaison des EFD avec une discrétisation temporelle explicite du premier ordre (schéma d'Euler) donne des solutions stables si $CFL \leq 0.5$. Les schémas explicites classiques adoptent un pas de

temps unique Δt_A dans l'ensemble du domaine de calcul. Ce pas de temps global est limité par une valeur critique Δt_c définie par :

$$\Delta t_A \leq \Delta t_c = \min_E \left(\frac{|E|}{\sum_{j=1}^3 |Q_j^E|} \right) \quad (3.5)$$

Il est évident d'après l'équation (3.5), que dans des cas pratiques où le maillage est raffiné localement et/ou les vitesses sont importantes, de très faibles valeurs de Δt_c sont alors nécessaires.

Les schémas explicites multi-domaines se basent sur le principe d'une redistribution des éléments du maillage en différentes zones où différents pas de temps locaux sont utilisés en respectant cette fois une condition de stabilité locale (3.6) :

$$\Delta t_E \leq \frac{|E|}{\sum_{j=1}^3 |Q_j^E|} \quad (3.6)$$

Les concentrations inconnues des différentes mailles E sont alors calculées en utilisant des incréments de pas de temps différents. La procédure explicite à pas de temps local que nous présentons dans cette section est bien adaptée aux schémas numériques amonts. Elle constitue une extension au travail présenté dans Osher et Sanders (1983) pour les EFD.

Au départ nous illustrons la méthode pour deux sous-domaines en temps. Le domaine physique Ω est divisé en deux zones distinctes Z_1 et Z_2 . Soit Δt_k ($k=1, \dots, 2$) le pas de temps local qui satisfait la contrainte de CFL local dans la zone Z_k . Nous supposons l'existence d'un entier positif L tel que $\Delta t_1 = L\Delta t_2$, et nous construisons la séquence $\{\eta_k\}_{k=0}^{L-1}$ définie par :

$$\begin{cases} \eta_0 = 0 \\ \eta_k = \frac{k}{L}, k \in \{1, \dots, L-1\} \end{cases} \quad (3.7)$$

Soit p le nombre d'éléments voisins d'un élément E appartenant à la même zone que celle de l'élément E (même pas de temps local). Les éléments de la zone Z_2 (zone avec le plus petit pas de temps local) sont au départ calculés L fois avec leur propre pas de temps Δt_2 comme suit :

- appliquer la méthode des EFD (2.38) modifiée suivante :

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{E \in Z_2}^{n+\eta_k} = & \left(I + \Delta t_2 [A]^{-1} [B] \right) C_{E \in Z_2}^{n+\eta_k-1} - \Delta t_2 [A]^{-1} [M^0] C_{E \in Z_2}^{n+\eta_k-1} \\ & - \Delta t_2 \sum_{j=1}^p [A]^{-1} [M^j] C_{E_j \in Z_2}^{n+\eta_k-1} - \Delta t_2 \sum_{j=p+1}^3 [A]^{-1} [M^j] C_{E_j \in Z_1}^n \end{aligned} \quad (3.8)$$

- calculer les nouvelles valeurs $C_{E \in Z_2}^{n+\eta_k}$ en limitant les valeurs moyennes $\tilde{C}_{E \in Z_2}^{n+\eta_k}$ et en utilisant les valeurs moyennes $\bar{C}_{E \in Z_2}^{n+\eta_k}$ et $\bar{C}_{E \in Z_1}^n$

$$C_{E \in Z_2}^{n+\eta_k} = \mathfrak{I}(\tilde{C}_{E \in Z_2}^{n+\eta_k}, \bar{C}_{E \in Z_2}^{n+\eta_k}, \bar{C}_{E \in Z_1}^n) \quad (3.9)$$

où \mathfrak{I} est l'opérateur de limitation de pentes.

Les concentrations inconnues de la zone Z_1 sont calculées comme suit :

- appliquer la méthode des EFD :

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{E \in Z_1}^{n+1} = & \left(I + \Delta t_1 [A]^{-1} [B] \right) C_{E \in Z_1}^n \\ & - \Delta t_1 [A]^{-1} [M^0] C_{E \in Z_1}^n - \Delta t_1 \sum_{j=1}^p [A]^{-1} [M^j] C_{E_j \in Z_1}^n \\ & - \Delta t_1 \sum_{j=p+1}^3 [A]^{-1} [M^j] \left(\frac{1}{L} \sum_{k=0}^{L-1} C_{E_j \in Z_2}^{n+\eta_k} \right) \end{aligned} \quad (3.10)$$

- calculer les nouvelles valeurs $C_{E \in Z_1}^{n+1}$ en limitant les valeurs moyennes $\tilde{C}_{E \in Z_1}^{n+1}$ et en utilisant les valeurs moyennes $\bar{C}_{E \in Z_2}^{n+\eta_L}$ et $\bar{C}_{E \in Z_1}^{n+1}$

$$C_{E \in Z_1}^{n+1} = \mathfrak{I}(\tilde{C}_{E \in Z_1}^{n+1}, \bar{C}_{E \in Z_1}^{n+1}, \bar{C}_{E \in Z_2}^{n+\eta_L}) \quad (3.11)$$

Pour résumer, la procédure proposée consiste à calculer au départ les inconnues des éléments utilisant le plus petit pas de temps (L fois). Ces valeurs sont ensuite moyennées le long des facettes séparant deux régions différentes, puis utilisées d'une manière appropriée par les éléments utilisant le plus grand pas de temps afin d'assurer la conservation du schéma numérique.

Dans le cas des éléments finis discontinus de Galerkin, nous remarquerons que deux points majeurs les différencient du schéma standard volumes finis présenté dans Sboui et Jaffré (2006) et Sboui (2007) :

- un terme supplémentaire (le second terme) apparaît dans la formulation variationnelle (2.31) ;
- l'intégrale (2.34) le long de la facette Γ_j (la facette commune aux éléments E et E_j) est différente selon que la formulation variationnelle est appliquée sur la maille E ou la maille E_j .

La procédure détaillée ci-dessus pour deux zones peut être généralisée pour plusieurs zones. Pour cela nous commençons par fixer le pas de temps total Δt_D . Ce pas de temps est celui utilisé par la méthode de résolution de la partie diffusive de l'équation de transport qui est, rappelons le, implicite en temps.

Le plus petit pas de temps Δt_s est défini par : (i) Δt_s est plus petit ou égal au pas de temps critique Δt_c défini par (3.5) et (ii) Δt_s est le plus grand pas de temps tel que Δt_D est un K -multiple entier de Δt_s :

$$\begin{cases} \Delta t_s \leq \Delta t_c \\ \Delta t_s = \max_{m>0} \left(\frac{\Delta t_D}{K^{m-1}} \right) \end{cases} \quad (3.12)$$

Le pas de temps local dans chaque élément E sera alors un K -multiple de Δt_s :

$$\Delta t_E = K^{\ell-1} \Delta t_s \quad (3.13)$$

avec $\ell > 0$ le plus grand entier qui satisfait localement la relation suivante :

$$K^{\ell-1} \Delta t_s \leq \left(\frac{|E|}{\sum_{j=1}^3 |Q_j^E|} \right) \quad (3.14)$$

Les éléments sont ensuite regroupés dans Z_ℓ zones différentes utilisant chacune son propre pas de temps local $K^{\ell-1} \Delta t_s$. Pour éviter un contraste énorme entre les différents pas de temps, nous adoptons $K=2$ (Fumeaux *et al.*, 2004).

Une fois ce regroupement effectué, un ordonnancement des différentes zones est nécessaire afin de définir la séquence de calculs qui va conditionner l'ensemble des éléments du maillage. Un ordonnancement pour les écoulements transitoires des fluides parfaits compressibles a été proposé par Remacle *et al.* (2001) et est basé sur des processus d'interpolation. Une autre construction a été présentée dans Piperno (2006) utilisant une discrétisation explicite basée sur un schéma de type leap-frog. La séquence présentée est compatible avec des flux centrés pour résoudre les équations d'ondes en électromagnétisme. Cependant, ces deux procédures ne sont pas conservatives dans le cas du transport convectif des contaminants en milieu poreux. La technique que nous présentons dans ce qui suit est conservative. Elle inclut des coordinations appropriées entre les différentes zones et évite toute sortes d'interpolation.

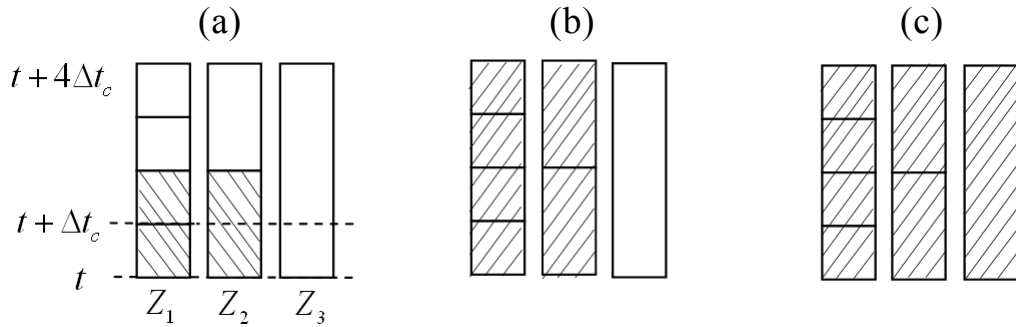


Figure 3.6 : Séquence d'ordonnancement d'un schéma à pas de temps local pour $\ell_{\max} = 3$.

A titre d'exemple, considérons le cas de 3 zones différentes Z_l ($l=1, \dots, 3$). Le plus grand pas de temps local est alors égal à $4\Delta t_s$.

pour la zone Z_3 . Les concentrations des éléments de la zone Z_1 sont tout d'abord calculées en deux fois ($K = 2$) avec leur pas de temps local Δt_1 . Les concentrations des éléments appartenant à la zone Z_2 sont ensuite calculées en utilisant les valeurs de la zone Z_1 (figure 3.6a) ainsi que les valeurs au temps t de la zone Z_3 . Cette même procédure est répétée encore une fois (figure 3.6b) et finalement les concentrations des éléments de la zone Z_3 sont déterminées (figure 3.6c). Pour résumer, la séquence finale qui permet de réordonner l'ensemble des zones entre t et $t + 4\Delta t_s$ est donc :

$$S_3 = \{Z_1, Z_1, Z_2, Z_1, Z_1, Z_2, Z_3\}, \quad (3.15)$$

en notant que $S_2 = \{Z_1, Z_1, Z_2\}$.

Cette suite est exprimée par récurrence pour n zones par :

$$S_n = \{S_{n-1}, S_{n-1}, Z_n\}, \text{ avec } \begin{cases} S_1 = Z_1, \\ n \geq 2 \end{cases} \quad (3.16)$$

3.3.3 Résultats numériques

Les avantages d'une combinaison des EFD amonts avec une discrétisation temporelle explicite multi-domaines sont illustrés à travers une série de trois cas tests. Des maillages triangulaires fortement déstructurés sont utilisés dans tous les exemples suivants. Les expériences numériques montrent que le schéma à pas de temps local permet de réduire le temps de calcul CPU de façon significative tout en conservant les principaux avantages du schéma traditionnel notamment la stabilité, la précision et la conservation de la masse.

Transport d'un contaminant dans un champ d'écoulement uniforme

Dans ce premier cas test, nous considérons le problème du transport de contaminants dans un champ d'écoulement uniforme (figure 2.2). Le maillage triangulaire raffiné localement (figure 3.1) est utilisé et les trois types de transport différents (tableau 3.1) sont étudiés.

Pour l'ensemble des simulations effectuées, nous avons $\Delta t_s = 0.0375$ [s] et $\Delta t_D = 0.6$ [s]. Pour la discrétisation temporelle basée sur le schéma explicite global, tous les éléments prennent un pas de temps unique Δt_s pour la partie convective. Pour la discrétisation

temporelle basée sur le schéma explicite local, les éléments sont regroupés d'après les relations (3.12)-(3.14) dans cinq zones suivant leur pas de temps local (figure 3.7). Chaque élément du maillage adoptera alors soit le pas de temps Δt_s , soit un autre pas de temps qui sera selon les conditions locales $2^0, 2^1, \dots, 2^4$ plus important.

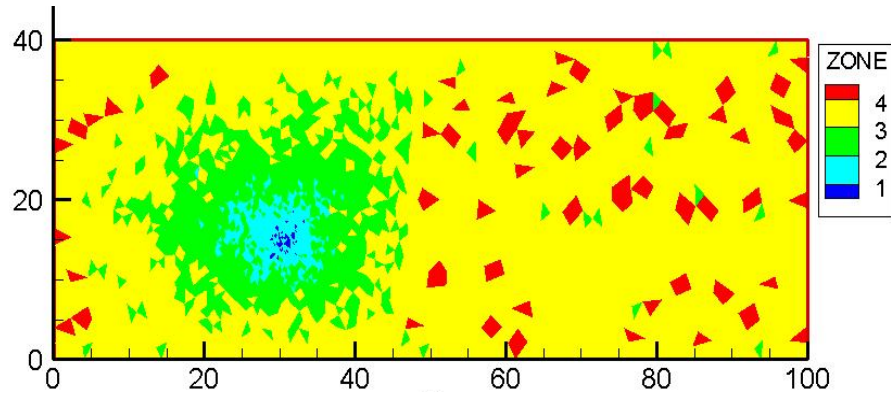


Figure 3.7 : Regroupement des éléments en 5 zones différentes dans le cas d'un champ d'écoulement uniforme.

Nous nous intéressons à la solution calculée à l'instant $T = 60$ [s]. Les résultats obtenus avec les deux schémas explicites global et local sont comparés avec ceux de la solution analytique. Le transport est convectif dominant dans le premier cas. La figure 3.8 montre que le front de discontinuité est bien approximé avec les deux schémas qui ne présentent pas d'oscillations non physiques. Les profils longitudinaux de la figure 3.9 à $y=15$ [m] montrent que paradoxalement, le schéma global développe plus de diffusion numérique que le schéma local. Ce point est étudié plus en détail dans le cas test suivant. Notons finalement que pour le deuxième et le troisième cas (la dispersion physique devient relativement prépondérante par rapport à la convection), les distributions des concentrations ainsi que les profils longitudinaux à $y=15$ [m] et transversaux à $x=40$ [m] des solutions analytiques et numériques sont identiques (figures 3.10-3.13).

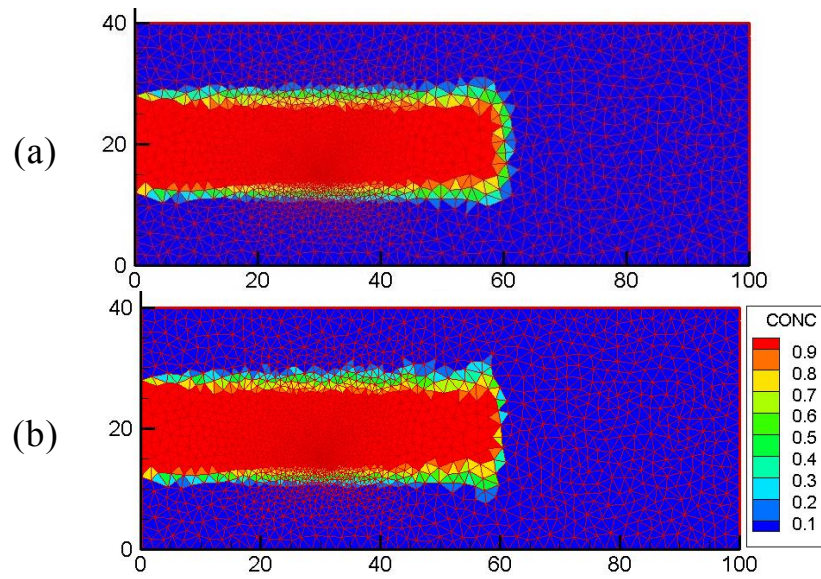


Figure 3.8 : Distributions de concentrations obtenues par le schéma EFD_EFMH et une discrétisation explicite (a) globale et (b) locale pour Cas 1.

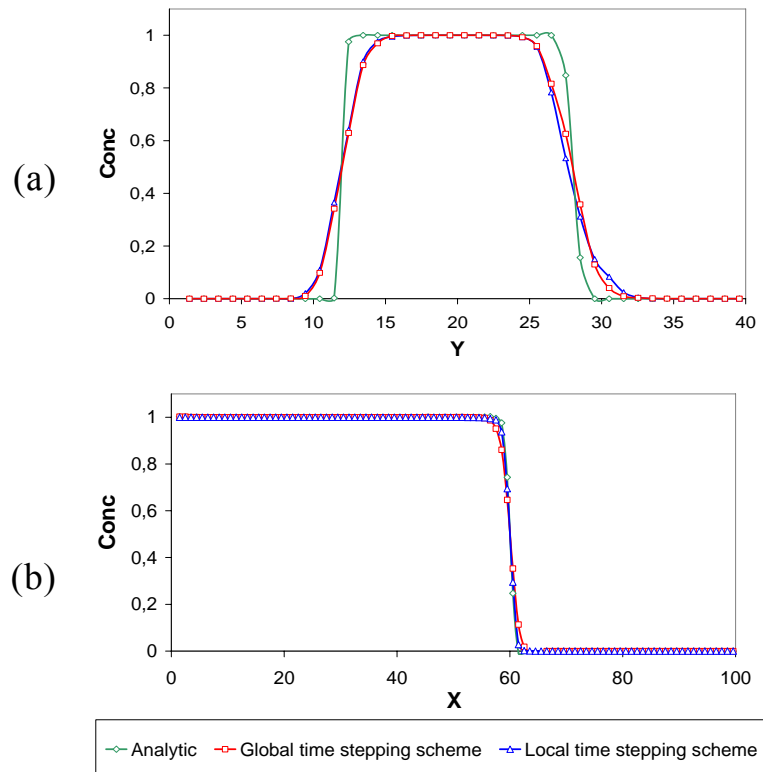


Figure 3.9 : Profils transversaux (a) et longitudinaux (b) obtenus par le schéma EFD_EFMH et une discrétisation explicite globale et locale pour Cas 1.

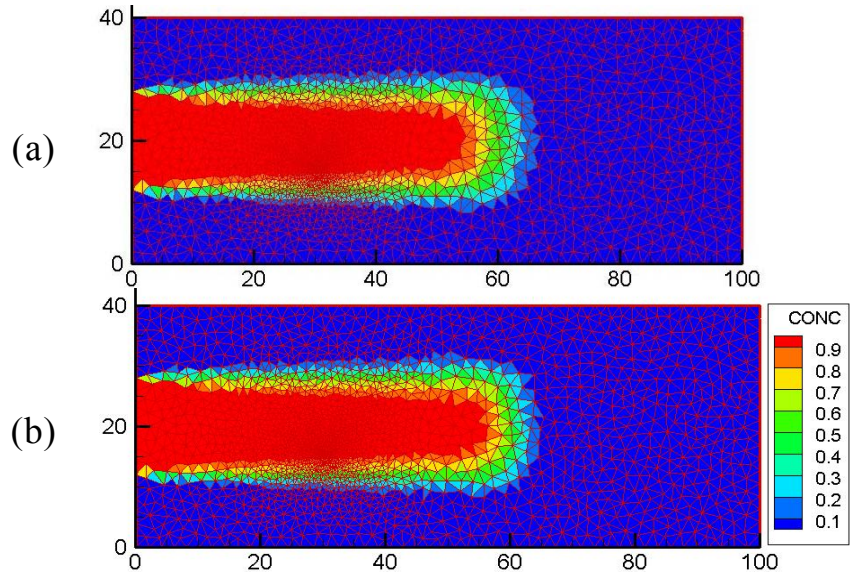


Figure 3.10 : Distributions de concentrations obtenues par le schéma EFD_EFMH et une discrétisation explicite (a) globale et (b) locale pour Cas 2.

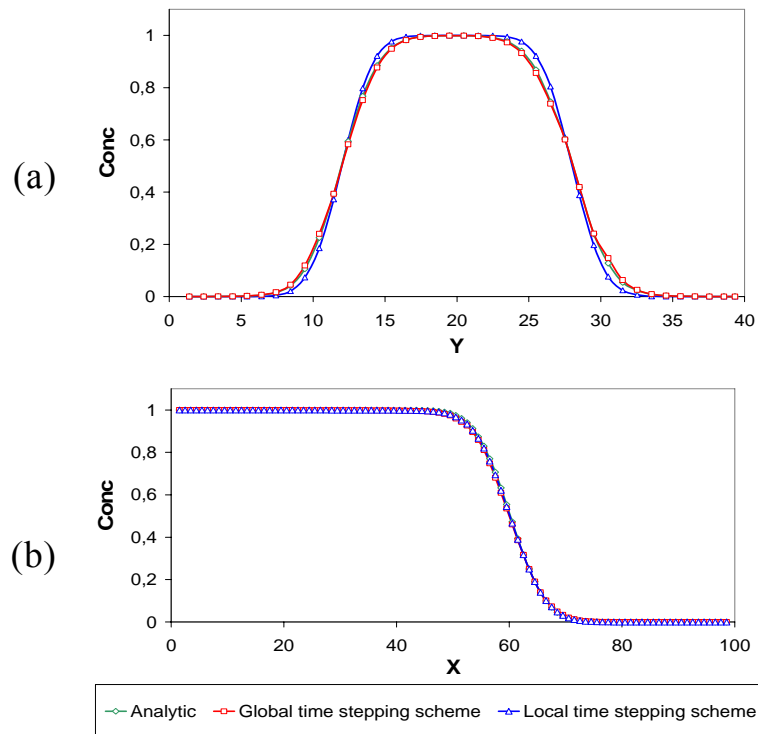


Figure 3.11 : Profils transversal (a) et longitudinal (b) obtenus par le schéma EFD_EFMH global et local pour Cas 2.

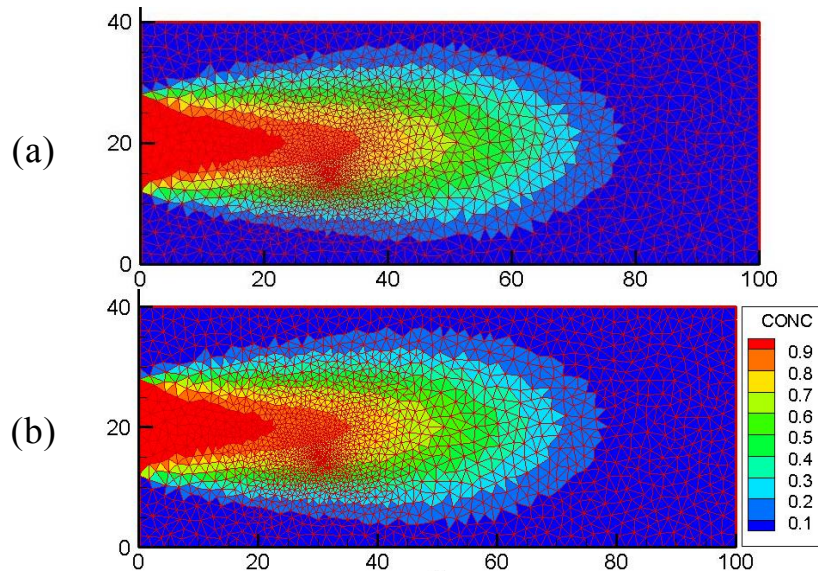


Figure 3.12 : Distributions de concentrations obtenues par le schéma EFD_EFMH et une discrétisation explicite (a) globale et (b) locale pour Cas 3.

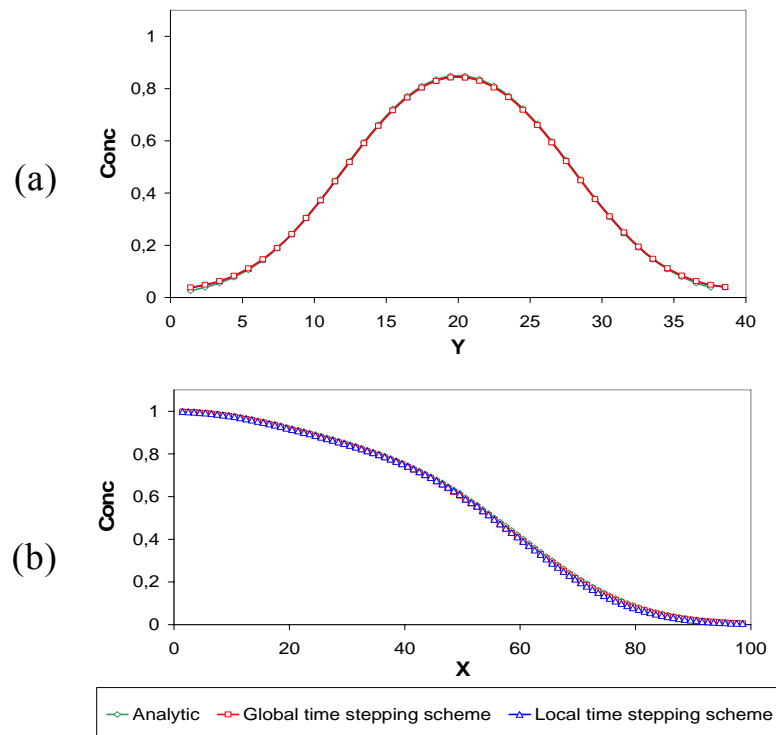


Figure 3.13 : Profils transversal (a) et longitudinal (b) obtenus par le schéma EFD_EFMH global et local pour Cas 3.

		Erreur RMS	Erreur Max.	Gain en temps CPU
Cas 1	GT	$1.60 \cdot 10^{-3}$	0.55	3.8
	LT	$1.66 \cdot 10^{-3}$	0.53	
Cas 2	GT	$3.01 \cdot 10^{-4}$	0.18	3.8
	LT	$3.80 \cdot 10^{-4}$	0.18	
Cas 3	GT	$6.81 \cdot 10^{-5}$	$9.45 \cdot 10^{-2}$	3.7
	LT	$7.83 \cdot 10^{-5}$	$9.02 \cdot 10^{-2}$	

GT: Schéma explicite global
 LT: Schéma explicite local

Tableau 3.3 : Erreurs et temps CPU obtenus dans le cas du transport dans un champ d'écoulement uniforme.

Le tableau 3.3 montre que les erreurs obtenues avec les deux discrétisations explicites sont approximativement du même ordre. Les deux schémas numériques sont conservatifs car ils assurent un bilan de masse exact. Nous rappelons que l'erreur max. est donnée par :

$$\text{Erreur max.} = \max_i \left| \overline{C}_i^{\text{calculée}} - \overline{C}_i^{\text{analytique}} \right| \quad (3.17)$$

Le gain en temps de calcul CPU qui constitue la propriété essentielle des schémas explicites multi-domaines est également étudié pour ce cas test. Ce gain peut être estimé en fonction du nombre de calculs effectués pendant un pas de temps de dispersion complet Δt_D . Pour le schéma explicite global, le nombre total de calculs N_G est :

$$N_G = nN_e \quad \text{avec} \quad N_e = \sum_i N_{Ei} \quad (3.18)$$

où N_{Ei} le nombre d'éléments dans la zone Z_i et n un entier qui satisfait $\Delta t_D = n\Delta t_s$ (Δt_s étant le plus petit pas de temps défini par (3.12)).

Pour le schéma explicite local, le nombre total de calculs N_L est :

$$N_L = n \sum_i N_{Ei} / K^{i-1} \quad (3.19)$$

avec $K = 2$ dans notre cas (voir (3.12) à (3.14)).

Le gain *théorique* en temps de calcul de la méthode à pas de temps local est défini alors par :

$$\frac{N_G}{N_L} = \sum_i N_{Ei} / \sum_i (N_{Ei} / K^{i-1}) \quad (3.20)$$

Le gain *réel* par contre n'est autre que le quotient des deux temps de calcul obtenus respectivement par les deux discrétisations explicites globale et locale. Le gain *réel* ne peut qu'être inférieur au gain *théorique*. Idéalement ces deux gains sont égaux, ceci dépend essentiellement de l'efficacité du code de calcul écrit. Le tableau 3.3 donne le gain réel en temps de calcul obtenu avec le schéma explicite local avec 5 zones différentes. Le gain réel moyen pour les 3 cas simulés est de 3.76 ; le gain théorique étant égal à 4.1 pour cet exemple.

Nous nous sommes intéressés également à l'évolution du gain réel en fonction du nombre de zones. La figure 3.14 montre une amélioration continue du gain en temps de calcul quand le nombre de zones augmente. Une augmentation du nombre de zones est plus significative au départ, l'avantage du schéma explicite local est plus important quand nous passons de 2 à 3 zones que si nous passons de 4 à 5 zones. Nous remarquons enfin que ce gain converge. Pour le cas test étudié, le gain maximum que nous pouvons atteindre avec une discrétisation explicite multi-domaines est égal à 4. Il est atteint avec 4 zones.

Les expériences numériques effectuées dans le cadre de ce premier cas test avec un maillage localement raffiné montrent que la combinaison des schémas amonts avec une procédure explicite locale en temps produit un schéma qui est stable, efficace et conservatif. Ce schéma permet de réduire les temps de calcul CPU et son efficacité est validée pour un large intervalle du nombre de Péclet.

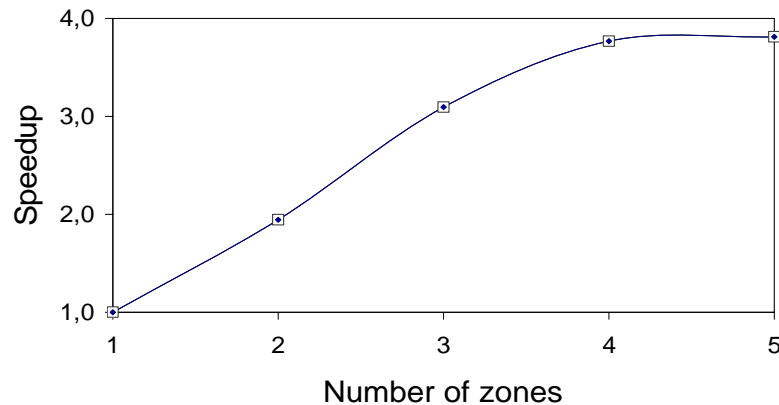


Figure 3.14 : Gain réel en temps CPU obtenu dans le cas du transport dans un champ d'écoulement uniforme.

Ce problème a déjà été traité dans la section précédente avec les schémas semi-implicites. Nous avons alors montré que le schéma semi-implicite avec ($\theta = 0.6$) utilisé avec un pas de temps égal à 5 fois Δt_c constituait une alternative intéressante au schéma explicite global. Nous cherchons à présent à comparer le schéma à pas de temps local avec le schéma semi-implicite ($\theta = 0.6$). Pour cela, les profils longitudinaux à $y=15$ [m] des deux schémas numériques sont comparés avec ceux de la solution analytique (figure 3.15). L'erreur maximale, l'erreur RMS, la concentration maximale ainsi que les temps de calcul CPU sont présentés dans le tableau 3.4 :

D'après ces résultats, nous pouvons établir les remarques suivantes :

- Le schéma explicite local diffuse moins numériquement pour le cas convectif dominant que le schéma semi-implicite. Pour les autres cas, la dispersion physique domine la diffusion numérique et les trois profils sont alors identiques.
- Pour l'ensemble des cas simulés, le schéma à pas de temps local ne présente pas d'oscillations non physiques (tableau 3.4) contrairement au schéma semi-implicite ($\theta = 0.6$).
- Les temps de calcul CPU consommés par les deux schémas, bien qu'ils soient du même ordre de grandeur, sont toujours légèrement inférieurs pour les schémas à pas de temps local. Notons aussi que les schémas multi-domaines en temps présentent un avantage majeur : en fonction du nombre de mailles dans chaque sous-domaines le gain en temps de calcul CPU peut être prévu approximativement à l'avance d'après l'équation (3.20) et la solu-

tion numérique conserve exactement les qualités de la solution obtenue avec le schéma explicite traditionnel.

- Notons finalement que les erreurs des deux schémas numériques sont similaires.

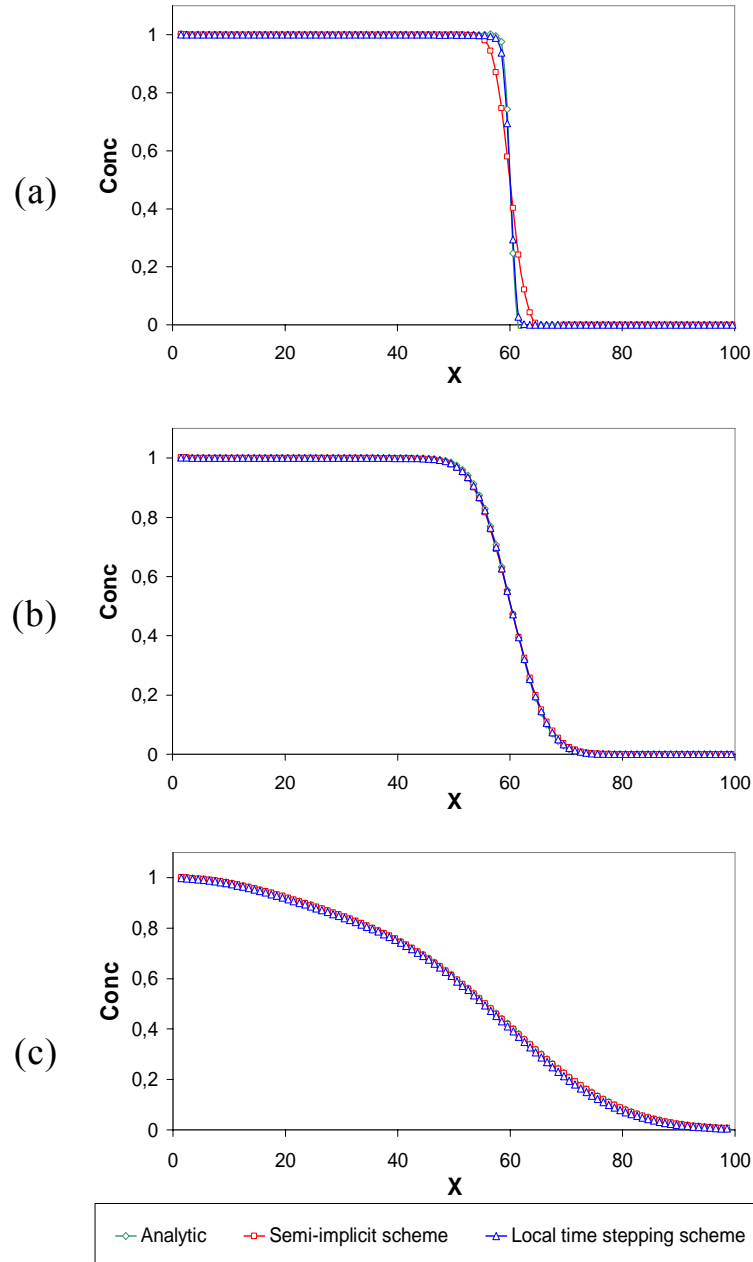


Figure 3.15 : Profils longitudinaux obtenus par le schéma EFD_EFMH et une discrétisation semi-implicite et explicite local (a) Cas 1 (b) Cas 2 (c) Cas 3.

		Erreur Max.	Erreur RMS	C. Max	Temps de calcul CPU
Cas 1	SI	0.56	$1.86 \cdot 10^{-3}$	1.05	10.9
	LT	0.53	$1.66 \cdot 10^{-3}$	1.00	10.5
Cas 2	SI	0.18	$3.81 \cdot 10^{-4}$	1.02	12.6
	LT	0.18	$3.80 \cdot 10^{-4}$	1.00	10.7
Cas 3	SI	$9.05 \cdot 10^{-2}$	$7.80 \cdot 10^{-5}$	1.00	14.6
	LT	$9.02 \cdot 10^{-2}$	$7.83 \cdot 10^{-5}$	1.00	11.7

SI: Schéma semi-implicite ($\theta = 0.6$)

LT: Schéma explicite local

Tableau 3.4 : Comparaison entre les schémas semi-implicite et explicite local dans le cas du transport dans un champ d'écoulement uniforme.

Nous préconisons alors l'utilisation des schémas explicites multi-domaines pour la discrétisation temporelle de l'équation de convection.

Le problème du transport d'une gaussienne

Ce problème a été également étudié dans le chapitre précédent. Ce test est, rappelons le, souvent utilisé dans la littérature scientifique pour évaluer la diffusion numérique des nouveaux schémas amonts de résolution des équations hyperboliques. Nous l'utilisons alors pour mieux quantifier la diffusion introduite par les schémas multi-domaines en temps.

Pour ce cas test, un maillage très fortement déstructuré est adopté (figure 3.16) ainsi qu'un champ de vitesse hétérogène dans l'espace. Cette vitesse est, rappelons le, minimale au centre du domaine et augmente avec la distance du centre. En fonction de ces deux caractéristiques, les mailles sont regroupées suivant 7 zones différentes comme l'indique la figure 3.16. Ce regroupement met en évidence deux zones particulières : la zone 1 (en bleu) regroupant les mailles utilisant le plus petit pas de temps et la zone 7 en rouge regroupant les mailles utilisant le plus grand pas de temps.

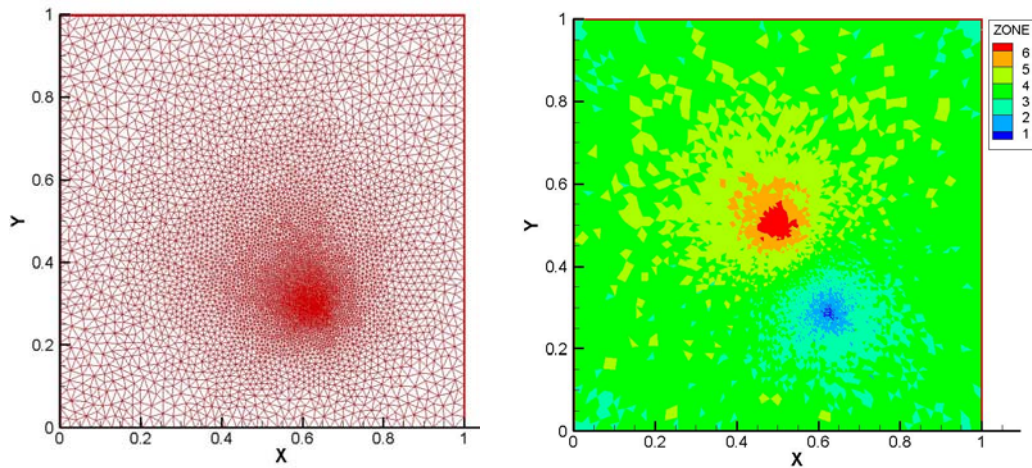


Figure 3.16 : Maillage fortement déstructuré et regroupement des éléments en 7 zones différentes dans le cas du transport d'une gaussienne.

Les résultats des différentes simulations sont représentés dans la figure 3.17. Le tableau 3.5 donne la valeur maximale de la concentration (calculée après un tour de révolution complet), l'erreur RMS et l'erreur maximale pour les schémas explicites local et global.

	C_{\max}	Erreur RMS	Erreur RMS	Gain en temps CPU
Schéma explicite global	0.74	9.8×10^{-5}	0.25	
Schéma explicite local	0.83	1.2×10^{-4}	0.32	4.0

Tableau 3.5 : Résultats obtenus dans le cas du transport d'une gaussienne.

La concentration initiale définie par l'équation (2.66) a une valeur minimale égale à 0 et un maximum égal à l'unité. Comme le coefficient de dispersion est négligeable, la solution analytique doit donc être confondue avec la solution initiale et doit avoir un maximum égal à l'unité (sa valeur calculée est égale à 0.9998). Les concentrations maximales obtenues avec les deux schémas après une rotation complète sont inférieures à celle obtenue par la solution analytique.

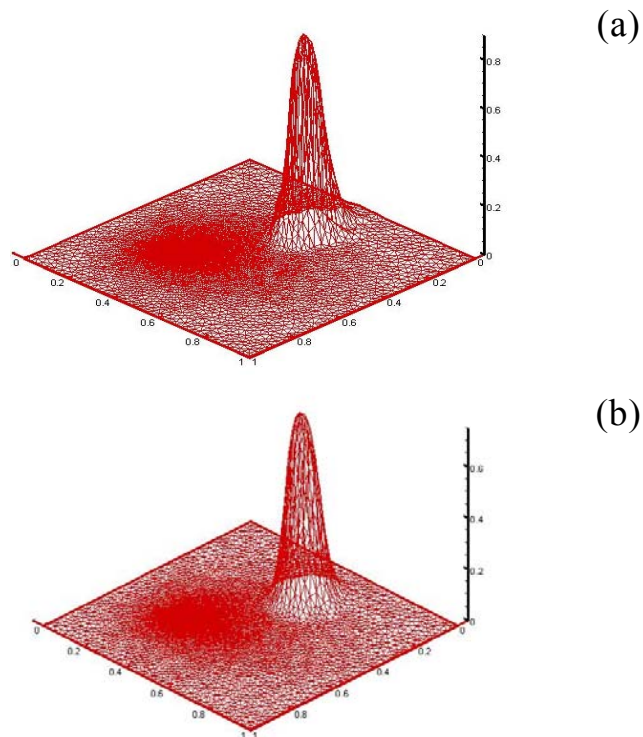


Figure 3.17 : Profil de la gaussienne après une rotation complète obtenus à l'aide du schéma explicite (a) local et (b) global.

Ceci est dû à la présence de diffusion numérique qui caractérise l'ensemble des méthodes eulériennes. Le tableau 3.5 montre que la valeur de la concentration maximale obtenue avec le schéma local est supérieure à celle obtenue par le schéma global. Nous concluons donc que les schémas explicites basés sur la condition CFL local sont moins diffusifs que ceux basés sur la condition globale. Cette propriété est due au nombre d'opérations numériques requises pour obtenir la solution finale. En effet, les EFD introduisent une légère diffusion numérique au niveau du front de discontinuités. Cette diffusion numérique est proportionnelle au nombre d'opérations numériques effectués. Pour le cas test étudié, la méthode des EFD combinée avec un schéma explicite local nécessite moins d'opérations numériques que le schéma classique. Ceci explique le fait que les résultats obtenus soient meilleurs que ceux obtenus avec les schémas classiques. Notons finalement que pour ce cas test, le gain réel en temps de calcul est d'environ 4 (le gain théorique étant égal à 4.9).

Transport d'un contaminant dans un champ d'écoulement non-uniforme : cas du double puits (injection et pompage)

Les problèmes de transport de contaminants impliquant des puits d'injection et/ou de pompage sont généralement caractérisés par un raffinement de la discrétisation spatiale au voisinage de ces puits pour obtenir une bonne approximation du champ de vitesse. Ce champ généré peut varier de plusieurs ordres de grandeur dans l'ensemble du domaine physique. Ces deux facteurs créent une variation spatiale considérable des pas de temps locaux, ce qui rend ce type de transport une "proie idéale" pour les schémas multi-domaines en temps.

Nous considérons à présent un problème de transport d'un contaminant dans un écoulement entre une source d'injection et un puits de pompage dans un milieu homogène (figure 3.18). Le domaine physique est un carré $\Omega = (0,1) \times (0,1)$ [m²] avec une source d'injection située au point d'origine (0,0) et un puits de pompage situé au point (1,1). Les débits de la source et du puits sont égaux en valeur absolue $Q_s = \pm 0.1$ [m³/jour] et la perméabilité uniforme est égale à $K = 10^{-4}$ [m/jour].

Pour ce problème de transport, le pas de temps dispersif a été fixé à $\Delta t_D = 0.0125$ [jours] alors que le pas de temps convectif est égal à $\Delta t_s = 4.9 \times 10^{-5}$ [jours]. Dans le cas du schéma à pas de temps local, les éléments sont regroupés dans 7 zones différentes (tableau 3.6).

A cause des petites mailles et des vitesses importantes au voisinage des puits, de très petits pas de temps sont nécessaires dans ces régions (figure 3.18). Le plus petit pas temps Δt_s est utilisé uniquement par les deux mailles contenant les puits d'injection/pompage (tableau 3.6). Les autres mailles du domaine utilisent des pas de temps locaux qui sont, au moins, 2 fois plus grands. Les simulations sont réalisées à l'instant $T = 2.5$ [jours] pour différentes valeurs du nombre de Péclet (tableau 3.7).

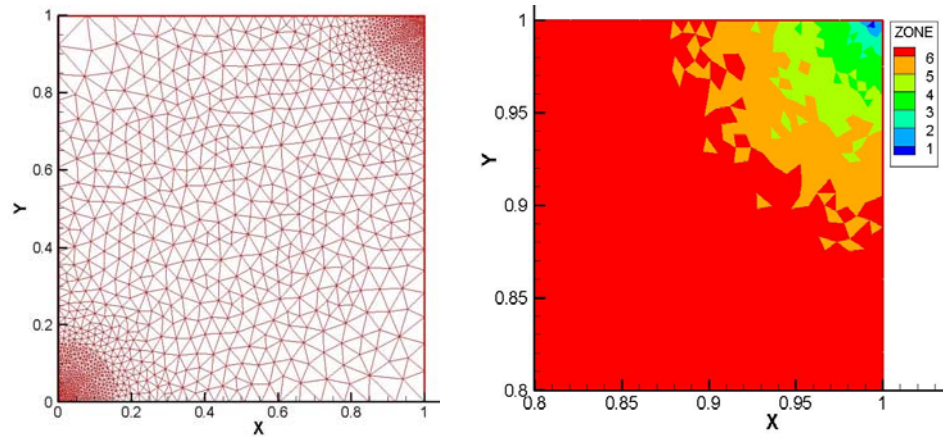


Figure 3.18 : Maillage fortement déstructuré et regroupement des éléments en 7 zones différentes dans le cas du double puits.

Index de la zone	1	2	3	4	5	6	7	8	9
K^{i-1}	1	2	4	8	16	32	64	128	256
N_{Ei}	2	12	38	132	233	412	480	203	1170

Tableau 3.6 : Nombre d'éléments par zone dans le cas du double puits.

En l'absence d'une solution analytique pour le problème abordé, les résultats du schéma explicite local sont comparés avec ceux du schéma explicite global. La figure 3.19 montre que les profils de concentration dans les trois cas étudiés sont similaires. La différence maximale entre les deux schémas n'excède pas les 1% dans la norme L1.

Cas	α_l	α_r	D_m	Pe
1	0.002	0.0001	0	[0.004,0.299]
2	0.02	0.001	0	[0.04,2.99]
3	0.2	0.01	0	[0.4,29.9]

Tableau 3.7 : Différentes valeurs du nombre de Péclet utilisées pour le problème du double puits.

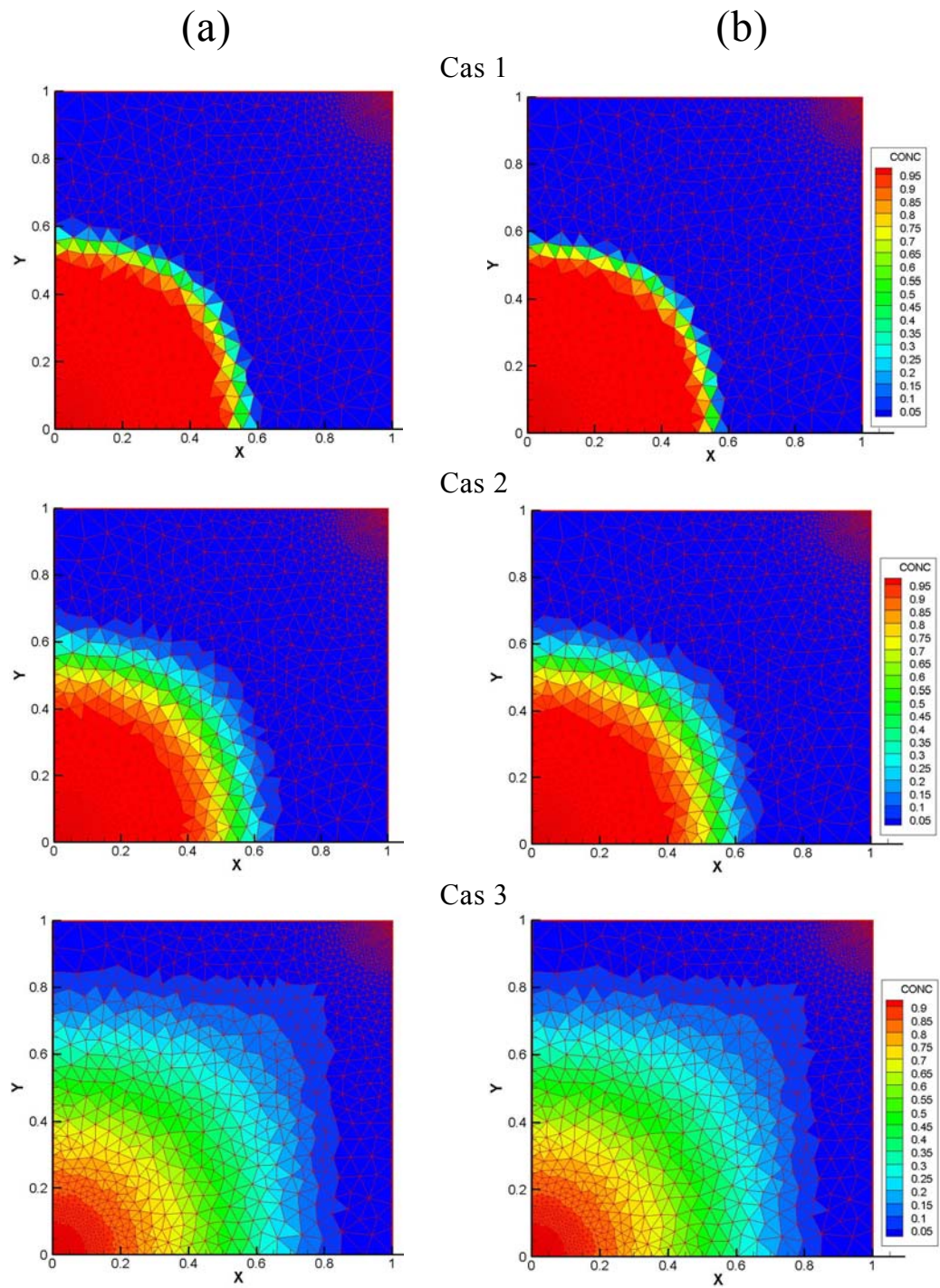


Figure 3.19 : Résultats obtenus par le schéma EFD_EFMH et une discrétisation explicite (a) globale et (b) locale dans le cas du double puits.

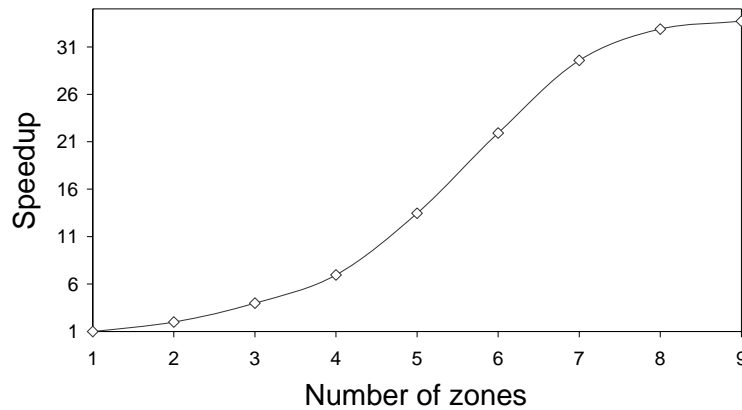


Figure 3.20 : Gain réel en temps CPU obtenu dans le cas du double puits.

Le gain réel moyen en temps de calcul CPU est de 22 en utilisant 6 zones différentes. En augmentant le nombre de zones, le gain réel en temps de calcul est amélioré et atteint une valeur égale à 33 (figure 3.20). Cet exemple met en évidence l'efficacité importante de la combinaison des schémas amonts EFD avec une procédure temporelle multi-domaines pour des problèmes de transport où plusieurs puits d'injection et/ou de pompages sont présents. Ces résultats permettent d'espérer des gains en temps de calcul importants dans des situations complexes en 3D. C'est l'objet du chapitre suivant.

3.4 Conclusion

Dans des cas hydrauliques courants, les conditions hydrodynamiques locales peuvent varier de façon considérable. La condition de CFL global impose dans ces situations une restriction importante sur le pas de temps à utiliser, ce qui augmente significativement les temps de calcul. Nous avons proposé dans ce travail quelques solutions qui permettent d'éviter cet inconvénient majeur des schémas explicites, tout en conservant les propriétés de stabilité et de conservation de la masse.

Dans un premier temps, nous avons présenté un schéma temporel qui permet de s'affranchir du critère de stabilité du nombre de Courant sur les pas de temps. La méthode consiste à utiliser une discrétisation semi-implicite pour la résolution de l'équation de convection. Avec cette classe de schémas, il est possible d'utiliser des pas de temps plus grands que ceux requis par les méthodes explicites. Les expé-

riences numériques montrent que le schéma semi-implicite $\theta = 0.6$ introduit une diffusion numérique limitée, mais de légères oscillations numériques persistent dans le cas de transports convectifs dominants.

Dans un second temps, nous avons utilisé une méthode de discrétisation explicite en temps basée sur une condition de stabilité locale. Le domaine de calcul est découpé en plusieurs zones et différents pas de temps sont affectés à chaque zone en fonction des caractéristiques locales de l'hydrodynamique et du maillage. Ces pas de temps locaux sont des multiples du plus petit pas de temps toléré par la condition de CFL globale et permettent de diminuer considérablement le temps de calcul. Les expériences numériques montrent que ces schémas multi-domaines en temps :

- conservent les principaux avantages de la formulation explicite classique à savoir la stabilité, la précision et la conservation de la masse,
- sont plus efficaces que les schémas semi-implicites présentées dans la section précédente. En effet, ils introduisent moins de diffusion numérique pour des gains en temps de calcul équivalents.

Le chapitre suivant est consacré à la simulation du transport de solutés avec contraste de masse volumique. Il en résulte alors une variation du champ de vitesse dans le temps. L'utilisation des EFD multi-domaines en temps requiert dans ce cas un découpage dynamique du domaine physique au cours de la simulation. L'objectif est de montrer comment l'utilisation des schémas multi-domaines dans ce genre de situations complexes en deux et trois dimensions permet de garantir des gains en temps de calcul énormes.

Chapitre 4

Application des schémas multi-domaines en temps pour la résolution des écoulements denses

4.1	Introduction
4.2	Modèle mathématique des écoulements denses
4.3	Résolution numérique
4.3.1	Résolution de l'équation de l'écoulement
4.3.2	Résolution de l'équation de transport
4.3.3	Procédure itérative de couplage des équations non-linéaires
4.4	Résultats numériques
4.4.1	Problème de l'intrusion saline avec présence d'un puits de pompage
4.4.2	Expériences d'Oswald (3D)
4.5	Conclusion

4.1 Introduction

La salinisation des aquifères côtiers est un risque hydrogéologique majeur touchant les régions littorales, souvent densément peuplées et fortement tributaires des eaux souterraines. Dans le cas d'un pompage dans une réserve connectée avec l'eau de mer, l'eau salée peut migrer jusqu'à atteindre les ressources d'eau potable qui deviennent alors contaminées et inutilisables. Le maintien de la pérennité et de la qualité de la ressource nécessite alors une gestion efficace qui demande une compréhension particulière des phénomènes mis en jeu.

Dans le cas d'une intrusion saline, la propagation du soluté entraîne une variation de la densité qui affecte considérablement le champ de vitesse. Le système résultant est donc difficile à résoudre à cause du couplage non-linéaire de deux phénomènes physiques : le transport d'un soluté par convection-dispersion et l'écoulement dense. Les non-linéarités sont souvent à l'origine de la formation de plusieurs cellules de convections et donc d'un champ de vitesse complexe.

La modélisation numérique est actuellement le seul outil qui permet de bien comprendre et de prévoir la propagation d'un polluant quand les concentrations en sel sont élevées. Elle constitue de ce fait, un puissant outil de gestion (Oude Essink, 2001). Il est à noter égale-

ment que la modélisation des écoulements denses suscite un intérêt particulier pour la récupération assistée des hydrocarbures dans l'industrie pétrolière ou bien encore pour évaluer les risques liés aux dépôts radioactifs ou toxiques localisés dans les dômes de sel (Younes, 1998).

Beaucoup de modèles numériques plus ou moins adaptés à la simulation des écoulements denses ont été développés et sont présentés dans la littérature scientifique (Diersch et Kolditz, 2002). Bien qu'en pratique les écoulements avec fort contraste de densité soient généralement tridimensionnels, ils sont le plus souvent résolus avec des modèles numériques bidimensionnels (Voss, 1984 ; Reeves *et al.*, 1986 ; Essaid, 1990 ; Konikow *et al.*, 1996). En effet, les simulations 3-D consomment un temps de calcul élevé mettant en jeu des maillages immenses (de l'ordre de millions de nœuds) même pour des simulations à des échelles de laboratoire (Johannsen *et al.*, 2002).

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à un code de calcul 2-D/3-D utilisé pour la résolution des équations de transport avec contraste de densité. Il s'agit du logiciel TRACES (**T**ransport **R**éActif de **C**ontaminants dans les **E**aux **S**outerraines) développé au sein de l'Institut de Mécanique des Fluides et des Solides de Strasbourg (IMFS). Ce modèle numérique emploie la méthode des EFMH pour résoudre l'équation de l'écoulement et la partie dispersive de l'équation de transport. La méthode des EFD stabilisée avec des limiteurs de pentes multidimensionnels est utilisée pour la résolution de la partie convective de l'équation de transport.

Dans sa version 2-D, les propriétés numériques du code TRACES ont été validées dans plusieurs travaux impliquant des cas tests classiques et d'autres largement exploités dans la littérature (Ackerer *et al.*, 1999; Younes *et al.* 1999). Les expériences numériques ont montré que le modèle implémenté est efficace pour résoudre les équations de l'écoulement et du transport avec fort contraste de masse volumique.

Bien que le code TRACES soit basé sur une procédure de séparation d'opérateurs et de "time splitting" pour la résolution de l'équation de transport, la discrétisation temporelle explicite traditionnelle de la partie convective nécessite des temps de calcul importants (voir chapitre 3). Dans sa version 3-D, le modèle a été utilisé pour modéliser les expériences du "salt-pool problem" (Oswald, 1998 ; Oswald et Kinzelbach, 2003). Le maillage utilisé est basé sur des éléments hexaédriques structurés et l'espace d'approximation Q_1 pour la résolution de la convection (Ackerer *et al.*, 2000 ; Younes, 2003). Cette version du modèle consomme un temps de calcul important : en effet

pour un simple maillage composé de 2700 éléments, la simulation du "salt-pool problem" (Oswald, 1998) demande plus d'une journée de calcul (Ackerer *et al.*, 2004). En plus, les résultats obtenus avec ce nombre de mailles ne sont pas satisfaisants. Un maillage plus fin est nécessaire pour modéliser correctement ce type d'expérience, ce qui induira nécessairement des temps de calcul beaucoup plus importants.

Dans ce chapitre, nous apportons deux améliorations intéressantes afin d'augmenter l'efficacité en temps de calcul du code TRACES. Ces améliorations ont été examinées au chapitre précédent et concernent la discrétisation spatiale et temporelle de la partie convective de l'équation de transport. Elles consistent :

- d'une part à adopter pour les EFD l'espace d'approximation basé sur la moyenne de la concentration et de ses gradients dans les différentes directions de l'espace (chapitre 2),
- d'autre part à implémenter un schéma explicite multi-domaines en temps pour la discrétisation temporelle de l'équation hyperbolique de conservation (chapitre 3).

Ce chapitre est structuré comme suit : dans un premier temps, nous rappelons les équations mathématiques établies au chapitre 1 régissant les phénomènes d'écoulement et de transport avec fort contraste de densité. Ensuite, nous présentons les schémas numériques du code TRACES qui permettent de résoudre les équations précédentes. Pour ce type de problème, le champ des vitesses évolue à chaque itération. Nous expliquons comment une procédure multi-domaines en temps peut être efficacement intégrée afin de prendre en compte cette évolution durant une simulation.

Finalement, pour tester la validité du modèle numérique modifié et vérifier qu'il conserve les performances et propriétés numériques du schéma d'origine sur lequel il est basé, nous étudions un problème d'intrusion saline avec présence d'un puits de pompage en 2-D. Nous utilisons ensuite le modèle numérique dans sa version 3-D pour comparer différentes configurations de maillage afin d'améliorer les résultats des simulations numériques du "salt-pool problem".

4.2 Modèle mathématique des écoulements denses

Les équations décrivant le transport de masse avec variation de la densité ont été décrites en détail au chapitre 1, elles traduisent :

- la conservation de la masse du fluide (eau et soluté) :

$$\rho_s \frac{\partial h}{\partial t} + \phi_c \frac{\partial \rho}{\partial C_m} \frac{\partial C_m}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \mathbf{q} = \rho Q_s \quad (4.1)$$

- la loi de Darcy généralisée :

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K} \left(\nabla h + \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \nabla z \right) \quad (4.2)$$

- la conservation de la masse de soluté (équation de transport) :

$$\rho \frac{\partial C_m}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \cdot \nabla C_m = \nabla \cdot (\rho \mathbf{D} \cdot \nabla C_m) + \rho \frac{Q_s}{\phi_c} (C_m^* - C_m) \quad (4.3)$$

Nous rappelons que ces équations sont couplées par les équations d'état reliant la densité et la viscosité à la fraction massique.

4.3 Résolution numérique

Au chapitre 2, nous avons détaillé l'écriture des méthodes EFD et EFMH dans le cas de l'écoulement et du transport d'un traceur de l'eau où la présence de soluté n'affectait pas la densité du fluide. Dans cette section nous rappelons brièvement la mise en œuvre de ces deux méthodes numériques aux équations caractérisant les écoulements et les transports couplés avec fort contraste de densité.

4.3.1 Résolution de l'équation de l'écoulement

La loi de Darcy (4.2) est réécrite sous la forme suivante :

$$\mathbf{K}^{-1} \mathbf{q} = -\nabla h - \frac{(\rho - \rho_0)}{\rho_0} \nabla z. \quad (4.4)$$

La formulation variationnelle de l'équation précédente utilisant les fonctions de Raviart-Thomas ω_i^E ($i=1, \dots, N_f$) du plus bas ordre RT_0 comme fonctions de pondération aboutit à :

$$\int_E (\mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}) \cdot \omega_i^E = (h_E - th_i^E) + \frac{\rho_E - \rho_0}{\rho_0} (z_E - z_{\Gamma_i}) \quad (4.5)$$

où h_E est la charge hydraulique moyenne sur l'élément E , z_E la coordonnée selon l'axe des z du centre de gravité de E , th_i^E la

charge hydraulique moyenne sur la facette Γ_i de l'élément E et z_{Γ_i} la coordonnée selon l'axe des z du milieu de la facette Γ_i .

Les flux Q_i^E sur chaque facette Γ_i , ($i=1,\dots,N_f$) d'un élément E sont alors définis par :

$$Q_i^E = \alpha_i^E h_E - \sum_{j=1}^{N_f} (B_{ij}^E)^{-1} (th_j^E + e_j^E), \quad (4.6)$$

avec :

$$B_{ij}^E = \int_E \omega_i^E \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \omega_j^E, \quad \alpha_i^E = \sum_{j=1}^{N_f} (B_{ij}^E)^{-1}, \quad e_j^E = \frac{\rho_E - \rho_0}{\rho_0} (z_{\Gamma_j} - z_E) \quad (4.7)$$

L'équation de conservation de la masse du fluide (4.1) (eau+soluté) est discrétisée en utilisant une formulation volumes finis en espace et une discrétisation temporelle implicite d'ordre un en temps :

$$s|E| \frac{h_E^{n+1} - h_E^n}{\Delta t} + \sum_i (Q_i^E)^{n+1} = \int_E Q_s - \phi_c |E| \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial C_m} \frac{\partial C_m}{\partial t} \quad (4.8)$$

Les flux sont remplacés dans l'équation (4.8) par leurs valeurs obtenues à l'aide de l'équation (4.6). Les charges moyennes h_E^{n+1} peuvent alors s'exprimer en fonction des th_i^E :

$$h_E^{n+1} = h_E^n (1 - \beta_E^{n+1}) - \frac{\phi_c}{\rho_E^{n+1}} \frac{\beta_E^{n+1}}{\lambda_E^{n+1}} \frac{\partial \rho}{\partial C_m} (\bar{C}_{m,E}^{n+1} - \bar{C}_{m,E}^n) + \frac{\beta_E^{n+1}}{\alpha_E^{n+1}} \sum_{i=1}^{N_f} \left((th_i^E)^{n+1} + (e_i^E)^{n+1} \right) (\gamma_i^E)^{n+1} + \frac{\beta_E^{n+1}}{\alpha_E^{n+1}} F_E^{n+1} \quad (4.9)$$

où :

$$\alpha_E^n = \sum_{i=1}^{N_f} \alpha_i^E, \quad (\gamma_E^i)^n = \sum_{j=1}^{N_f} (B_{ij}^E)^{-1},$$

$$\lambda_E^n = \frac{\Delta t}{|E|} \alpha_E^n, \quad \beta_E^n = \frac{\lambda_E^n}{s + \lambda_E^n}, \quad F_E^n = \int_E Q_s,$$

et $\bar{C}_{m,E}^n$, $\bar{C}_{m,E}^{n+1}$ les fractions massiques moyennes sur l'élément E respectivement aux temps n et $n+1$.

Le système d'équations (4.1) et (4.2) peut être réduit à une seule équation avec les th_i ($i=1,\dots,N_f$) comme seules inconnues (Chavent et Roberts, 1991). La technique d'hybridation est identique à celle exposée dans le chapitre 2 et la matrice associée au système d'équations obtenu est symétrique définie positive. Sa résolution est effectuée à l'aide des méthodes classiques.

4.3.2 Résolution de l'équation de transport

D'après Kolditz *et al.* (1997) et Younes *et al.*, (1999) entre autres, nous supposons que $\nabla\rho \ll \rho$. L'équation (4.3) s'écrit alors dans ce cas :

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla C_m = \nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla C_m) + \frac{Q_s}{\phi_c} (C_m^* - C_m). \quad (4.10)$$

La technique de séparation d'opérateurs est appliquée à l'équation de transport précédente pour donner :

$$\begin{aligned} \frac{C_m^{n+1} - C_m^{conv,n+1} + C_m^{conv,n+1} - C_m^n}{\Delta t} + \mathbf{V} \cdot \nabla C_m = \nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla C_m) \\ + \frac{Q_s}{\phi_c} (C_m^* - C_m), \end{aligned} \quad (4.11)$$

où $C_m^{conv,n+1}$ est la fraction massique calculée par convection au pas $n+1$ selon l'équation :

$$\frac{C_m^{conv,n+1} - C_m^n}{\Delta t} = -\mathbf{V} \cdot \nabla C_m + \frac{Q_s}{\phi_c} (C_m^* - C_m). \quad (4.12)$$

Afin d'économiser du temps de calcul, nous adoptons l'espace P_1 (ensemble des fonctions de base linéaires) pour approximer la concentration inconnue de l'équation (4.12). Dans le cas des éléments hexaédriques en 3-D (Guillot *et al.*, 2002), nous avons :

$$\begin{aligned}
 C_{m,E}^1(t) &= \bar{C}_{m,E}, & \phi_E^1(x, y, z) &= 1 \\
 C_{m,E}^2(t) &= \frac{\partial C_{m,E}}{\partial x}, & \phi_E^2(x, y, z) &= x - x_E, \\
 C_{m,E}^3(t) &= \frac{\partial C_{m,E}}{\partial y}, & \phi_E^3(x, y, z) &= y - y_E, \\
 C_{m,E}^4(t) &= \frac{\partial C_{m,E}}{\partial z}, & \phi_E^4(x, y, z) &= z - z_E,
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

avec (x_E, y_E, z_E) le centre de gravité de l'élément E , $\bar{C}_{m,E}$ la moyenne de la concentration massique sur l'élément E et $\frac{\partial C_{m,E}}{\partial x}, \frac{\partial C_{m,E}}{\partial y}, \frac{\partial C_{m,E}}{\partial z}$ ses dérivées premières par rapport à chacune des trois directions de l'espace.

Pour cet espace, nous avons 4 degrés de liberté en moins par maille par rapport à l'espace d'approximation Q_1 . Pour la limitation de pente, nous utilisons la procédure directe présentée au chapitre 2 pour les quadrangles : son extension aux hexaèdres structurés est en effet triviale. Nous avons montré que dans le cas des quadrangles, l'espace P_1 n'entraînait en aucun cas une perte de la précision et de la stabilité de la solution numérique. Dans le cadre des éléments finis structurés, l'extension des algorithmes 2-D aux équations 3-D n'apporte pas des différences majeures tant sur la décomposition des flux, la précision de la solution obtenue, la stabilité, etc. (Stève, 1988). Les éléments hexaédriques permettent de conserver exactement, par analogie, les propriétés des quadrangles en 2-D (Kirby, 2000).

Pour la partie dispersive de l'équation (4.11), nous avons :

$$\frac{C_m^{n+1} - C_m^{conv,n+1}}{\Delta t} = \nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla C_m). \tag{4.14}$$

La discrétisation de cette équation avec les EFMH est détaillée dans l'annexe B.

4.3.3 Procédure itérative de couplage des équations non-linéaires

Les trois équations différentielles (4.1)-(4.3) sont linéarisées grâce à la méthode du point fixe et résolues à l'aide d'une procédure itérative présentée dans Ackerer *et al.* (2004). L'intérêt est de séparer les modèles de convection-dispersion et d'écoulement. L'algorithme général de résolution s'écrit :

Première étape : Résolution de la partie convective de l'équation du transport à l'aide d'un schéma à pas de temps local :

En fonction du champ de vitesse $\mathbf{V}^{n+1,k}$ à l'itération k et du pas de temps global de simulation Δt^n utilisé pour résoudre l'écoulement et la dispersion, nous calculons les pas de temps convectifs locaux pour chacun des éléments du domaine physique selon la technique exposée au chapitre 3. L'équation (4.12) est ensuite résolue localement dans chaque zone :

$$\frac{C_m^{conv,n+1} - C_m^n}{\Delta t} + \mathbf{V}^{n+1,k} \cdot \nabla C_m = \frac{Q_s}{\phi_c} (C_m^* - C_m^n). \quad (4.15)$$

Deuxième étape : résolution de la partie dispersive de l'équation de transport :

$$\frac{C_m^{n+1,k+1} - C_m^{conv,n+1}}{\Delta t^n} = \nabla \cdot (\mathbf{D}^{n+1,k} \cdot \nabla C_m^{n+1,k+1}) \quad (4.16)$$

Troisième étape : utilisation des équations d'état :

$$\rho^{n+1,k+1} = f(\bar{C}_m^{n+1,k+1}) ; \mu^{n+1,k+1} = g(\bar{C}_m^{n+1,k+1}) \quad (4.17)$$

Quatrième étape : résolution des équations de l'écoulement :

$$s\rho^{n+1,k+1} \frac{h^{n+1,k+1} - h^n}{\Delta t} + \rho^{n+1,k+1} \nabla \cdot \mathbf{q}^{n+1,k+1} = \rho^{n+1,k+1} Q_s - \phi_c \left(\frac{\partial \rho}{\partial C_m} \right)^{n+1,k+1} \frac{\bar{C}_m^{n+1,k+1} - \bar{C}_m^n}{\Delta t} \quad (4.18)$$

avec :

$$\mathbf{q}^{n+1,k+1} = -\mathbf{K} \left(\nabla h^{n+1,k+1} + \frac{\rho^{n+1,k+1} - \rho_0}{\rho_0} \nabla z \right) \quad (4.19)$$

où n est le pas de temps et k l'itération.

Cinquième étape : Test de convergence et fin des itérations si :

$$\left| \overline{C}_m^{n+1,k+1} - \overline{C}_m^{n+1,k} \right| \leq \varepsilon_c \text{ et } \left| h^{n+1,k+1} - h^{n+1,k} \right| \leq \varepsilon_h \quad (4.20)$$

Finalement, la gestion du pas de temps Δt^n est réalisée d'une manière adaptative en fonction du nombre d'itérations nécessaires pour assurer la convergence du problème précédent :

$$\begin{cases} \text{si } k \leq 4 & \Delta t^{n+1} = 1.2\Delta t^n \\ \text{si } 5 \leq k \leq 8 & \Delta t^{n+1} = 1.0\Delta t^n \\ \text{si } 9 \leq k & \Delta t^{n+1} = 0.9\Delta t^n \end{cases} \quad (4.21)$$

Si la convergence n'est pas atteinte au bout de 20 itérations, le pas de temps Δt^n est alors divisé par 2. La partition spatiale et dynamique des éléments en fonction du pas de temps local est variable :

- d'une itération à l'autre en fonction du champ d'écoulement calculé à chaque itération à l'issue de la quatrième étape,
- d'un pas de temps à l'autre du fait de la gestion adaptative définie par (4.21).

4.4 Résultats numériques

L'objectif dans la dernière section de ce chapitre est de valider numériquement l'intégration des schémas multi-domaines en temps ainsi que l'espace d'approximation (4.13) au code de calcul TRACES des écoulements denses.

Nous désignons par TRACES_v2 la version du code TRACES modifiée. La version classique est notée TRACES_v1. Nous étudierons un problème d'intrusion saline avec présence d'un puits de pompage en 2-D ainsi que les expériences tridimensionnelles du "salt-pool problem".

4.4.1 Problème de l'intrusion saline avec présence d'un puits de pompage

Un problème simplifié d'intrusion saline dans un aquifère côtier en présence d'un puits d'extraction est étudié en premier lieu. Ce cas correspond au déplacement d'un front salin dans un aquifère rectangulaire supposé homogène, isotrope et saturé. Le milieu est initialement chargé par de l'eau douce. Les conditions aux limites sont celles du problème d'Henry standard (Henry, 1964 ; Voss et Souza, 1978) et correspondent à une pression hydrostatique le long de la frontière droite et une densité pour l'eau saline égale à $\rho_1 = 1025 \text{ kg} / \text{m}^3$. Un

flux constant égal à $Q = 6.6 \times 10^{-5} m^3 / s$ d'eau douce de densité égale à $\rho_0 = 1000 kg / m^3$ est imposé le long de la frontière gauche, ce qui donne lieu à une variation totale de la densité de 2,5% .

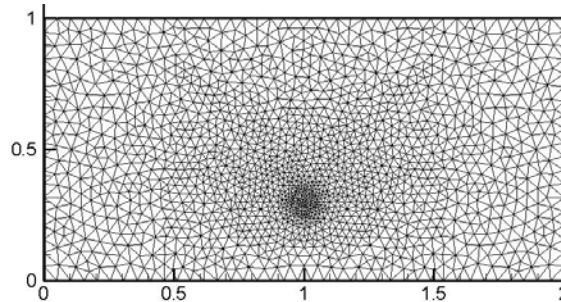


Figure 4.1 : Maillage localement raffiné au voisinage du puits d'extraction.

Un puits de pompage (point d'extraction) est localisé au point $(1m, 0.3m)$ et l'eau est pompée à un débit constant $Q_s = 10^{-4} m^3 / s$. Les valeurs des paramètres physiques et hydrauliques sont résumées dans le tableau 4.1. Le domaine rectangulaire est discrétisé à l'aide d'un maillage triangulaire fortement déstructuré composé de 1631 nœuds et 3142 éléments (figure 4.1). Un raffinement de la discrétisation spatiale est nécessaire au voisinage du puits de pompage pour obtenir un champ de vitesse précis. La durée totale de la simulation est fixée à $T = 4000 s$.

La température du milieu est considérée constante de sorte que seule la concentration en sel influe sur la densité du fluide. Comme le champ des vitesses est fortement influencé par les variations de masse volumique, la distribution spatiale des pas de temps locaux n'est plus constante dans le temps (figure 4.2). Nous avons alors recours à une partition dynamique des différentes zones au cours de la simulation. Le nombre total de zones dans lesquelles seront regroupées les différentes mailles varie entre 5 et 11 pour ce cas test. Du fait du raffinement du maillage et des modules de vitesse importantes au voisinage du puits de pompage, des pas de temps relativement petits sont alors nécessaires pour les mailles situées dans cette région. Le plus petit pas de temps local Δt_s est utilisé uniquement pour l'élément contenant le point d'extraction. Les autres pas de temps locaux, qui sont au minimum deux fois plus importants, sont adoptés par les autres éléments du domaine physique (figure 4.2).

Perméabilité	$k_x = k_y = 1.0204 \times 10^{-9} m^2$
Porosité	$\phi = 0.35$
Coefficients de dispersion	$\alpha_L = \alpha_T = 0m$
Coefficient de diffusion moléculaire	$D_m = 3.772 \times 10^{-6} m^2 s^{-1}$
Conditions aux limites pour l'écoulement	Pression hydrostatique sur le coté droit Flux constant le long du coté gauche: $Q = 6.6 \times 10^{-5} kg / m^3$ Pas d'écoulement suivant les cotés supérieurs et inférieurs
Conditions aux limites pour le transport	$\rho_0 = 1000kg / m^3$ sur le coté gauche $\rho_1 = 1025kg / m^3$ sur le coté droit Gradient de concentration nul suivant les cotés supérieurs et inférieurs

Tableau 4.1 : Paramètres physiques et conditions aux limites pour le problème de l'intrusion saline avec présence d'un puits de pompage.

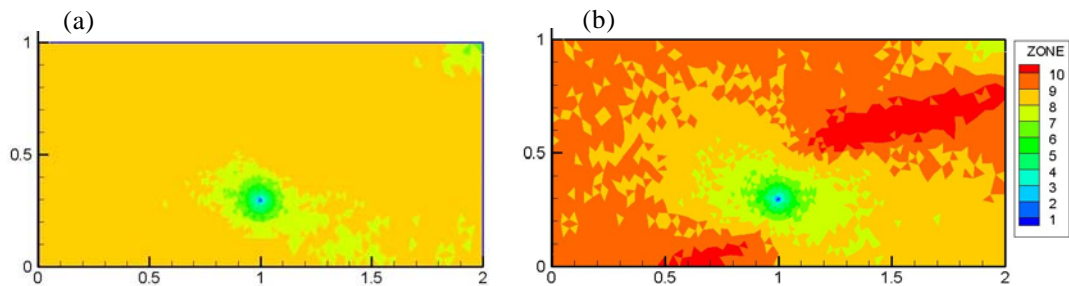


Figure 4.2 : Répartition dynamique des différents éléments pour (a) $T=1500$ s et (b) $T=4000$ s.

Aucune solution analytique n'existe pour ce cas test. Nous utilisons alors comme solution de référence le code TRACES_v1 avec comme maillage celui de la figure 4.1 et un pas de temps initial $\Delta t^0 = \Delta t_{\max} = 10$ s. Les profils des fractions massiques C_m obtenus avec la version TRACES_v2 sont identiques à ceux obtenus avec la version TRACES_v1 (figure 4.3). La différence entre les deux schémas numériques est de l'ordre de 0.6% dans la norme L1. Tout au long de la simulation, aucun problème de stabilité numérique n'a été détecté et les masses de sel introduites ont été exactement conservées pour les deux schémas. Le schéma numérique basé sur une discrétisation temporelle explicite locale est plus efficace que le schéma traditionnel, le gain en temps de calcul étant de 20 pour ce cas test.

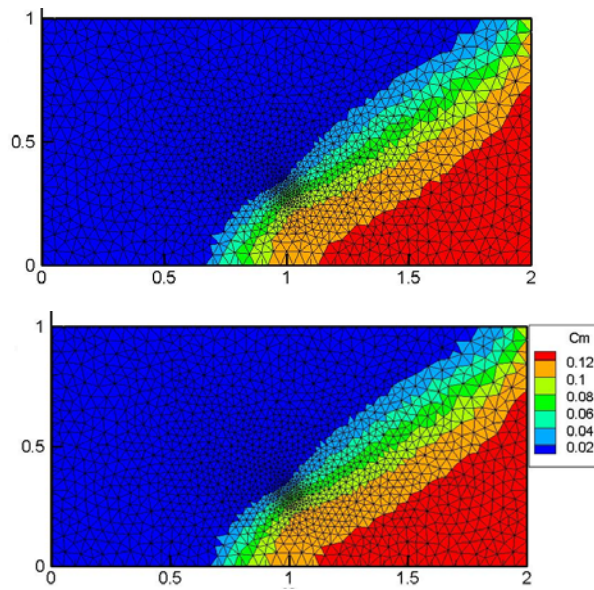


Figure 4.3 : Fractions massiques obtenues à l'aide des schémas (a) TRACES_v1 et (b) TRACES_v2.

Ce premier résultat en 2-D met en évidence l'intérêt de l'utilisation des schémas multi-domaines en temps au sein d'un code de résolution des écoulements denses. Pour ce problème non-linéaire, le champ des vecteurs vitesse évolue à chaque itération. Dans ce cas, une partition dynamique et "fidèle" à cette évolution (nombre de zones et répartition des éléments suivant les zones) peut être implémentée pour assurer la stabilité du schéma numérique. Dans ce qui suit, nous allons nous intéresser à un problème plus complexe de transport salin tridimensionnel.

4.4.2 Expériences d'Oswald (3D)

Des séries d'expériences effectuées au laboratoire ont été proposées par Oswald (1998) à l'ETH de Zurich pour mesurer l'effet du contraste de masse volumique sur l'écoulement en milieu poreux. Ces expériences impliquent dans un premier temps l'équilibre d'une couche stable d'eau salée située en dessous d'une autre couche d'eau douce. Un débit additionnel d'eau douce vient ensuite perturber l'équilibre précédent causant une déstabilisation transitoire du front salin. L'importante variation des gradients de masse volumique qui en découle s'avère avoir une influence significative sur les lignes de courant à cause des effets de gravité (Oswald *et al.*, 2002).

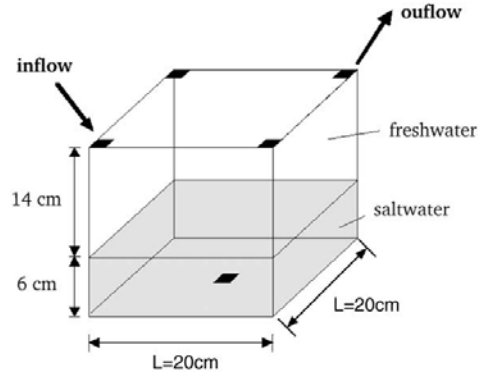


Figure 4.4 : Dispositif expérimental (Oswald, 1998).

Les expériences du "salt-pool problem" représentent un banc d'essai intéressant pour la modélisation des écoulements denses (Johannsen *et al.*, 2002), et constituent un défi pour la communauté scientifique (Younes, 2005). En effet, les résultats expérimentaux correspondent à une distribution tridimensionnelle des concentrations. En plus, les résultats présentés sont très précis vu que les concentrations sont visualisées par RMN (spectrométrie de résonance magnétique nucléaire) (Oswald *et al.*, 1997).

i	$t^i (s)$	$c_m^i (\%)$	i	$t^i (s)$	$c_m^i (\%)$	i	$t^i (s)$	$c_m^i (\%)$
0	0	0.00000	9	2550	0.03765	18	5280	0.02144
1	150	0.00162	10	3000	0.03414	19	5700	0.01988
2	570	0.03498	11	3255	0.03230	20	5955	0.01910
3	795	0.04600	12	3510	0.03046	21	6255	0.01821
4	1035	0.05035	13	3765	0.02879	22	6510	0.01754
5	1290	0.05052	14	4080	0.02701	23	6840	0.01671
6	1635	0.04762	15	4380	0.02539	24	7140	0.01604
7	1995	0.04383	16	4725	0.02384	25	7500	0.01526
8	2310	0.04055	17	4995	0.02261			

Tableau 4.2 : Valeurs de la fraction massique mesurée à la sortie pour le cas $Saltp-L$ ($C_m^* = 1\%$).

Dans ce qui suit nous rappelons le processus expérimental utilisé. Un cube de côté L est rempli par un milieu poreux homogène et isotrope de porosité ϕ_c . Cinq ouvertures sont utilisées pour l'injection et l'extraction d'eau douce et/ou d'eau salée durant les différentes phases de la simulation. Ces ouvertures sont repérées sur la figure 4.4. L'expérience complète se déroule en trois étapes distinctes. Pendant la première phase de période T_1 , une eau salée de fraction massique

C_m^* donnée est injectée à travers l'ouverture du bas dans le cube initialement rempli par de l'eau douce. Cette injection a pour effet une extraction de l'eau douce par les autres ouvertures du haut. Deux cas sont considérés (Oswald, 1998) : *Saltp-L* dont la fraction massique C_m^* est de 1.0% et *Saltp-D* dont la fraction massique C_m^* est de 10.0%. Pendant la seconde étape de l'expérience de période T_2 , toutes les ouvertures sont fermées jusqu'à ce que l'équilibre entre les deux couches (eau saline et eau douce) soit atteint. Cet équilibre correspond à une distribution (presque) horizontale du sel impliquant une zone de mélange très réduite. Durant la troisième et dernière étape, le cube est rechargé par de l'eau douce à travers une ouverture du haut (figure 4.4) et un débit constant égal à Q_2 pendant une durée T_3 . A travers l'autre ouverture diagonalement opposée, l'eau salée est extraite avec une fraction massique $c_m(t)$ variable au cours du temps. Cette fraction massique a été mesurée à 26 instants différents (tableau 4.2) pour *Saltp-L* et à 31 instants différents pour *Saltp-D* (tableau 4.3).

i	$t^i (s)$	$c^i (\%)$	i	$t^i (s)$	$c_m^i (\%)$	i	$t^i (s)$	$c_m^i (\%)$
0	0	0.00000	11	2850	0.02232	22	6510	0.02325
1	240	0.00014	12	3120	0.02243	23	6840	0.02331
2	465	0.00443	13	3375	0.02248	24	7170	0.02331
3	705	0.01106	14	3705	0.02259	25	7530	0.02342
4	945	0.01562	15	3960	0.02265	26	7830	0.02342
5	1185	0.01886	16	4245	0.02281	27	8145	0.02347
6	1515	0.02062	17	4575	0.02276	28	8565	0.02353
7	1800	0.02139	18	4845	0.02292	29	9090	0.02355
8	2040	0.02177	19	5190	0.02303	30	9495	
9	2340	0.02204	20	5520	0.02314			
10	2610	0.02221	21	5955	0.02309			

Tableau 4.3 : Valeurs de la fraction massique mesurée à la sortie pour le cas *Saltp-D* ($C_m^s = 10\%$).

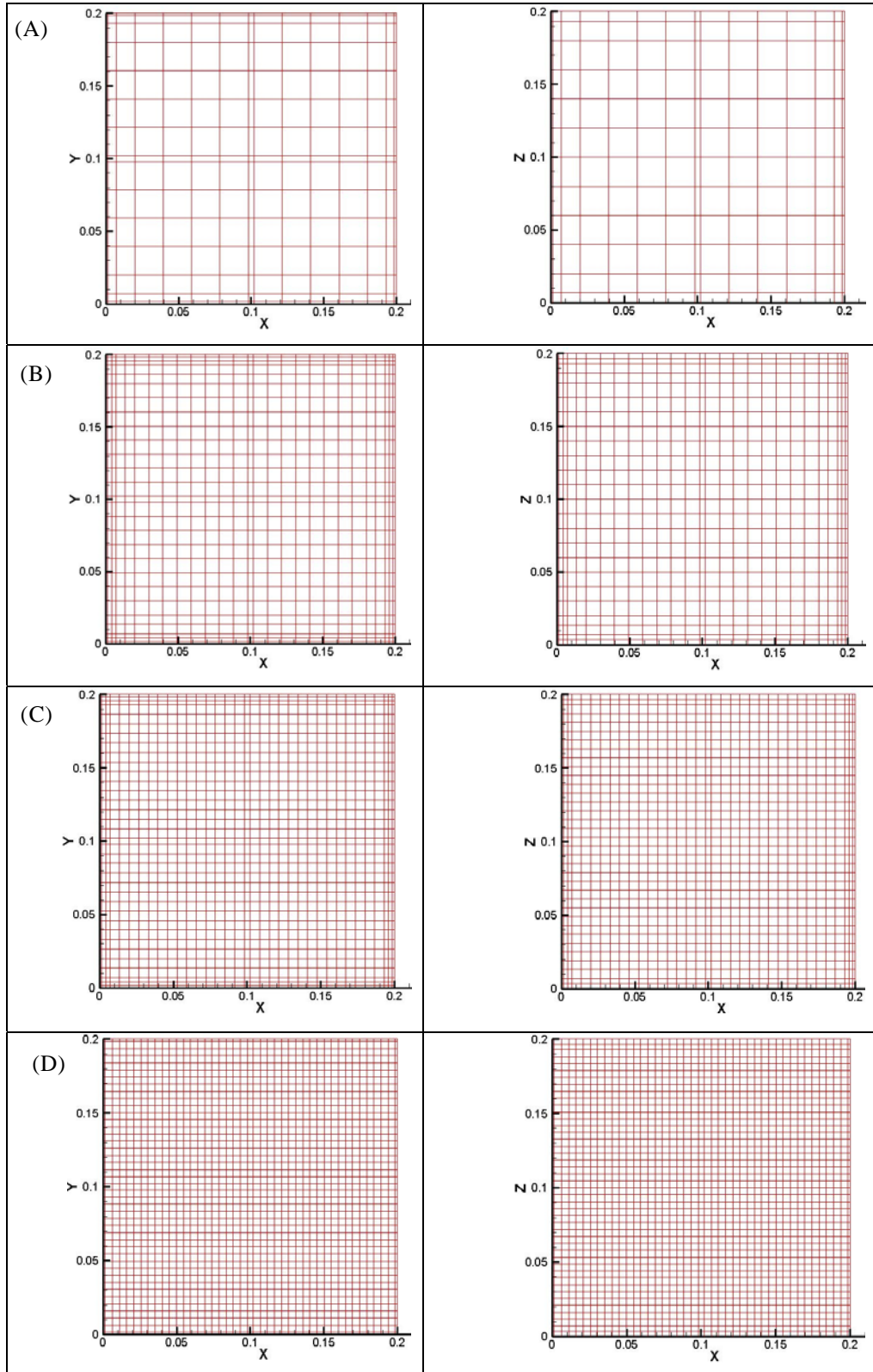


Figure 4.5 : Les différents maillages A, B, C et D.

L'ensemble des paramètres géométriques, physiques et hydrauliques relatifs à l'écoulement et au transport utilisés dans les différentes phases de l'expérience sont indiqués dans le tableau 4.4.

Dans un premier temps, nous comparons les résultats numériques obtenus par les deux codes TRACES_v1 et TRACES_v2. Pour cela, nous considérons le maillage A composé de 2700 éléments (figure 4.5).

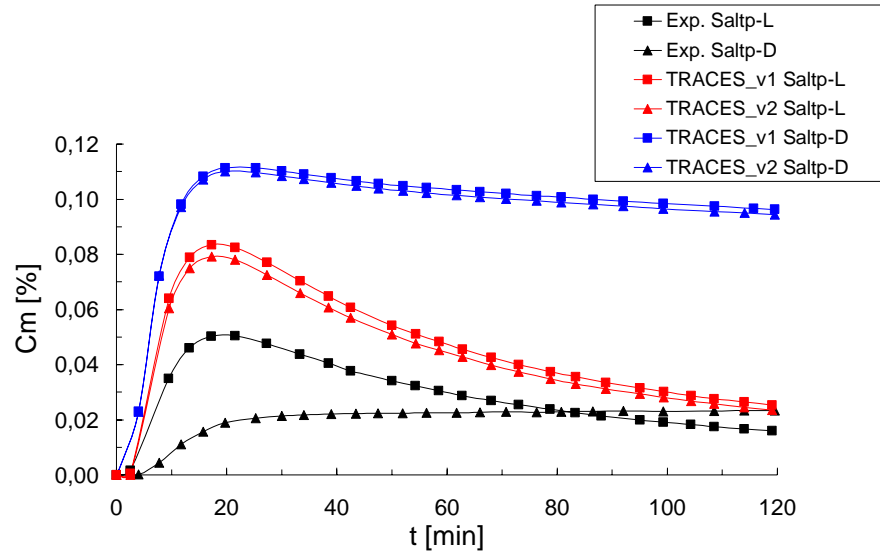


Figure 4.6 : Courbes de restitution expérimentales et numériques obtenues par les deux codes TRACES_v1 et TRACES_v2.

La figure 4.6 montre qu'il n'y a pas une grande différence entre les différentes courbes de restitution (breakthrough curves) obtenues par les deux versions du code pour les deux simulations *Saltp-L* et *Saltp-D*. Les valeurs obtenues par la version TRACES_v2 sont néanmoins légèrement inférieures mais l'écart avec les résultats expérimentaux reste cependant important. La distribution de la fraction massique simulée par le code TRACES_v2 à l'intérieur du cube à la fin de la première étape ($t = 10$ min), la fin de la seconde étape ($t = 45$ min) et durant la troisième étape ($t = 63$ min) est également représentée sur la figure 4.7 Cette distribution est similaire à celle simulée par le code TRACES_v1 (Younes, 2003). Il est à noter également que l'ancienne version du code consomme un temps CPU moyen par simulation de l'ordre de 30 heures, alors que la version TRACES_v2 n'en consomme que 32 minutes !

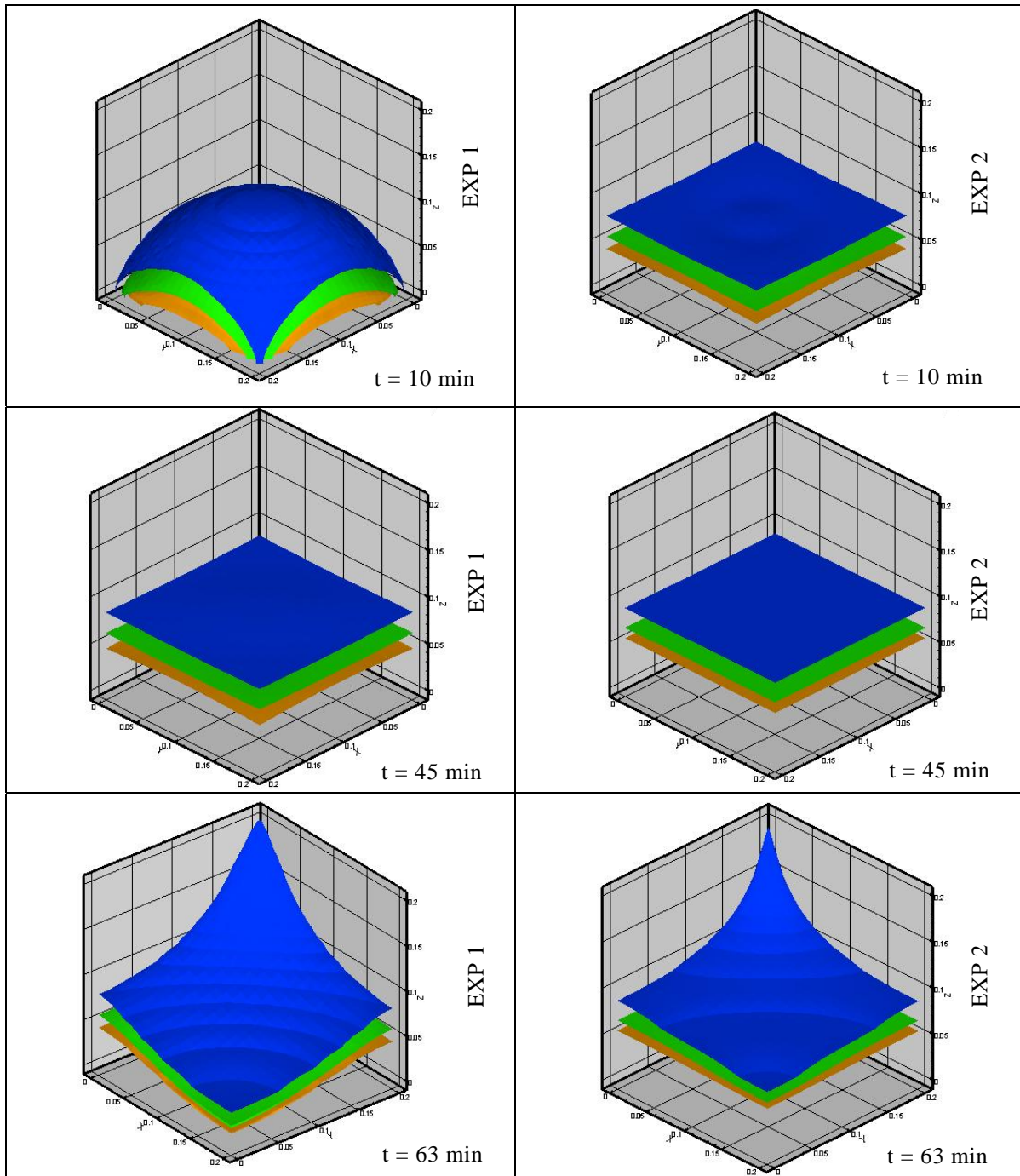


Figure 4.7 : Distribution de la fraction massique pour le "salt-pool problem" (iso-surfaces : 0.05, 0.5, 0.8) simulée à l'aide du code TRACES_v2.

Cet avantage est dû en grande partie à l'implémentation des schémas multi-domaines en temps mais aussi à la discrétisation spatiale du terme convectif de l'équation de transport dans l'espace d'approximation P_1 . Ce premier essai montre que l'utilisation des schémas multi-domaines basés sur un découpage dynamique du domaine physique, permet des gains intéressants en temps de calculs dans ce genre de situations complexes en trois dimensions.

Dans un second temps, nous utilisons cet avantage pour comparer d'autres configurations de maillages afin d'améliorer les résultats des simulations numériques précédentes. Trois maillages plus fins sont alors utilisés : le maillage B composé de 17496 mailles, le maillage C composé de 42875 mailles et le maillage D composé de 81356 mailles (figure 4.5). A cause des erreurs de mesures qui peuvent affecter les divers paramètres physiques mesurés (tableau 4.4), Johannsen *et al.* (2002) proposent d'utiliser les valeurs modifiées suivantes pour la perméabilité, la porosité et la dispersion transversale :

$$K^{(2)} = 1.194K, \quad n^{(2)} = 0.962n, \quad \alpha_t^{(2)} = 0.360\alpha_t. \quad (4.22)$$

Nous désignons par Sim1 les simulations effectuées avec le jeu de paramètres initiale (tel indiqué dans le tableau 4.4) et par Sim2 celles réalisées avec le jeu de paramètres modifiés (4.22). Les résultats sont synthétisés dans les figures (4.8) et (4.9). Nous remarquons tout d'abord que pour les deux expériences *Saltp-L* et *Saltp-D*, plus le maillage est dense et plus l'écart entre les courbes simulées et expérimentales est réduit. Pour le maillage le plus grossier (A), les courbes de restitution obtenues à l'aide des deux jeux de paramètres sont similaires pour les deux expériences. Pour les autres maillages, les courbes obtenues à l'aide des paramètres (4.22) sont meilleures. Pour l'expérience *Saltp-L*, le raffinement du maillage B n'apporte pas d'amélioration supplémentaire, contrairement au cas *Saltp-D* où un raffinement du maillage est toujours nécessaire pour réduire l'écart entre la courbe simulée et la courbe expérimentale. Ce point est également souligné dans Johannsen *et al.* (2002). En effet, pour le premier cas, un maillage relativement grossier est suffisant afin de prendre en compte les effets de la convection et de la dispersion longitudinale, alors que la simulation du second cas nécessite un maillage plus dense pour mieux prendre en compte l'effet de la dispersion transversale.

Finalement, une confrontation entre les résultats expérimentaux et numériques obtenus avec les codes de calcul SALTFLOW (Molson et Frind, 1994), FEFLOW (Trefry et Muffels, 2007) et TRACES_v2 est

effectuée. Toutes les simulations réalisées donnent lieu à des résultats différents et montrent une surestimation de la fraction massique maximum à la sortie pour *Saltp-L* (figure 4.10) et *Saltp-D* (figure 4.11). Le modèle TRACES_v2 donne les résultats numériques les plus satisfaisants.

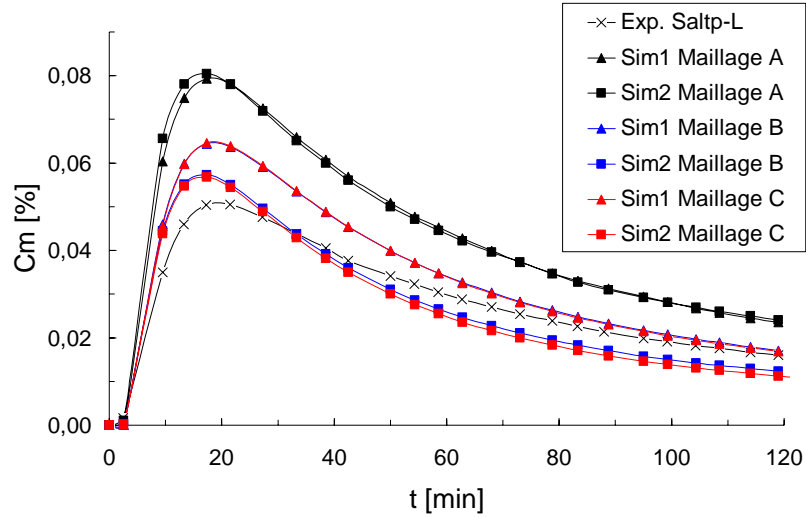


Figure 4.8 : Simulation de l'expérience *Saltp-L* (cas 1) avec le code TRACES_v2.

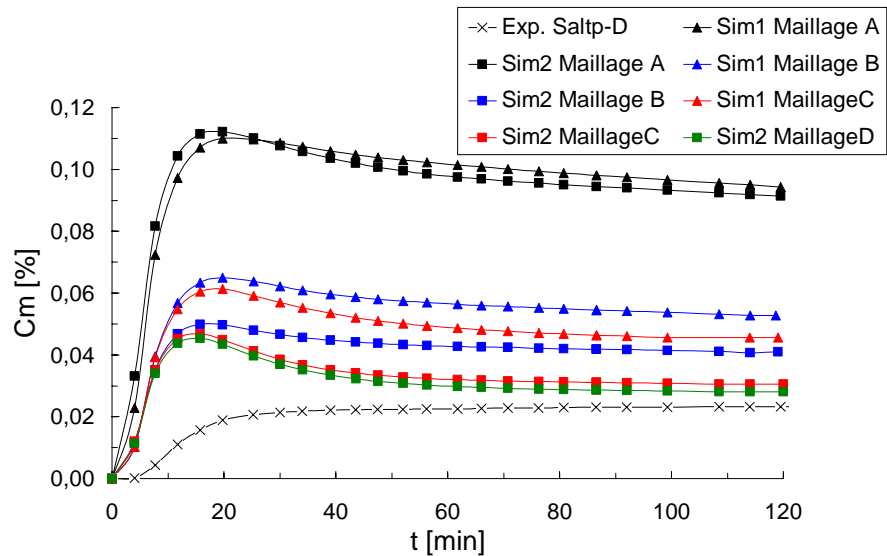


Figure 4.9 : Simulation de l'expérience *Saltp-D* (cas 2) avec le code TRACES_v2.

	<i>Saltp</i> – <i>L</i> , cas 1		<i>Saltp</i> – <i>D</i> , cas 2				Unité
		min.	max.		min.	max.	
C_m^s	1			10			%
T_1	720	717	723	714	711	717	S
T_2	2010	2009	2011	2076	2075	2077	S
T_3	8412	8410	8414	9594	9592	9596	S
Q_1	1.20	1.1916	1.2084	1.26	1.2516	1.2684	$10^{-6} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
Q_2	1.89	1.872	1.908	1.83	1.802	1.848	$10^{-6} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
ϕ_c	0.372	0.370	0.375	0.372	0.370	0.375	-
D_m	10	7	12	10	7	12	$10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
K	10	8.9	11	10	8.9	11	10^{-10} m^2
α_i	1.2	0.6	1.5	1.2	0.6	1.5	10^{-3} m
α_e	0.12	0.03	0.25	0.12	0.03	0.25	10^{-3} m
L	200	199	201	200	199	201	10^{-3} m
ρ_0	998.23			998.23			Kg m^{-3}
$\rho_1 - \rho_0$	758.65			733.70			Kg m^{-3}
μ_0	1.002	0.93	1.02	1.002	0.93	1.02	$10^{-3} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$

Tableau 4.4 : Paramètres géométriques et physiques du "salt-pool problem".

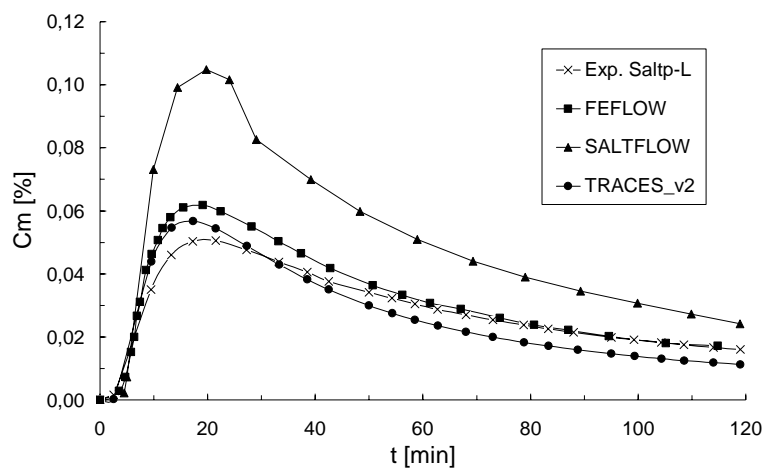


Figure 4.10 : Simulation de l'expérience *Saltp* – *L* (cas 1) avec différents codes de calcul.

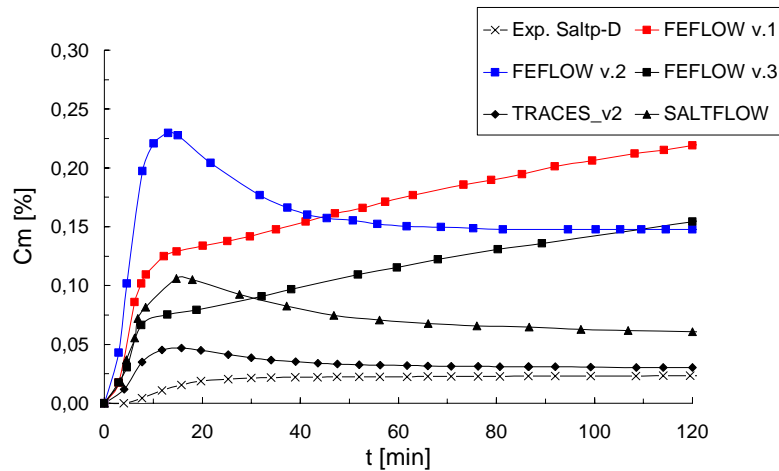


Figure 4.11 : Simulation de l'expérience *Salt-p-D* (cas 2) avec différents codes de calcul.

4.5 Conclusion

Dans ce quatrième chapitre, la simulation du transport de solutés avec contraste de masse volumique en deux et trois dimensions est étudiée. Quand la variation de la densité est non négligeable, l'équation de transport est couplée à celle de l'écoulement par les équations d'état. Il en résulte alors une variation continue du champ des vitesses dans le temps. Après avoir rappelé les équations de base d'un code de résolution des écoulements denses (TRACES), nous avons montré comment une procédure multi-domaines en temps pouvait être efficacement intégrée au sein de ce code afin de prendre en compte l'évolution du champ des vecteurs vitesses.

La nouvelle version du code de calcul est tout d'abord validée en 2-D pour un problème d'intrusion saline avec présence d'un puits de pompage. Nous montrons particulièrement comment l'utilisation des schémas multi-domaines basés sur un découpage dynamique du domaine physique permet des gains importants en temps de calcul, tout en conservant les propriétés numériques du schéma d'origine.

Dans un second temps, les expériences du "salt-pool problem" ont été étudiées. Les simulations numériques montrent que des maillages fins et denses sont nécessaires afin de réduire les différences observées entre les solutions numériques et expérimentales pour ce genre de situations complexes en trois dimensions. Une confrontation entre les

résultats numériques obtenus avec d'autres codes de calcul est également effectuée. Le modèle TRACES dans sa version modifiée donne les résultats numériques les plus satisfaisants.

Conclusion Générale et Perspectives

Le travail présenté dans ce mémoire s'intéresse à la modélisation du transport de polluant en milieu poreux saturé. Ce phénomène est régi mathématiquement par une équation composée d'un terme hyperbolique (convection) et d'un terme parabolique (dispersion). L'approche de séparation d'opérateurs est utilisée pour la résolution de l'équation de transport. Son avantage est qu'elle permet d'adopter à chaque terme la méthode numérique la plus adéquate. Dans ce cadre, la méthode des éléments finis mixtes hybrides (EFMH) est employée pour résoudre la partie parabolique. La partie hyperbolique est résolue à l'aide de la méthode des éléments finis discontinus de Galerkin (EFD). Les EFD sont basés sur une approximation polynomiale par morceaux de la solution et une étape de limitation de pente est nécessaire afin de supprimer les oscillations non-physiques. Une discrétisation temporelle explicite est généralement utilisée afin de bien approximer les zones à forts gradients caractérisant les transports convectifs dominants. Les schémas explicites sont conditionnés par un critère de stabilité globale qui peut aboutir à des temps de calcul importants dans certains cas pratiques. Dans ce travail, nous avons proposé des solutions qui permettent d'améliorer l'efficacité des schémas EFD.

Dans la première partie, la discrétisation spatiale est étudiée. Classiquement, les inconnues ou degrés de liberté sont les concentrations nodales pour chaque élément. Nous avons considéré un second espace d'approximation basé sur la valeur moyenne de la concentration et de ses gradients dans les différentes directions de l'espace. Le nombre d'inconnues est inférieur dans ce cas et ne dépend pas de la nature du maillage mais de la dimension de l'espace \mathbb{R}^d . La comparaison des deux approches pour des maillages quadrangulaires montre que la diminution de degrés de liberté n'entraîne pas une perte de précision de la solution numérique et assure des gains en temps de calcul importants. Le second espace d'approximation a été également développé pour les maillages triangulaires non-structurés. Une comparaison entre différentes techniques de limitation de pente nous a permis de trouver la méthode de reconstruction la plus appropriée.

Dans la seconde partie de ce travail, la discrétisation temporelle des EFD est abordée. Deux alternatives au schéma traditionnel explicite sont présentées :

- La première idée consiste à utiliser une discrétisation semi-implicite. Nous avons montré qu'avec cette classe de schémas, il

est possible d'utiliser des pas de temps supérieurs à ceux requis par les schémas explicites. La diffusion numérique développée est inférieure à celle des schémas implicites. Cependant, de légères oscillations numériques persistent dans les cas convectifs dominants malgré l'utilisation des limiteurs de pente.

- La seconde idée consiste à utiliser une discrétisation explicite en temps basée sur une condition de stabilité locale. Le domaine de calcul est découpé en plusieurs zones et différents pas de temps sont affectés à chaque zone en fonction des caractéristiques locales de l'hydrodynamique et du maillage. Les résultats montrent que les schémas multi-domaines en temps conservent les principaux avantages des schémas explicites classiques et introduisent moins de diffusion numérique. Nous avons montré que dans des cas hydrauliques pratiques, le schéma explicite à pas de temps local permet de diminuer considérablement le temps de calcul.

Dans la troisième partie de ce travail, la résolution des écoulements densitaires est abordée. Quand la variation de la masse volumique est non négligeable, les équations de l'écoulement et du transport sont couplées. Il en résulte alors une variation continue du champ de vitesse dans le temps. Nous avons montré comment une procédure explicite multi-domaines peut être efficacement implémentée afin de prendre en compte l'évolution du champ hydrodynamique. Le schéma est tout d'abord validé en 2-D pour un problème d'intrusion saline avec présence d'un puits de pompage. Les expériences 3-D du "salt-pool problem" sont ensuite étudiées. Les simulations numériques montrent que des maillages fins et un calage de certains paramètres physiques sont nécessaires afin de réduire les différences observées entre les solutions numériques et expérimentales. Une confrontation avec les simulations obtenues avec d'autres codes de calcul est également effectuée. Le modèle basé sur le schéma explicite local donne les résultats les plus satisfaisants.

Dans la suite de ce travail, différentes pistes peuvent être envisagées :

- Le développement des schémas explicites multi-domaines d'ordre supérieur (Runge-Kutta d'ordre deux par exemple).
- L'application des schémas multi-domaines explicites à une stratégie de raffinement de maillage spatio-temporel (raffinement/déraffinement dynamique).
- L'utilisation des θ -schémas adoptant un paramètre d'"implicité" θ variable. Une discrétisation semi-implicite sera considérée par exemple dans des régions où le nombre de CFL local est grand (vitesses importantes, maillage fin) et où les gradients de concentration sont inférieurs à une tolérance fixée a priori. Dans les au-

- tres régions, un schéma explicite sera implémenté afin de bien approximer les fronts de concentrations les plus raides.
- L'intégration des schémas multi-domaines au sein de codes de calcul du transport réactif. Les phénomènes liés à la chimie seront pris en compte à l'aide d'une technique de séparation d'opérateurs appropriée.

Les Annexes

Annexe A :

Formules de passage entre l'élément de référence et l'élément réel

Afin de simplifier la définition analytique des éléments réels de forme complexe, la notion d'élément de référence a été introduite. Un élément de référence \hat{E} est un élément de forme plus simple, repéré dans un espace de référence, qui peut être transformé en chaque élément réel E par une transformation géométrique F . Cette transformation définit les coordonnées $\mathbf{x} = (x, y)$ de chaque point de l'élément réel à partir des coordonnées $\hat{\mathbf{x}} = (u, v)$ du point correspondant de l'élément de référence :

$$\begin{aligned} F : \hat{E} &\rightarrow E \\ \hat{\mathbf{x}} &\rightarrow \mathbf{x} = F(\hat{\mathbf{x}}) \end{aligned} \quad (\text{A1})$$

A.1. L'élément triangulaire (2D) :

La transformation F est définie dans le cas d'un maillage triangulaire (figure 2.1) de manière unique par :

$$\begin{aligned} (0,0) &\xrightarrow{F} (x_1, y_1) \\ (1,0) &\xrightarrow{F} (x_2, y_2) \\ (0,1) &\xrightarrow{F} (x_3, y_3) \end{aligned}$$

Les expressions analytiques de $x(u, v)$ et $y(u, v)$ sont les suivantes :

$$x(u, v) = \langle N_1, N_2, N_3 \rangle \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad (\text{A2})$$

$$y(u, v) = \langle N_1, N_2, N_3 \rangle \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} \quad (\text{A3})$$

Les fonctions de base géométriques sont :

$$\begin{aligned} N_1 &= 1 - u - v \\ N_2 &= u \\ N_3 &= v \end{aligned} \tag{A4}$$

Nous définissons par $DF(\hat{\mathbf{x}})$ la matrice jacobéenne de la transformation F définie par :

$$DF(\hat{\mathbf{x}}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial u} & \frac{\partial x}{\partial v} \\ \frac{\partial y}{\partial u} & \frac{\partial y}{\partial v} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 & d_2 \\ d_3 & d_4 \end{bmatrix} \tag{A5}$$

avec : $d_1 = x_2 - x_1$, $d_2 = x_3 - x_1$, $d_3 = y_2 - y_1$ et $d_4 = y_3 - y_1$.

Le déterminant de $DF(\hat{\mathbf{x}})$ est noté $J_F(\hat{\mathbf{x}})$.

Les fonctions de base des éléments finis mixtes hybrides sont définies sur l'élément de référence \hat{E} de la façon suivante :

$$\omega_1^{\hat{E}} = \begin{pmatrix} u \\ v-1 \end{pmatrix} \quad \omega_2^{\hat{E}} = \begin{pmatrix} u-1 \\ v \end{pmatrix} \quad \omega_3^{\hat{E}} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \tag{A6}$$

A.2. L'élément rectangulaire (2D) :

La transformation F est définie dans le cas d'un maillage quadrangulaire (figure 2.2) de manière unique par :

$$\begin{aligned} (0,0) &\xrightarrow{F} (x_1, y_1) \\ (1,0) &\xrightarrow{F} (x_2, y_2) \\ (1,1) &\xrightarrow{F} (x_3, y_3) \\ (0,1) &\xrightarrow{F} (x_4, y_4) \end{aligned}$$

Les expressions analytiques de $x(u, v)$ et $y(u, v)$ sont les suivantes :

$$x(u, v) = \langle N_1, N_2, N_3, N_4 \rangle \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} \quad (\text{A7})$$

$$y(u, v) = \langle N_1, N_2, N_3, N_4 \rangle \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{bmatrix} \quad (\text{A8})$$

Les fonctions de base géométriques sont :

$$\begin{aligned} N_1 &= 1 - u - v + uv \\ N_2 &= u - uv \\ N_3 &= uv \\ N_4 &= v - uv \end{aligned} \quad (\text{A9})$$

Les fonctions de base des éléments finis mixtes hybrides sont définies sur l'élément de référence \hat{E} de la façon suivante :

$$\omega_1^{\hat{E}} = \begin{pmatrix} u \\ 0 \end{pmatrix} \quad \omega_2^{\hat{E}} = \begin{pmatrix} u-1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \omega_3^{\hat{E}} = \begin{pmatrix} 0 \\ v \end{pmatrix} \quad \omega_4^{\hat{E}} = \begin{pmatrix} 0 \\ v-1 \end{pmatrix} \quad (\text{A10})$$

A.3 Passage de l'élément réel à l'élément de référence pour les différents types de calcul :

Les différentes opérations sont présentées pour l'élément bidimensionnel triangulaire. Ces opérations sont identiques pour les éléments quadrangulaires et hexaédriques. Les intégrales contenant exclusivement des fonctions de base de l'élément E sont évaluées analytiquement sur un élément de référence \hat{E} . Les autres intégrales faisant intervenir également des fonctions de base des éléments voisins sont calculées en utilisant la formule d'approximation de Simpson.

A.3.1 La transformation d'un vecteur

Considérons par exemple le cas d'une des fonctions de base des éléments mixtes hybrides, la transformation d'un vecteur s'écrit :

$$\omega_i^E(x, y) = \frac{1}{J_F(\hat{\mathbf{x}})} DF(\hat{\mathbf{x}}) \omega_i^{\hat{E}}(u, v) \quad (\text{A11})$$

A.3.2 La transformation d'une intégrale de surface

Le passage de l'élément réel à l'élément de référence pour l'intégrale de surface d'une fonction scalaire s'écrit :

$$\int_E f(x, y) dx dy = \int_{\hat{E}} f(x(u, v), y(u, v)) J_F(u, v) du dv \quad (\text{A12})$$

Cette propriété nous permet de calculer les différents termes de la matrice $A_{i,j}$ définis par :

$$A_{i,j} = \int_E \phi_j^E \phi_i^E = \int_{u=0}^1 \int_{v=0}^{1-u} \hat{\phi}_j^{\hat{E}} \hat{\phi}_i^{\hat{E}} \quad (\text{A13})$$

avec par exemple dans le cas d'un élément triangulaire :

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_1^{\hat{E}}(u, v) &= 1 \\ \hat{\phi}_2^{\hat{E}}(u, v) &= x_1 + d_1 u + d_2 v - \bar{x}_E, \\ \hat{\phi}_3^{\hat{E}}(u, v) &= y_1 + d_3 u + d_4 v - \bar{y}_E. \end{aligned} \quad (\text{A14})$$

Nous pouvons également calculer les différents de la terme de la matrice $B_{i,j}$ définis par :

$$B_{i,j} = \int_E \phi_j^E \mathbf{V} \cdot \nabla \phi_i^E = \int_{u=0}^1 \int_{v=0}^{1-u} \hat{\phi}_j^{\hat{E}} \hat{\mathbf{V}} \cdot \nabla \hat{\phi}_i^{\hat{E}}$$

avec :

$$\nabla \hat{\phi}_1^{\hat{E}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \nabla \hat{\phi}_2^{\hat{E}} = \begin{pmatrix} d_1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \nabla \hat{\phi}_3^{\hat{E}} = \begin{pmatrix} 0 \\ d_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A15})$$

A.3.3 La transformation d'une intégrale de contour

$$\int_S f(x, y) dS = \int_{\hat{S}} f(s) J_s ds \quad (\text{A16})$$

où s est l'abscisse ou l'ordonnée de contour (qui est en général u ou v) et J_s est définie de la façon suivante :

$$J_s = \sqrt{\left(\frac{\partial x(s)}{\partial s}\right)^2 + \left(\frac{\partial y(s)}{\partial s}\right)^2} \quad (\text{A17})$$

Cette propriété nous permet de calculer les différents termes de la matrice $M_{i,j}^0$ définis par :

$$M_{i,j}^0 = \lambda_{\Gamma_1}^E \frac{Q_{\Gamma_1}^E}{|\Gamma_1|} \int_{\Gamma_1} \phi_i^E \phi_j^E + \lambda_{\Gamma_2}^E \frac{Q_{\Gamma_2}^E}{|\Gamma_2|} \int_{\Gamma_2} \phi_i^E \phi_j^E + \lambda_{\Gamma_3}^E \frac{Q_{\Gamma_3}^E}{|\Gamma_3|} \int_{\Gamma_3} \phi_i^E \phi_j^E \quad (\text{A18})$$

Considérons par exemple, l'intégrale $\int_{\Gamma_1} \phi_2^E \phi_3^E$. Sur l'élément de référence, la facette Γ_1 est caractérisé par $v = 0$. En utilisant les expressions (A14) pour $\phi_2^{\hat{E}}$ et $\phi_3^{\hat{E}}$, nous obtenons pour $v = 0$:

$$\begin{cases} \phi_2^{\hat{E}}(u) = x_1 + d_1 u - \bar{x}_E \\ \phi_3^{\hat{E}}(u) = y_1 + d_3 u - \bar{y}_E \end{cases} \quad (\text{A19})$$

et $J_s = \sqrt{d_1^2 + d_3^2}$. L'intégrale $\int_{\Gamma_1} \phi_2^E \phi_3^E$ devient alors :

$$\int_{\Gamma_1} \phi_2^E \phi_3^E = \int_0^1 (x_1 + d_1 u - \bar{x}_E)(y_1 + d_3 u - \bar{y}_E) \sqrt{d_1^2 + d_3^2} du \quad (\text{A20})$$

A.4 Intégrales calculées en utilisant l'approximation de Simpson

Soit f une fonction continue sur $[a, b]$, la méthode de Simpson consiste à approcher l'intégrale $\int_a^b f(x) dx$. Elle donne des résultats exacts pour des polynômes de degré inférieur ou égal à trois et s'exprime par :

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] \quad (\text{A21})$$

Cette propriété nous permet de calculer les différents termes des matrices $M_{i,j}^1$, $M_{i,j}^2$ et $M_{i,j}^3$ définis par :

$$\begin{aligned} M_{i,j}^1 &= (1 - \lambda_{\partial E_1}^E) \frac{Q_{\Gamma_1}^E}{|\Gamma_1|} \int_{\Gamma_1} \phi_i^E \phi_j^{E_1}, & M_{i,j}^2 &= (1 - \lambda_{\Gamma_2}^E) \frac{Q_{\Gamma_2}^E}{|\Gamma_2|} \int_{\Gamma_2} \phi_i^E \phi_j^{E_2}, \\ M_{i,j}^3 &= (1 - \lambda_{\Gamma_3}^E) \frac{Q_{\Gamma_3}^E}{|\Gamma_3|} \int_{\Gamma_3} \phi_i^E \phi_j^{E_3}. \end{aligned} \quad (\text{A22})$$

En effet, considérons par exemple l'intégrale $\int_{\Gamma_1} \phi_2^E \phi_3^{E_1}$ sur la facette Γ_1 , nous avons :

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_1} \phi_2^E \phi_3^{E_1} &= \\ |\Gamma_1| &\left[(x_1 - \bar{x}_E)(y_1 - \bar{y}_{E_1}) + 4 \left(\frac{x_1 + x_2}{2} - \bar{x}_E \right) \left(\frac{y_1 + y_2}{2} - \bar{y}_{E_1} \right) + (x_2 - \bar{x}_E)(y_2 - \bar{y}_{E_1}) \right] \end{aligned} \quad (\text{A23})$$

Annexe B :

Résolution de l'équation de dispersion par la méthode des EFMH

Nous adoptons une discrétisation temporelle implicite :

$$\frac{C^{n+1} - C}{\Delta t} = (\nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla C))^{n+1} \quad (\text{B1})$$

Le flux dispersif \mathbf{q}_D défini par :

$$\mathbf{q}_D = -\mathbf{D} \cdot \nabla C \quad (\text{B2})$$

est écrit sous une formulation variationnelle en utilisant les $\boldsymbol{\omega}_i^E$ comme fonctions de pondération :

$$\sum_{j=1}^{N_f} Q_{d,j} \int_E \boldsymbol{\omega}_i^E \cdot (\mathbf{D}_E^{-1} \cdot \boldsymbol{\omega}_j^E) = \int_E C (\nabla \cdot \boldsymbol{\omega}_i^E) - \sum_{j=1}^{N_f} \int_{\Gamma_j} C (\boldsymbol{\omega}_i^E \cdot \boldsymbol{\eta}_j) \quad (\text{B3})$$

où les $Q_{d,i}$ sont les flux dispersifs à travers les facettes Γ_i de l'élément E . L'équation (B3) peut être sous la formulation matricielle suivante :

$$Q_{d,i} = \alpha_{d,i}^E \bar{C}^E - \sum_{j=1}^{N_f} (B_{d,ij}^E)^{-1} TC_j^E, \quad (\text{B4})$$

où \bar{C}^E est la fraction massique moyenne sur l'élément E , TC_j^E est la fraction massique moyenne sur la facette Γ_j de l'élément E , et

$$B_{d,ij}^E = \int_E \boldsymbol{\omega}_i^E \cdot \mathbf{D}_E^{-1} \cdot \boldsymbol{\omega}_j^E, \quad \alpha_{d,i}^E = \sum_{k=1}^{N_f} B_{d,ik}^E. \quad (\text{B5})$$

Comme dans le cas de l'équation de l'écoulement, nous écrivons la continuité des flux dispersifs entre deux éléments adjacents E et E' :

$$\begin{aligned}
Q_{d,i}^E + Q_{d,j}^{E'} &= \alpha_{d,i}^E \bar{C}^E - \sum_{k=1}^{N_f} (B_{d,ik}^E)^{-1} TC_k^E + \alpha_{d,j}^{E'} \bar{C}^{E'} \\
&\quad - \sum_{k=1}^{N_f} (B_{d,jk}^{E'})^{-1} TC_k^{E'} = 0.
\end{aligned} \tag{B6}$$

L'équation (B1) est réécrite en utilisant une discrétisation volumes finis en espace :

$$\int_E \frac{\partial C}{\partial t} = \int_E \nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla C) = - \sum_{i=1}^{N_f} Q_{d,i}^E, \tag{B7}$$

et une discrétisation d'Euler implicite en temps :

$$|E| \frac{\bar{C}_E^{n+1} - \bar{C}_E^n}{\Delta t} = \sum_{i=1}^{N_f} \left(\alpha_{d,i}^E (\bar{C}^E)^{n+1} - \sum_{j=1}^{N_f} (B_{d,ij}^E)^{-1} TC_j^E \right) \tag{B8}$$

La concentration moyenne dans l'équation (B6) est remplacée par son expression obtenue à partir de l'équation (B8). Nous obtenons alors un système de N équations dont les inconnues sont les TC_i^E où N étant le nombre total de facettes.

Bibliographie

- Ackerer, Ph., Younes, A., Mosé, R., 1999. Modelling variable Density Flow and Solute transport in porous medium: 1. Numerical model and verification. *Transport in Porous Media* 35, 345-373.
- Ackerer, Ph., Younes, A., Oswald, S., Kinzelbach, W., 2000. On modelling of density driven flow. Calibration and Reliability in Groundwater Modelling: Coping with uncertainty. In: Stauffer F. et al, editors, *Proc ModelCARE99 Conf. Zurich, IAHS Pub.* 265, 377-384.
- Ackerer, Ph., Younes, A., Mancip, M., 2004. A new coupling algorithm for density-driven flow in porous media. *Geophysical research letters*, 31, L12506.
- Alcurdo, F., et Garcia-Navarro, P., 1993. A high-resolution Godunov-type scheme in finite volumes for the 2D shallow water equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 15, 489-505.
- Alcrudo, F., Garcia-Navarro, P., Priestley, A., 1994. An implicit method for water flow modelling in channels and pipes. *Journal of Hydraulic Research* 32, 721-742.
- Anderson, M., 1979. Using models to simulate the movement of contaminants through groundwater systems. *Critical Reviews in Environmental Controls* 9, 97-156.
- Angrand, F., Erhel, J., Leyland, P., 1989. Fully vectorized implicit scheme for 2D viscous hypersonic flow using adaptive finite element methods. *International Symposium on Numerical Methods in Engineering*, 765-774.
- Batu, V., 1989. A generalized two-dimensional analytical solution for hydrodynamic dispersion in bounded media with the first-type boundary condition at the source. *Water Resources Research* 25, 1125-1132.
- Batu, V., 1993. A generalized two-dimensional analytical solute transport model in bounded media for flux-type finite multiple sources. *Water Resources Research* 29, 2281-2892.
- Beam, R.M., Warming, R.F., 1976. An implicit finite-difference algorithm for hyperbolic systems in conservation-law form. *Communications in Numerical Methods in Engineering* 22, 87-110.
- Bear, J., 1979. *Hydraulics of Groundwater. McGraw-Hill Series in Water Resources and Environmental Engineering, New-York.*
- Besnard, K., 2003. Modélisation du transport réactif dans les milieux poreux hétérogènes. Application aux processus d'adsorption cinétique non linéaire. *Thèse de Doctorat de l'Université de Rennes I, Rennes.*
- Brezzi, F., Fortin, M., 1991. *Mixed and hybrid finite element methods. Springer-Verlag, New-York.*

- Burbeau, A., Sagaut, P., Bruneau, Ch.H., 2001. A Problem-Independent Limiter for High-Order Runge-Kutta Discontinuous Galerkin Methods. *Journal of Computational Physics* 169, 111-150.
- Carey, G.F., Barth, W., Woods, J.A., Kirk, B.S., Anderson, M.L., Chow, S., Bangerth, W., 2004. Modelling error and constitutive relations in simulation of flow and transport. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 46, 1211-1236.
- Chavent, G., Cockburn, B., 1989. The local projection p0-p1 discontinuous-Galerkin finite element method for scalar conservation laws. *M2AN* 23, 565-592.
- Chavent, G., Jaffré, J., 1986. Mathematical Models and Finite Elements for Reservoir Simulation. *North Holland*.
- Chavent, G., Roberts, J.E., 1991. A unified physical presentation of mixed, mixed hybrid finite elements and standard finite difference approximations for the determination of velocities in waterflow problems. *Advances in Water Resources* 14, 329-348.
- Chavent G., Salzano G., 1982. A finite element method for 1D water flooding problem. *Journal of computational Physics* 45, 307-344.
- Cockburn, B., 2003. Discontinuous Galerkin methods. *Journal of applied Mathematics and Mechanics* 11, 731-754.
- Cockburn, B., Shu, C.W., 1998. The Runge-Kutta discontinuous Galerkin method for conservation laws V. *Journal of Computational Physics* 141, 199-224.
- Cockburn, B., Shu, C.W., 1991. The Runge-Kutta local projection P₁-discontinuous Galerkin finite element method for scalar conservation laws. *M2AN* 25, 337-361.
- Comiti, J., Sabiri, N.E., Montillet, A., 2000. Experimental characterization of flow regime in various porous media – iii limit of Darcy's or creeping flow regime for Newtonian and purely viscous non –newtonian fluids. *Chemical Engineering Science* 55, 3057-3061.
- Crandall, M.G., Majda, A., 1980. Monotone Difference Approximations for Scalar Conservation Laws. *Mathematics of Computation* 34, 1-21.
- Crouzeix, M., Raviart, P.A., 1973. Conforming and non conforming finite element methods for solving the stationary stokes equations. *RAIRO Analyse Numérique* R3, 33-76.
- Dagan, G., 1989. Flow and Transport in Porous Formations. *Springer-Verlag*.
- Dagan, G., 1987. Theory of Solute Transport by Groundwater. *Annual Review of Fluid Mechanics* 19, 183-215.
- Davis, T., A., Duff, I.S., 1997. A combined Unifrontal/Multifrontal method for unsymmetric sparse matrices. *Technical Report TR-97-016*. Computer and Information Science and Engineering Department, University of Florida.

- Dawson, C., 1991. Godunov-mixed methods for advection flow problems in one space dimension. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 28, 1282–1309.
- Dawson, C., 1993. Godunov-mixed methods for advection-diffusion equations in multidimensions. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 30, 1315–1332.
- Dawson, C.N., Aizinger, V., 1998. Upwind-mixed methods for transport equations. *Technical Report 98-18, Texas Institute for Computational and Applied Mathematics, The University of Texas at Austin.*
- Dawson, C.N., Wheeler, M.F., 1992. Time splitting methods for advection-diffusion-reaction equations arising in contaminant transport. In *Industrial and Applied Mathematics, Ed. O'Malley, SIAM*, 71-82.
- Dawson, C., Wheeler, M.F., Kinton, W., 1988. Time-splitting for advection dominated parabolic problems in one space variable. *Communications in Applied Numerical Methods* 4, 413-423.
- Dawson, C., 1995. High resolution upwind-mixed finite element methods for advection-diffusion equations with variable time-stepping. *Numerical Methods for Partial Differential Equations* 11, 525–538.
- Dawson, C., Kirby, R., 2001. High resolution schemes for conservation laws with locally varying time steps. *SIAM Journal on Scientific Computing* 22, 2256–2281.
- Diersch, H.J., Kolditz, O., 2002. Variable-density flow and transport in porous media: approaches and challenges. *Advances in Water Resources* 25, 899-944.
- De Josselin de Jong, G., 1958. Longitudinal and transverse diffusion in granular deposits. *Transactions. American Geophysical Union* 39, 1-67.
- Delis, A.I., Skeels, C.P., Ryrie, S.C., 2000. Implicit high-resolution methods for modelling one-dimensional open channel flow. *Journal of Hydraulic Research* 38, 369-382.
- De Marsily, G., 1981. Hydrogéologie Quantitative. *Collection des Sciences de la Terre, Masson, Paris.*
- Descombes, S., 2001. Convergence of a splitting method of high order for reaction diffusion systems. *Mathematics of Computation* 70, 1481-1501.
- Desideri, J.A., Hemker, P.W., 1990. Analysis of the convergence of iterative implicit and defect-correction algorithms for hyperbolic problems. *Rapport INRIA n° 1200.*
- Domenico, P.A., Robbins, G.A., 1985. A new method of contaminant plume analysis. *Ground Water* 23, 476-485.
- Douglas, J., Wang, J., 1993. A new family of mixed finite element spaces over rectangles. *Applied mathematics and computation.* 12, 183-197.

- Essaid, H.I., 1990. The computer model SHARP, a quasi three-dimensional finite-difference model to simulate freshwater and saltwater flow in layered coastal aquifer systems. *U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 90-4310*, 181 p.
- Evans, D.G., Raffensperger, J.P., 1992. On the stream function for variable density groundwater flow. *Water Resources Research* 28, 2141-2145.
- Evje, S., Karlsen, H.K., 1999. Viscous splitting approximation of mixed hyperbolic-parabolic convection-diffusion equations. *Numerische Mathematik* 83, 107-137.
- Flaherty, R., Loy, R.M., Shephard, M.S., Szymanski, B.K., Teresco, J.D., Ziantz, L.H., 1997. Adaptive local refinement with octree load-balancing for the parallel solution of three-dimensional conservation laws. *Journal of Parallel and Distributed Computing* 47, 139-152.
- Freeze, R.A., Cherry, J.A., 1979. Groundwater. *Prentice Hall publication, New Jersey*.
- Fried, J.J., 1975. Groundwater pollution. *Elsevier, Amsterdam*.
- Frink, N.T., 1992. Upwind scheme for solving the Euler equations on unstructured tetrahedral meshes. *AIAA Journal* 30, 70-77.
- Fumeaux, C., Baumann, D., Leuchtman, P., Vahldieck, R., 2004. A generalized local time-step scheme for efficient FVTD simulations in strongly inhomogeneous meshes. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques* 52, 1067-1076.
- Geijselaers, H.J.M., Huétink, J., 2003. A second order discontinuous Galerkin method for advection on unstructured triangular meshes. *Communications in Numerical Methods in Engineering* 19, 275-284.
- Gelhar, L.W., Gutjahr, A.L., Naff, R.L., 1979. Stochastic-Analysis of Macrodispersion in a Stratified Aquifer. *Water Resources Research* 15, 1387-1397.
- Gjesdal, T., Teigland, R., 1997. Accuracy and stability of semi-implicit finite difference advection schemes. *Communications in Numerical Methods in Engineering* 14, 647-655.
- Godunov, S.K., 1959. A difference scheme for numerical computation of discontinuous solutions of equations in fluid dynamics. *Maematischeskii Sbornik* 47, 271-306.
- Goodman, J.B., Leveque, R.J., 1985. On the accuracy of stable schemes for 2D scalar conservation laws. *Mathematics of Computation* 45, 15-21.
- Gowda, V., Jaffré, J., 1993. A discontinuous finite element method for scalar nonlinear conservation laws. *Rapport de recherche INRIA 1848*.
- Griffol, J., Gasto, J.M., Cohen, Y., 2005. Non-isothermal soil water transport and evaporation. *Advances in Water Resources* 28, 1254-1266.

- Guillot, M.J., Rivière, R., Wheeler, M.F. 2002. An implementation of a discontinuous Galerkin discretization of the mass conservation equations in CEQUAL-ICM. *TICAM Report 02-29, Austin*.
- Haber, R.B., 2000. Space-time discontinuous Galerkin methods for hyperbolic conservation laws. *TICAM Seminar*.
- Harten, A., 1983. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 49, 357-393.
- Henry, H.R., 1964. Interfaces between salt water and fresh water in coastal aquifers. *U.S. Geological Survey Water-Supply Paper 1613-C, Sea Water in Coastal Aquifers: C35-C70*.
- Herbert, A., Jackson, C., Lever, D., 1988. Coupled groundwater flow and solute transport with fluid density strongly dependent upon concentration. *Water Resources Research* 24, 1781-1795.
- Hermann, L.R., 1967. Finite element bending analysis for plates. *Journal of engineering mechanics division (ASCE)* 93, 13-26.
- Hildebrand, F.B., 1962. Advanced calculus for Applications. *Prentice-Hall, Englewood Cliffs*.
- Holzbecher, E., 1998. Modelling density-driven flow in porous media. *Springer*.
- Hoteit, H., 2002. Simulations d'écoulements et de transports de polluants en milieu poreux : Application à la modélisation de la sureté des dépôts de déchets radioactifs. *Thèse de Doctorat de l'Université de Rennes 1, Rennes*.
- Hoteit, H., Ackerer, Ph., Mosé, R., Erhel, J., Philippe, B., 2004. New two-dimensional slope limiters for discontinuous Galerkin methods on arbitrary meshes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 61, 2566-2593.
- Hughes, T.J.R., Liu, W.K., 1978. Implicit-explicit finite elements in transient analysis: implementation and numerical examples. *Journal of Applied Mechanics* 45, 375-378.
- Hundsdoerfer, W., Verwer, J.G., 2003. Numerical solution of time-dependent advection-diffusion-reaction equations. *Springer Series in Computational Mathematics*.
- Huyakorn, P., Anderson, P., Mercer, J., White, H., 1987. Saltwater intrusion in aquifers: development and testing of a three-dimensional finite element model. *Water Resources Research* 23, 293-312.
- Jacquín, C., 1965. Écoulement à travers des argiles compactes. *Revue de l'Institut de Pétrole* XX, 1475-1501.
- Johannsen, K., Kinzelbach, W., Oswald, S., Wittum, G., 2002. The salt-pool benchmark problem-numerical simulation of salt water upconing in a porous medium. *Advances in Water Resources* 25, 335-348.

- Kaasschieter, E.F., 1990. Mixed hybrid finite elements for saturated groundwater flow. *In Computer methods in water resources*, Venice, Italy, June 11-15, Computational Mechanics Publications, 17-22.
- Kaddouri, L., 1993. Une méthode d'éléments finis discontinus pour les équations d'Euler des fluides compressibles. *Thèse de Doctorat de l'Université Paris VI, Paris*.
- Karlsen, K.H., Lie, K.A., Natvig, J.R., Nordhaug, H.F., Dahle, H.K., 2001. Operator splitting methods for systems of convection-diffusion equations: nonlinear error mechanisms and correction strategies. *Journal of Computational Physics* 173, 636-663.
- Karlsen, K.H., Risebro, N.H., 1997. An operator splitting method for convection diffusion equations. *Numerische Mathematik* 77, 365-382.
- Kinzelbach, W., 1988. The random walk method in pollutant transport simulation. *Groundwater flow and quality modeling*, 227-246.
- Kirby, R., 2000. A posteriori error estimates and local time-stepping for flow and transport problems. *Ph.D thesis, University of Texas*.
- Kirby, R., 2001. On the convergence of high resolution methods with multiple time scales for hyperbolic conservation laws. *Mathematics of Computation* 72, 1239-1250.
- Kolditz, O., Ratke, R., Diersch, H.J., Zielke, W., 1997. Coupled groundwater flow and transport: 1. Verification of variable-density flow and transport models. *Advances in Water Resources* 21, 27-46.
- Konikow, L.F., Campbell, P.J., Sanford, W.E., 1996. Modelling brine transport in a porous medium : a re-evaluation of the hydrocoin level 1, case 5 problem. *Calibration and Reliability in Groundwater Modelling* 237, 363-372.
- Lax, P.D., Wendroff, B., 1960. Systems of Conservation Laws. *Communication on Pure and Applied Mathematics* 13, 217-237.
- Leij Feike, J., Dane, J.H., 1990. Analytical solution of the one-dimensional advection equation and two- or three-dimensional dispersion equation. *Water Resources Research* 26, 1475-1482.
- Lerat, A., 1981. Sur le calcul des solutions faibles des lois de conservation à l'aide de schémas aux différences. *Thèse de Doctorat de l'Université Paris VI, Paris*.
- Lerat, A., Peyret, R., 1975. Propriétés dispersives d'une classe de schémas aux différences pour les systèmes hyperboliques non linéaires. *La Recherche Aérospatiale* 1975, 61-79.
- Lesaint, P., Raviart, P.A., 1974. On a finite element method for solving the neutron transport equation. *In: Mathematical Aspects of Finite Elements in partial Differential equations (C. de Boor, Ed.)*, Academic Press, New York, 89-145.
- Leveque, R.J., 2002. Finite volume methods for hyperbolic problems. *Cambridge University Press*.

- Lin, Q., Zhou, A., 1993. Convergence of the discontinuous Galerkin method for a scalar hyperbolic equation. *Acta Mathematica. Scientia* 13, 207–210.
- Liu, W.K., Belytschko, T., 1982. Mixed-time implicit-explicit finite elements for transient analysis. *Computer and Structures* 15, 445-450.
- Liu, W.K., Belytschko, T., Zhang, Y.F., 1984. Implementation and accuracy of mixed-time implicit-explicit methods for structural dynamics. *Computer and Structures* 15, 521-530.
- Lohman, S.W. 1972. Ground-water hydraulics. *U.S. Geological Survey Professional Paper* 708.
- Lowrie, R., Roe, P., Van Leer, B., 1998. Space-time methods for hyperbolic conservation laws. *Barriers and challenges in computational fluids dynamics*, 79-98.
- Marini, D., 1985. An inexpensive method for the evaluation of the solution of the lowest order Raviart-Thomas mixed method. *SIAM Journal of Numerical Analysis* 22, 493-496.
- Mas-Gallic, A., 1987. Contribution à l'analyse numérique des méthodes particulières. *Thèse d'état de l'Université Paris VI, Paris*.
- Mazzia, A., Bergamaschi, L., Putti, M., 2000. A time-splitting technique for the advection-dispersion equation in groundwater. *Journal of Computational Physics* 157, 181-198.
- Molson, J.W., Frind, E.O., 1994. SALTFLOW: density-dependent flow and mass transport model in three dimensions: user guide, version 2.0. *Waterloo Centre for Groundwater Research*, University of Waterloo.
- Mosé, R., 1990. Application de la méthode des éléments finis mixtes hybrides et de la "marche au hasard" pour la modélisation de l'écoulement et du transport de masse en milieu poreux. *Thèse de Doctorat de l'Université Louis Pasteur, Strasbourg*.
- Mosé, R., Siegel, P., Ackerer, Ph., Chavent, G. 1994. Application of the mixed hybrid finite element approximation in a groundwater flow model: luxury or necessity? *Water Resources Research* 30, 3001-3012.
- Ogata, A., Banks, R.B., 1961. A solution of differential equation of longitudinal dispersion in porous media. *Professional Paper* 411-A, U.S. Geological Survey.
- Ogata, A., 1964. Mathematics of dispersion with linear adsorption isotherm. *Professional Paper* 411-H, U.S. Geological Survey.
- Ogata, A., 1970. Theory of dispersion in granular medium. *Professional Paper* 411-1, U.S. Geological Survey.
- O'Neill, K., 1981. Highly efficient oscillation free solution of the transport-equation over long times and large spaces. *Water Resources Research* 17, 1665-1675.

- Osher, S., Sanders, R., 1983. Numerical approximations to nonlinear conservation Laws with locally varying time and space Grids. *Mathematics of Computation* 41, 321-336.
- Osher, S., 1985. Convergence of generalized schemes. *SIAM Journal of Numerical analysis* 22, 947-961.
- Osher, S., Chakravarthy, S., 1984. High resolution schemes and the entropy condition. *SIAM Journal in Numerical Analysis* 21, 955-984.
- Oswald, S., Kinzelbach, W., Greiner, A., Brix, G., 1997. Observation of flow and transport processes in artificial porous media via magnetic resonance imaging in three dimensions. *Geoderma* 80, 417-429.
- Oswald, S., 1998. Dichteströmungen in porösen Medien: Dreidimensionale Experimente und Modellierung, *PhD Thesis, ETH Zürich (CH)*.
- Oswald, S.E., Scheidegger, M.B., Kinzelbach, W., 2002. Time-dependent measurement of strongly density-dependent flow in a porous medium via nuclear magnetic resonance imaging. *Transport in Porous Media* 47, 169-193.
- Oswald, S.E., Kinzelbach, W., 2003. Three-dimensional physical benchmark experiments to test variable-density flow models. *Journal of Hydrology* 290, 22-42.
- Oude Essink, G.H.P., 2001. Improving fresh groundwater supply-problems and solutions. *Ocean and Coastal Management* 44, 429-449.
- Peaceman, D.W., 1977. Fundamentals of numerical reservoir simulation. *Elsevier, Amsterdam*.
- Peyret, R., Taylor, T.D., 1983. Computational methods for Fluid Flow. *Springer-Verlag, New-York*.
- Piperno, S., 2006. Symplectic local time-stepping in non-dissipative DGTD methods applied to wave propagation problems. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis* 40, 815-841.
- Prickett, T.A., Naymik, T.G., Lonquist, C.G., 1981. A random walk solute transport model for selected groundwater quality evaluations. *Illinois State Water Survey, Bulletin* 65.
- Putti, M., Yeh, W., Mulder, W., 1990. A triangular finite volume approach with high-resolution upwind terms for the solution of groundwater transport equations. *Water Resources Research* 26, 2865-2880.
- Raviart, P.A., Thomas, J.M., 1977. A mixed finite element method for second order elliptic problems. *In: Mathematical Aspects of Finite Element Method, Lecture Notes Math.*, Springer-Verlag, New York, 292-315.
- Reed, J.E., 1980. Type curves for selected problems of flows to wells in confined aquifers. *Techniques of Water-Resources Investigations of the U.S. Geological Survey*.

- Reed, W.H., Hill T.R., 1973. Triangular mesh methods for the neutron transport equation. *Technical report, Los Alamos Scientific Laboratory.*
- Reeves, M., Ward, D.S., Johns, N.D., Cranwell, R.M., 1986. Theory and implementation of SWIFT II, the sandia waste-isolation flow and transport model for fractured media. *Technical Report SAND83 1159, Sandia National Laboratory.*
- Remacle, J.F., Pinchedez, K., Flaherty, J.E., Shephard, M.S., 2001. An efficient local time stepping discontinuous Galerkin for adaptive transient computations. *Technical Report 2001-13, SCORECRPI, TROY-NY.*
- Remson, I., Hornberger, G.M., Molz, F.J., 1971. Numerical methods in subsurface hydrology. *Wiley, New-York.*
- Sauty, J.P., 1980. An analysis of hydrodispersive transfer in aquifers. *Water Resources Research* 16, 145-158.
- Sboui, A., 2007. Quelques méthodes numériques robustes pour l'écoulement et le transport en milieu poreux. *Thèse de Doctorat de l'Université Paris Dauphine, Paris.*
- Sboui, A., Jaffré, J., 2006. Discrétisation en temps par sous-domaine pour un problème d'advection en milieu poreux. *ARIMA* 5, 330-346.
- Siegel, P., 1995. Transfert de masse en milieu poreux fortement hétérogène : modélisation et estimation de paramètres par éléments finis mixtes hybrides et discontinus. *Thèse de Doctorat de l'Université Louis Pasteur, Strasbourg.*
- Siegel, P., Mosé, R., Ackerer, Ph., Jaffré, J., 1997. Solution of the advection-diffusion equation using a combination of discontinuous and mixed finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 24, 595-613.
- Smith, L., Schwartz, F.W., 1980. Mass transport: 1, A stochastic analysis of macroscopic dispersion. *Water Resources Research* 16, 303-313.
- Sportisse, B., 2000. An analysis of operator splitting techniques in the stiff case. *Journal of Computational Physics* 161, 140-168.
- Stève, H., 1988. Schémas implicites linéarisés décentrés pour la résolution des équations d'Euler en plusieurs dimensions. *Thèse de Doctorat de l'Université de Provence Aix-Marseille I, Marseille.*
- Stoufflet, B., 1984. Résolution numérique des équations d'Euler des fluides parfaits compressibles par des schémas implicites en éléments finis. *Thèse de Doctorat de l'Université de Paris VI, Paris.*
- Sun, N.Z., 1999. A finite cell method for simulating the mass transport process in porous media. *Water Resources Research* 35, 3649-3662.
- Sweby, P.K., 1984. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM Journal for Numerical Analysis* 21, 995-1011.

- Thomas, A., 1977. Sur l'analyse numérique des méthodes d'éléments finis hybrides et mixtes. *Thèse de Doctorat de l'Université de Pierre et Marie Curie, Paris.*
- Toro, E., 1997. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid dynamics, *Springer.*
- Trefry, M., Muffels, C., 2007. FEFLOW: a finite-element ground water flow and transport modelling tool. *Ground Water* 45, 525–528.
- Van Genuchten, M.T., 1981. Analytical solutions for chemical transport with simultaneous adsorption, zero-order production and first order decay. *Journal of Hydrology* 49, 213-223.
- Van Leer, B., 1977. Towards the ultimate conservative scheme: IV. A new approach to the numerical convection. *Journal of Computational Physics* 23, 276-299.
- Van Leer, B., 1979. Towards the ultimate conservative scheme: V. A second order Godunov's method. *Journal of Computational Physics* 32, 101-136.
- Voss, C.I., 1984. A finite element simulation model for saturated-unsaturated, fluid density dependent groundwater flow with energy transport or chemically-reactive single species solute transport. *USGS Water Resources Investigations Report* 847-4369.
- Voss, C., Souza, W., 1978. Variable density flow and solute transport simulation of regional aquifers containing a narrow freshwater-salt water transition zone. *Water Resources Research* 26, 2097-2106.
- Walton, W.C., 1962. Selected analytical methods for well and aquifer evaluation. *Illinois State Water Survey Bull* 49.
- Wang, J.F., Anderson, M.P., 1982. Introduction to groundwater modelling. *Freeman, San Francisco.*
- Wang, G.T., Singh, V.P., Chen, S., 1998. Mixing cell method for solving the solute transport equation with spatially variable coefficients. *Hydrological Processes* 12, 781-795.
- Yeh, G.T., 1999. Computational Subsurface Hydrology: Fluid Flows. *Kluwer Academic Publishers.*
- Younes, A., 1998. Modélisation de l'écoulement et du transfert de masse en milieu poreux avec les éléments finis mixtes et discontinus - prise en compte du contraste de masse volumique. *Thèse de Doctorat de l'Université Louis Pasteur, Strasbourg.*
- Younes, A., Ackerer, Ph., Mosé, R., 1999. Modelling variable density flow and solute transport in porous media: 2. Re-evaluation of the salt dome flow problem. *Transport in Porous Media* 35, 375–394.
- Younes, A., 2003. On modelling the multidimensional coupled fluid and heat or mass transport in porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 46, 367-379.

- Younes, A., 2005. Contribution à la modélisation des transferts d'eau, de masse et d'énergie dans les milieux poreux hétérogènes. *Habilitation à diriger les recherches de l'Université Louis Pasteur, Strasbourg*.
- Zhou, X., Fhu, F., 1983. Numerical computation of transonic flows over airfoils and cascades. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 37, 277–288.
- Zoppou, C., Knight, J.H., 1994. Comment on "A space-time accurate method for solving solute transport problems" par Li, S.G., Ruan, F., McLaughlin, D., *Water Resources Research* 30, 3233-3235.

Liste des figures

	Page
Figure 1.1 : Évolution de la porosité totale d'une sphère centrée en un point P du milieu poreux en fonction de son rayon r.	11
Figure 1.2 : Effets des principaux processus de transport sur la répartition spatiale d'un panache à un temps donné (Besnard, 2003).	17
Figure 2.1 : Élément de référence et élément réel pour un maillage triangulaire.	29
Figure 2.2 : Élément de référence et élément réel pour un maillage quadrangulaire.	30
Figure 2.3 : Différents espaces d'approximation dans le cas des EFD.	44
Figure 2.4 : Une maille quadrangulaire et ses quatre mailles voisines E_1 , E_2 , E_3 et E_4 .	46
Figure 2.5 : Transport d'un contaminant dans un champ d'écoulement uniforme.	50
Figure 2.6 : Exemple d'un maillage quadrangulaire non-structuré obtenu à partir d'un maillage structuré avec $\Delta x = \Delta y = 2.0$ m..	50
Figure 2.7 : Distributions de concentrations dans le cas d'un maillage structuré et $\Delta x = 2.0$ m obtenus avec (a) l'approche Q_1 et (b) l'approche P_1 .	52
Figure 2.8 : Distributions de concentrations dans le cas d'un maillage non-structuré et $\Delta x = 2.0$ m obtenus avec (a) l'approche Q_1 et (b) l'approche P_1 .	53
Figure 2.9 : Une maille triangulaire E et ses trois mailles voisines E_1 , E_2 et E_3 .	54
Figure 2.10 : Maillage fortement déstructuré dans le cas du transport d'une gaussienne.	60
Figure 3.1 : Le maillage triangulaire fortement déstructuré.	69
Figure 3.2 : Profils d'isoconcentrations, erreurs et temps de calcul CPU obtenus à l'aide de la méthode EFD_EFMH avec différentes valeurs de θ pour Cas 1.	70
Figure 3.3 : Profils d'isoconcentrations, erreurs et temps de calcul CPU obtenus à l'aide de la méthode EFD_EFMH avec différentes valeurs de θ pour Cas 2.	71

Figure 3.4	: Profils d'isoconcentrations, erreurs et temps de calcul CPU obtenus à l'aide de la méthode EFD_EFMH avec différentes valeurs de θ pour Cas 3.	72
Figure 3.5	: Profils d'isoconcentrations, erreurs et temps de calcul CPU obtenus à l'aide de la méthode VF_EFMH avec différentes valeurs de θ pour Cas 1.	73
Figure 3.6	: Séquence d'ordonnement d'un schéma à pas de temps local pour $\ell_{\max} = 3$.	82
Figure 3.7	: Regroupement des éléments en 5 zones différentes dans le cas d'un champ d'écoulement uniforme.	84
Figure 3.8	: Distributions de concentrations obtenues par le schéma EFD_EFMH et une discrétisation explicite (a) globale et (b) locale pour Cas 1.	85
Figure 3.9	: Profils transversaux (a) et longitudinaux (b) obtenus par le schéma EFD_EFMH et une discrétisation explicite globale et locale pour Cas 1.	85
Figure 3.10	: Distributions de concentrations obtenues par le schéma EFD_EFMH et une discrétisation explicite (a) globale et (b) locale pour Cas 2.	86
Figure 3.11	: Profils transversaux (a) et longitudinaux (b) obtenus par le schéma EFD_EFMH et une discrétisation explicite globale et locale pour Cas 2.	86
Figure 3.12	: Distributions de concentrations obtenues par le schéma EFD_EFMH et une discrétisation explicite (a) globale et (b) locale pour Cas 3.	87
Figure 3.13	: Profils transversaux (a) et longitudinaux (b) obtenus par le schéma EFD_EFMH et une discrétisation explicite globale et locale pour Cas 3.	87
Figure 3.14	: Gain réel en temps CPU obtenu dans le cas du transport dans un champ d'écoulement uniforme.	90
Figure 3.15	: Profils longitudinaux obtenus par le schéma EFD_EFMH et une discrétisation semi-implicite et explicite local (a) Cas 1 (b) Cas 2 (c) Cas 3.	91
Figure 3.16	: Maillage fortement déstructuré et regroupement des éléments en 7 zones différentes dans le cas du transport d'une gaussienne.	93

Figure 3.17	: Profils de la gaussienne après une rotation complète obtenus à l'aide du schéma explicite (a) local et (b) global.	94
Figure 3.18	: Maillage fortement déstructuré et regroupement des éléments en 7 zones différentes dans le cas du double puits.	96
Figure 3.19	: Résultats obtenus par le schéma EFD_EFMH et une discrétisation explicite (a) locale et (b) globale dans le cas du double puits.	97
Figure 3.20	: Gain réel en temps CPU obtenu dans le cas du double puits.	98
Figure 4.1	: Maillage localement raffiné au voisinage du puits d'extraction.	109
Figure 4.2	: Regroupement dynamique des différents éléments pour (a) T=1500 s et (b) T=4000 s.	110
Figure 4.3	: Fractions massiques obtenues à l'aide des schémas (a) TRACES_v1 et (b) TRACES_v2.	111
Figure 4.4	: Dispositif expérimental (Oswald, 1998).	112
Figure 4.5	: Les différents maillages A, B, C et D.	114
Figure 4.6	: Courbes de restitution expérimentales et numériques obtenues par les deux codes TRACES_v1 et TRACES_v2.	115
Figure 4.7	: Distribution de la fraction massique pour le "salt-pool problem" (iso-surfaces : 0.05, 0.5, 0.8) simulée à l'aide du code TRACES-v2.	116
Figure 4.8	: Simulation de l'expérience Saltp-L (cas 1) avec le code TRACES_v2.	118
Figure 4.9	: Simulation de l'expérience Saltp-D (cas 2) avec le code TRACES_v2.	118
Figure 4.10	: Simulation de l'expérience Saltp-L (cas 1) avec différents codes de calcul.	119
Figure 4.11	: Simulation de l'expérience Saltp-D (cas 2) avec différents codes de calcul.	120

Liste des tableaux

	Page
Tableau 2.1 : Temps CPU obtenus avec les deux espaces P_1 et Q_1 dans le cas de maillages quadrangulaires structurés.	51
Tableau 2.2 : Temps CPU obtenus avec les deux espaces P_1 et Q_1 dans le cas de différents maillages quadrangulaires non-structurés.	51
Tableau 2.3 : Résultats obtenus pour les différentes techniques de limitation de pente dans le cas du transport d'une gaussienne.	61
Tableau 3.1 : Différentes valeurs du nombre de Péclet utilisées pour le problème du transport dans un champ d'écoulement uniforme.	69
Tableau 3.2 : Concentrations maximales obtenues à l'aide de la méthode des EFD_EFMH pour différentes valeurs de θ .	74
Tableau 3.3 : Erreurs et temps CPU obtenus dans le cas du transport dans un champ d'écoulement uniforme.	88
Tableau 3.4 : Comparaison entre les schémas semi-implicite et explicite local dans le cas du transport dans un champ d'écoulement uniforme.	92
Tableau 3.5 : Résultats obtenus dans le cas du transport d'une gaussienne.	93
Tableau 3.6 : Nombre d'éléments par zone dans le cas du double puits.	96
Tableau 3.7 : Différentes valeurs du nombre de Péclet pour le problème du double puits.	96
Tableau 4.1 : Paramètres physiques et conditions aux limites pour le problème de l'intrusion saline avec présence d'un puits de pompage.	110
Tableau 4.2 : Valeurs de la fraction massique mesurée à la sortie pour le cas Saltp-L ($C_m^* = 1\%$).	112
Tableau 4.3 : Valeurs de la fraction massique mesurée à la sortie pour le cas Saltp-D ($C_m^* = 10\%$).	113
Tableau 4.4 : Paramètres géométriques et physiques du "salt-pool problem".	119

ELEMENTS FINIS DISCONTINUS MULTI-DOMAINES EN TEMPS POUR LA MODELISATION DU TRANSPORT EN MILIEU POREUX SATURÉ

RESUME :

Ce travail s'intéresse à la modélisation du transport de polluants en milieu poreux. L'équation hyperbolique caractérisant le transport convectif est résolue à l'aide de la méthode des éléments finis discontinus de Galerkin. La discrétisation spatiale est étudiée dans un premier temps et deux espaces d'approximation sont comparés pour des maillages déstructurés en 2-D. La discrétisation temporelle est abordée dans un second temps et deux alternatives au schéma explicite classique sont présentées afin de s'affranchir de la condition CFL : le schéma semi-implicite et le schéma explicite multi-domaines où différents pas de temps peuvent être utilisés localement. La dernière partie de ce travail porte sur la simulation des problèmes de transfert avec prise en compte du contraste de densité. L'équation de transport est alors couplée à celle de l'hydrodynamique. La discrétisation temporelle multi-domaines est implémentée en 3-D et s'avère redoutablement efficace dans ce genre de situations.

Mots clés : *transport en milieu poreux, équation de conservation, séparation d'opérateurs, éléments finis discontinus, discrétisation multi-domaines en temps, écoulements densitaires.*

LOCAL TIME STEPPING AND DISCONTINUOUS GALERKIN SCHEMES FOR SOLVING THE TRANSPORT EQUATION IN POROUS MEDIA

ABSTRACT:

This work treats the modeling of mass transport in porous media. The advective part of the transport equation is solved using the discontinuous Galerkin (DG) finite element method. In the first part, the discretization of the spatial operator is considered and two approximation spaces are studied and compared for unstructured meshes in 2-D. The temporal discretization is tackled in the second part of this study. Two alternatives to the traditional explicit scheme are presented : a class of semi-implicit schemes and an explicit local time-stepping procedure which allows spatially varying time steps. Finally, the last part of this work consists of using the developed numerical tools to simulate density coupled flow and transport in porous media. The local time procedure is implemented in a 3-D numerical code and numerical experiments show that the model gives accurate results being highly efficient for this kind of problems.

Key words: *transport in porous media, conservation equation, operator splitting, discontinuous finite element method, local time-stepping, density driven flow.*