

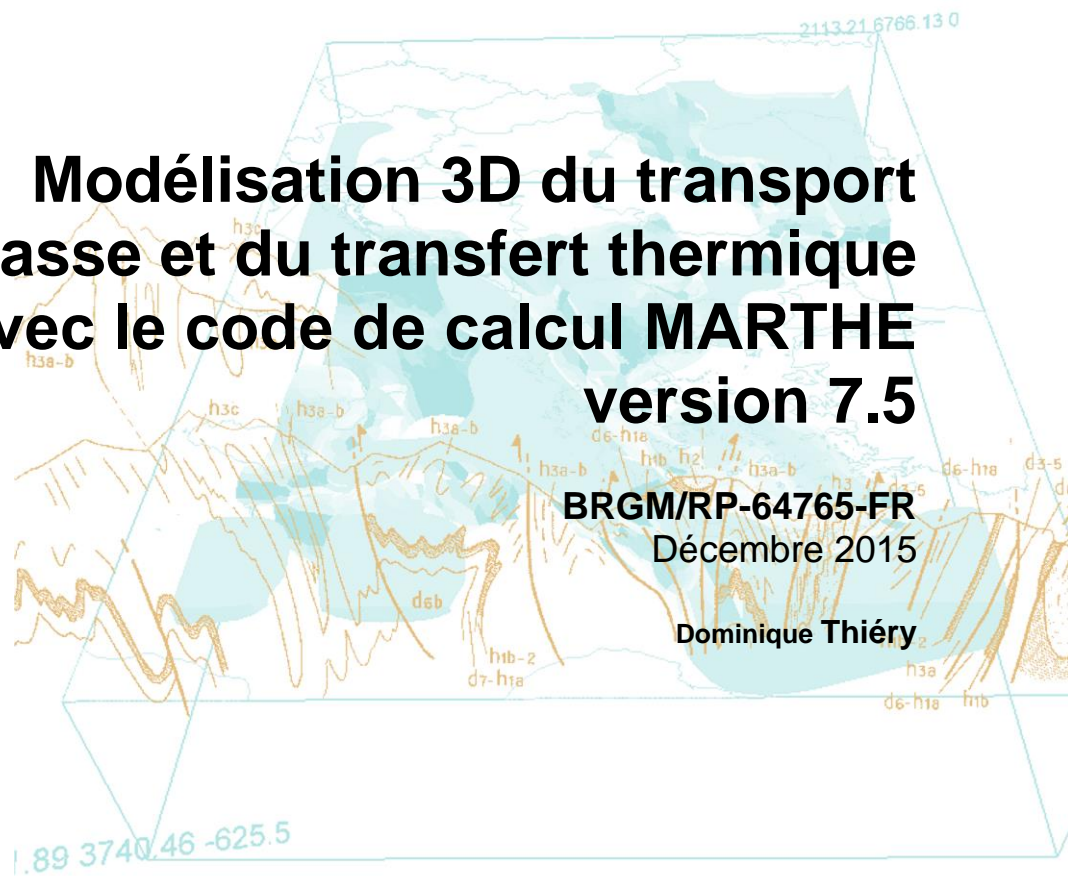
Document public



# Modélisation 3D du transport de masse et du transfert thermique avec le code de calcul MARTHE version 7.5

BRGM/RP-64765-FR  
Décembre 2015

Dominique Thiéry



Géosciences pour une Terre durable

**brgm**



# Modélisation 3D du transport de masse et du transfert thermique avec le code de calcul MARTHE version 7.5

**BRGM/RP-64765-FR**  
Décembre 2015

Rapport écrit dans le cadre des projets  
de maturation du BRGM

**Dominique Thiéry**

**Vérificateur :**

Nom : J.J. Seguin

Date : 21/12/2015



Signature :

**Approbateur :**

Nom : S. Lallier

Date : 08/01/2016



Signature :

Le système de management de la qualité et de l'environnement  
est certifié par AFNOR selon les normes ISO 9001 et ISO 14001.

Mots-clés : Modélisation des écoulements souterrains, Transport de masse, Transferts thermiques, Transfert de chaleur, Transfert d'énergie thermique, Méthode TVD

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

Thiéry D. (2015) – Modélisation 3D du transport de masse et du transfert thermique avec le code de calcul MARTHE – version 7.5. BRGM/RP-64765-FR, 324 p., 158 fig.

© BRGM, 2015, ce document ne peut être reproduit en totalité ou en partie sans l'autorisation expresse du BRGM.

## Synthèse

Ce rapport présente le calcul du transport de masse et le calcul de transfert thermique avec le code de calcul MARTHE ®, version 7.5 de Décembre 2015.

Le transport de masse et le transfert thermique sont simulés en régime permanent ou transitoire, en zone saturée ou non-saturée, en 3D, en 2D, en 1D, en coupe ou en symétrie cylindrique. Les transferts de masse et de chaleur concernent les aquifères et aussi les réseaux de rivières et de drains.

Les calculs de transferts sont intégralement couplés au calcul hydrodynamique du champ de charge hydraulique ou du champ de pression hydraulique, y compris dans le cas où ces écoulements dépendent d'un gradient de densité ou d'un gradient thermique.

Le rapport présente successivement :

- Les variables et les termes utilisés.
- Le principe de la modélisation du transfert de masse avec le code de calcul MARTHE.
- Les paramètres du code de calcul relatifs au transport de masse.
- La modélisation des écoulements à double porosité.
- La modélisation du transfert thermique.
- Le transport de salinité avec prise en compte des effets densitaires.
- Des cas d'application et de vérification du code de calcul.

Les calculs de transport se font au choix :

- par la méthode TVD ;
- par la méthode des différences finies (DF) ;
- par la méthode des caractéristiques (MOC) ;
- par particules avec déplacement aléatoire (Random Walk).

Les paramètres de transport peuvent être déterminés par calibration automatique.

Des informations détaillées sur le code de calcul MARTHE ® du BRGM sont disponibles sur le site : <http://marthe.brgm.fr/>

## Sommaire

<b>1</b>	<b>Introduction .....</b>	<b>13</b>
<b>2</b>	<b>TRANSPORT DE MASSE CLASSIQUE .....</b>	<b>15</b>
<b>3</b>	<b>Notations pour le transport de masse classique .....</b>	<b>17</b>
<b>4</b>	<b>Définition des variables .....</b>	<b>19</b>
<b>5</b>	<b>Modélisation avec le code de calcul MARTHE .....</b>	<b>27</b>
<b>6</b>	<b>Description détaillée des paramètres généraux relatifs au transport.....</b>	<b>57</b>
<b>7</b>	<b>Exemples de fichiers de « Paramètres Généraux » pour le transport de masse .....</b>	<b>73</b>
<b>8</b>	<b>Mise en œuvre rapide des calculs de transport de masse .....</b>	<b>75</b>
<b>9</b>	<b>Dispersion numérique liée aux méthodes de calcul du transport .....</b>	<b>77</b>
<b>10</b>	<b>TRANSPORT AVEC DOUBLE POROSITÉ .....</b>	<b>87</b>
<b>11</b>	<b>Transport de masse avec double porosité .....</b>	<b>89</b>
<b>12</b>	<b>Modélisation du transport à double porosité avec le code de calcul MARTHE .....</b>	<b>96</b>
<b>13</b>	<b>TRANSFERT THERMIQUE .....</b>	<b>103</b>
<b>14</b>	<b>Transfert thermique et prise en compte des effets de la température.....</b>	<b>105</b>
<b>15</b>	<b>Modélisation du transfert thermique avec le code de calcul MARTHE.....</b>	<b>115</b>
<b>16</b>	<b>Description détaillée des paramètres généraux relatifs aux calculs de transfert thermique.....</b>	<b>127</b>
<b>17</b>	<b>Mise en œuvre rapide pour des calculs de transfert thermique .....</b>	<b>143</b>
<b>18</b>	<b>Valeurs de conductivité thermique et de capacité thermique.....</b>	<b>147</b>
<b>19</b>	<b>Solutions analytiques de transfert thermique .....</b>	<b>149</b>
<b>20</b>	<b>TRANSPORT DE SALINITÉ, EFFETS DENSITAIRES.....</b>	<b>153</b>
<b>21</b>	<b>Notations pour les calculs avec effets densitaires .....</b>	<b>155</b>
<b>22</b>	<b>Définition des grandeurs utilisées dans MARTHE pour les calculs de salinité .....</b>	<b>157</b>
<b>23</b>	<b>Principes des calculs de transport de salinité .....</b>	<b>161</b>
<b>24</b>	<b>Les fichiers de données supplémentaires pour le transport de salinité .....</b>	<b>177</b>
<b>25</b>	<b>Description détaillée des paramètres relatifs à la prise en compte des effets de la</b>	

densité.....	179
<b>26 EXEMPLES D'APPLICATION ET DE VÉRIFICATION .....</b>	<b>189</b>
<b>27 Vérification du calcul de transport de masse classique et exemples d'application .</b>	<b>191</b>
<b>28 Vérification du calcul de transfert de masse avec double porosité et exemples d'application.....</b>	<b>229</b>
<b>29 Vérification du calcul de transfert thermique et exemples d'application .....</b>	<b>245</b>
<b>30 Vérification du calcul de transport de salinité avec effets densitaires et exemples d'application.....</b>	<b>277</b>
<b>31 Incompatibilités .....</b>	<b>317</b>
<b>32 FAQ.....</b>	<b>318</b>
<b>33 Conclusions .....</b>	<b>319</b>
<b>34 Références bibliographiques.....</b>	<b>321</b>

## Liste des figures

Figure 1 – Volumes, masses et concentrations relatives à un volume unitaire de terrain. ....	20
Figure 2 – Création ou modification d'un fichier d'asservissements de concentration. ....	38
Figure 3 – Définition des paramètres de l'asservissement de concentration.....	39
Figure 4 – Exemple de fichier d'asservissement de concentration (2 asservissements). ....	39
Figure 5 – Introduction d'un nouveau fichier d'asservissement de concentration au pas de temps n°7.....	40
Figure 6 – Sélection du fichier « Points de départ de trajectoires ».....	42
Figure 7 – Exemple de fichier « Départ de trajectoires ».....	43
Figure 8 – Sélection des points de départ de trajectoire.....	44
Figure 9 – Extrait de fichier « flux_mass.out » présentant les échanges massiques par les quatre faces des mailles n°22 et n°112. ....	48
Figure 10 – Exemple de fichier trajectoires : fichier « trajmar.out ».....	50
Figure 11 – Calcul du champ de concentration.....	51
Figure 12 – Méthode TVD ou DF : bilan des débits massiques et critères de convergence. ....	52
Figure 13 – Nombres de Courant et de Péclet ; cumul des masses échangées au cours de la simulation.....	52
Figure 14 – Calcul du champ de concentration par la méthode MOC. 2 étapes : 1) convection par particules ; 2) dispersion par différences finies. ....	53
Figure 15 – Calcul du champ de concentration par la méthode Random Walk, et bilan des débits massiques.....	54
Figure 16 – Liste des fichiers (et des champs) relatifs au transport de masse.....	55

Figure 17 – Sélection du fichier des « Paramètres Généraux ».	57
Figure 18 – Paramètres généraux : Paragraphe « Unités des données ».	57
Figure 19 – Fichier des paramètres généraux : Paragraphe « Options de Géométrie, etc. ».	59
Figure 20 – Fichier des paramètres généraux : Paragraphe « Couplage et transport ».	60
Figure 21 – Fichier des paramètres généraux : Paragraphe « Concentration et trajectoires ».	68
Figure 22 – Sélection du fichier des mailles à historiques.	72
Figure 23 – Fichier des paramètres généraux : Trajectoires seules.	73
Figure 24 – Fichier des paramètres généraux : Transport permanent par la méthode DF + trajectoires.	73
Figure 25 – Fichier des paramètres généraux : Transport transitoire par la méthode TVD.	74
Figure 26 – Fichier des paramètres généraux : Transport transitoire par la méthode MOC.	74
Figure 27 – Méthode DF : Dispersion numérique. En haut : influence du maillage dx. En bas : influence du pas de temps dt. Dessins de gauche : Injection continue. Dessins de droite : Dirac.	80
Figure 28 – Méthode TVD : Dispersion numérique lors d'une « Injection continue ». Influence du maillage dx. (La dispersion numérique est très inférieure à celle avec la méthode DF).	81
Figure 29 – Méthode TVD : Dispersion numérique pour un « Dirac ». Influence du maillage dx. (La dispersion numérique est très inférieure à celle obtenue avec la méthode DF).	81
Figure 30 – Méthode TVD : Dispersion numérique pour un « Dirac ». Influence du maillage dx. Ratio : (Dispersion numérique) / dx. Il est inférieur à 0.1	82
Figure 31 – Méthode TVD : Dispersion numérique pour un « Dirac ». Influence du maillage dx. Pas de temps $\leftrightarrow$ Nombre de Courant = 1 : La dispersion numérique est significativement réduite par rapport à un pas de temps plus petit.	83
Figure 32 – Méthode TVD : Dispersion numérique pour un « Dirac ». Influence du maillage dx. Avec un Nombre de Courant = 1, la dispersion numérique ne dépasse pas dx/30.	83
Figure 33 – Injection continue : Nombre de Péclet = 9. En haut : méthode TVD ; En bas : méthode MOC.	84
Figure 34 – Injection instantanée (Dirac) : Nombre de Péclet = 9. En haut : méthode TVD ; En bas : méthode MOC.	85
Figure 35 – Fichier des paramètres généraux : Paragraphe « concentration et trajectoires ».	100
Figure 36 – Équivalence des champs et paramètres entre transport de masse et transfert thermique.	115
Figure 37 – Affectation d'un indice d'éponte thermique (lors de l'initialisation).	117
Figure 38 – Définition d'un « indice d'éponte thermique analytique » dans la couche n°2.	117
Figure 39 – Création ou modification d'un fichier d'asservissements de température.	121
Figure 40 – Définition des paramètres de l'asservissement de température.	121
Figure 41 – Exemple de fichier d'asservissement de température (2 asservissements).	121
Figure 42 – Introduction d'un nouveau fichier d'asservissement de température au pas de temps n°60.	122
Figure 43 – Liste des fichiers (et des champs) relatifs au transfert thermique.	124
Figure 44 – Sélection du fichier des « Paramètres Généraux ».	127
Figure 45 – Fichier des paramètres généraux : Paragraphe « Couplage et transport ».	128



Figure 46 – Fichier des paramètres généraux : Paragraphe « Température et effets thermiques ».	134
Figure 47 – Variation de la masse volumique de l'eau en fonction de la température Calcul pour différentes salinités (NaCl).	135
Figure 48 – Variation de la viscosité dynamique de l'eau douce en fonction de la température. Loi exponentielle et loi racine carrée (quasiment superposées).	136
Figure 49 – Variation de la viscosité dynamique de l'eau en fonction de la salinité (NaCl). En ordonnée : Rapport de la viscosité du fluide à la viscosité de l'eau douce à la même température. En abscisse : Concentration en NaCl en g / kg d'eau, soit sensiblement en g /L. Cet effet n'est pas pris en compte dans cette version de MARTHE.	137
Figure 50 – Fichier des paramètres : Transfert thermique permanent, méthode des différences finies.	142
Figure 51 – Fichier des paramètres : Transfert thermique transitoire par la méthode TVD.	142
Figure 52 – Fichier des paramètres : Transfert thermique transitoire par la méthode MOC.	142
Figure 53 – Ordre de grandeur de conductivité thermique.	147
Figure 54 – Ordre de grandeur de capacité thermique volumique.	147
Figure 55 – Masse volumique d'une solution saline à 15 °C en fonction de la salinité (Concentration volumique en sel NaCl).	171
Figure 56 – Dérivée de la masse volumique par rapport à la salinité (concentration en NaCl).	172
Figure 57 – Masse volumique à 15 °C d'une solution saline fortement concentrée en fonction de la salinité (NaCl).	172
Figure 58 – Variation de la masse volumique en fonction de la température (salinité 0, 35, 100 et 200 kg/m <sup>3</sup> de NaCl).	173
Figure 59 – Liste des fichiers (et des champs) relatifs au transport de salinité	177
Figure 60 – Rocky Mountain : courbes d'iso-concentration calculées en régime permanent par la méthode DF. Comparaison avec la simulation par le code de calcul SUTRA en éléments finis.	195
Figure 61 – Rocky Mountain : concentration après 44 ans. Méthode TVD et méthode MOC. (Les échelles de couleur sont différentes).	196
Figure 62 – Rocky Mountain : concentration après 44 ans. Méthode DF.	196
Figure 63 – Écoulement à surface libre Champ de charge hydraulique calculé, surface libre et lignes de courant.	198
Figure 64 – Écoulement à surface libre. Transport par la méthode DF : Schéma pseudo-ZNS.	198
Figure 65 – Écoulement à surface libre. Transport par la méthode TVD : Schéma pseudo-ZNS.	199
Figure 66 – Écoulement à surface libre. Transport par la méthode MOC : Schéma pseudo-ZNS.	199
Figure 67 – Infiltration en Zone Non Saturée à partir d'un canal. Teneur en eau calculée en régime permanent.	202
Figure 68 – Infiltration en Zone Non Saturée à partir d'un canal. Concentration calculée après 90 heures.	203
Figure 69 – Solution analytique de Cleary. Concentration le long de l'axe des x à 4 dates. Calcul par les méthodes TVD, MOC et DF.	205
Figure 70 – Solution analytique de Cleary. Champ de concentration à la date 640 s : méthodes TVD, MOC et DF.	206
Figure 71 – Écoulement oblique à 45 degrés en coupe verticale : Transport par la méthode TVD. MARTHE = Isovaleurs en brun ; Solution analytique = isovaleurs en noir.	208

Figure 72 a, b, c, d - Écoulement oblique à 45 degrés en coupe verticale : Transport par les méthodes DF, MOC et RW. La solution analytique est en trait continu. ....	209
Figure 73 – Injection instantanée à proximité d'une limite étanche. Simulation par les méthodes TVD, MOC et RW. Simulation MARTHE en traits rouges, solution analytique en traits noirs.....	211
Figure 74 – Injection instantanée. Écoulement autour d'un carré étanche.Méthode TVD. En haut : le champ de la charge hydraulique, en bas : le champ de la concentration. ....	213
Figure 75 – Injection instantanée. Écoulement autour d'un carré étanche. En haut : Méthode MOC, au milieu méthode RW. En bas : Position des particules RW en fin de calcul.	214
Figure 76 – Injection continue dans un écoulement cylindrique. Profils de concentration à quatre dates (20.9, 41.9, 62.8, 83.8 jours). Solution analytique de Gelhar et Collins en trait continu. Simulations MARTHE = Symboles. Méthodes TVD, MOC et DF. ....	217
Figure 77 – Infiltration dans une colonne verticale Non Saturée en régime transitoire. Profils de référence de teneur en eau et de concentration.....	220
Figure 78 – Infiltration dans une colonne verticale ZNS en régime transitoire. Concentration calculée par la méthode TVD. Profils de référence en trait continu.....	221
Figure 79 – Infiltration dans une colonne verticale ZNS en régime transitoire. Concentration calculée par méthodes TVD, MOC, RW, DF_2 cm et DF_0.25 cm Simulation TVD en trait continu.....	222
Figure 80 – Transfert thermique dans un écoulement radial : Température calculée à trois dates. ....	225
Figure 81 – Transport dans un milieu très hétérogène :Concentration calculée avec un maillage fin. ....	227
Figure 82 – Transport dans un milieu très hétérogène. Concentration calculée par les méthodes TVD, MOC et DF.....	228
Figure 83 – Cinétiques d'échange entre la phase mobile et la phase immobile. ....	232
Figure 84 – Injection de masse dans une colonne infinie. Double porosité avec cinétique. Évolution temporelle de la concentration à 8 cm du point d'injection. De haut en bas :cinétique $1/\beta = \text{infini}$ , 500 s, 100 s et 0.01 s. ....	232
Figure 85 – Injection de masse dans une colonne infinie. Double porosité avec cinétique. Évolution temporelle de la concentration dans la phase immobile, à 8 cm du point d'injection, pour 4 cinétiques.....	233
Figure 86 – Injection de masse dans une colonne infinie. Double porosité avec cinétique. Évolution temporelle à 8 cm du point d'injection : méthode MOC. ....	233
Figure 87 – Concentration imposée dans une colonne semi-infinie. Double porosité avec cinétique. Évolution temporelle de la concentration à 8 cm du point d'injection. De haut en bas :cinétique $1/\beta = \text{infini}$ , 500 s, 100 s et 0.01 s.....	234
Figure 88 – Dilution dans une colonne finie (temps de $\frac{1}{2}$ échange = 2.567).....	236
Figure 89 – Dilution dans une colonne finie. Concentration moyenne (masse).....	236
Figure 90 – Test « Rocky Mountain ». Concentration après 2 ans. En haut : référence (sans porosité immobile) En bas : à gauche : concentration ; à droite : concentration dans la phase immobile.....	238
Figure 91 – Test « Rocky Mountain ». Concentration après 60 ans. En haut : référence (sans porosité immobile) En bas : à gauche : concentration ; à droite : concentration dans la phase immobile. ....	239
Figure 92 – Exemple n°5 : Calibration automatique des deux paramètres.....	240

- Figure 93 – Concentration imposée dans une colonne semi-infinie. Concentration dans l'eau libre avant et après calibration. (Double porosité avec cinétique). Évolution temporelle à 8 cm. Les courbes de concentration de référence et de concentration calculée en fin de calibration sont indiscernables, ce qui indique une calibration parfaite. .... 241
- Figure 94 – Dilution dans une colonne finie avec deux régions à vitesses différentes (temps de  $\frac{1}{2}$  échange = 2.567)..... 244
- Figure 95 – Dilution dans une colonne finie avec deux régions à vitesses différentes. Concentration moyenne (masse). ..... 244
- Figure 96 – Simulation avec le code de calcul MARTHE de la conduction thermique en écoulement radial avec injection d'un flux thermique. Domaine uniforme. Comparaison avec la solution analytique logarithmique. .... 248
- Figure 97 – Simulation avec le code de calcul MARTHE de la conduction thermique en écoulement radial avec injection d'un flux thermique. Domaine hétérogène. Comparaison avec la solution analytique logarithmique. .... 248
- Figure 98 – Simulation avec le code de calcul MARTHE de la conduction thermique à travers une paroi verticale avec injection d'un flux thermique sur une paroi. Comparaison avec la solution analytique. .... 249
- Figure 99 – Milieu saturé. Simulation avec le code de calcul MARTHE d'un pompage de chaleur en milieu infini. Profils de température à 10 j, 50 j, 100 j, 150 j, 200 j, 300 j et 365 j. Comparaison avec la solution analytique (symboles). .... 251
- Figure 100 – Milieu non-saturé. Simulation avec le code de calcul MARTHE d'un pompage de chaleur en milieu infini. Profils de température à 10 j, 50 j, 100 j, 150 j, 200 j, 300 j et 365 j. Comparaison avec la solution analytique (symboles). .... 251
- Figure 101 – Milieu saturé et non-saturé. Simulation avec le code de calcul MARTHE d'un pompage de chaleur en milieu infini. Profils de température après 365 j. Comparaison avec la solution analytique (symboles). .... 252
- Figure 102 – Simulation avec le code de calcul MARTHE d'un pompage de chaleur dans un forage en milieu infini non-saturé. Évolution de la température à différentes distances. Comparaison avec la solution analytique (symboles). .... 253
- Figure 103 – Simulation avec le code de calcul MARTHE d'une injection d'eau chaude dans une fracture (hypothèses de Lauwerier). Profils de température le long de la fracture après  $4 \cdot 10^6$  s (46.3 j),  $2 \cdot 10^7$  s (231.5 j),  $10^8$  s (3.17 ans) et  $4 \cdot 10^8$  s (12.68 ans). Comparaison avec la solution analytique (trait continu). .... 256
- Figure 104 – Simulation avec le code de calcul MARTHE d'une injection d'eau chaude dans une fracture (hypothèses de Lauwerier). Profils de température dans l'éponte, en  $x=0$ , après  $4 \cdot 10^6$  s (46.3 j),  $2 \cdot 10^7$  s (231.5 j),  $10^8$  s (3.17 ans) et  $4 \cdot 10^8$  s (12.68 ans). Comparaison avec la solution analytique (trait continu). .... 256
- Figure 105 – Simulation avec le code de calcul MARTHE d'une injection d'eau à 160°C dans un forage implanté dans un aquifère initialement à 170°C. Profil de température après  $10^9$  secondes. Comparaison avec la solution analytique d'Avdonin (1964). .... 258
- Figure 106 – Simulation avec le code de calcul MARTHE d'une injection d'eau à 160°C dans un forage implanté dans un aquifère initialement à 170°C. Évolution de la température à 37.37 m de distance. Comparaison avec la solution analytique d'Avdonin (1964). .... 258
- Figure 107 – Simulation avec le code de calcul MARTHE d'une injection d'eau à 160°C en 1D dans un aquifère initialement à 170°C. Profil de température après  $1.3 \cdot 10^5$  secondes. Comparaison avec la solution analytique de Coats et Smith (1964). .... 259
- Figure 108 – Simulation avec le code de calcul MARTHE d'une injection d'eau à 160°C en 1D dans un aquifère initialement à 170°C. Évolution de la température à 20 m de distance. Comparaison avec la solution analytique de Coats et Smith (1964). .... 260

Figure 109 – Simulation avec le code de calcul MARTHE d’une injection d’eau à 160°C en 1D dans un aquifère initialement à 170°C. Profil de température après $1.3 \cdot 10^5$ secondes. Maillage grossier (nombre de Péclet = 5.38). Comparaison avec la solution analytique de Coats et Smith (1964). .....	260
Figure 110 – Vue en plan de la température dans l’aquifère après 17.5 et 35 ans. ....	264
Figure 111 – Vue en coupe verticale de la température dans l’aquifère et les épontes après 35 ans. ....	264
Figure 112 – Évolution de la température au puits de pompage (avec et sans prise en compte des épontes, avec et sans écoulement régional). ....	265
Figure 113 – Définition d’un « indice d’éponte thermique analytique » dans la couche n°2. ....	266
Figure 114 – Évolution de la température au puits de pompage : comparaison de la méthode approchée de Vinsome avec le calcul de référence avec 6 couches d’épontes thermiques. ....	266
Figure 115 – Création d’un fichier d’asservissements de température. ....	267
Figure 116 – Définition d’asservissements de température entre un puits de production et un puits d’injection. ....	267
Figure 117 – Asservissements de température : évolution de la température de production et d’injection. ....	268
Figure 118 – Mise en évidence de l’influence de l’asservissement de la température d’injection. ....	268
Figure 119 – Maillage avec indication du point d’injection de chaleur (en rouge). ....	269
Figure 120 – Température (°C). À gauche : après 90 mn, à droite : après 200 mn. ....	272
Figure 121 – Masse volumique de l’eau ( $\text{kg/m}^3$ ). À gauche : après 90 mn, à droite : après 200 mn. ....	272
Figure 122 – Charge hydraulique et vitesses après 90 mn. ....	272
Figure 123 – Évolution du profil de charge hydraulique dans la colonne au cours du temps. ....	275
Figure 124 – Évolution du profil de température dans la colonne au cours du temps. ....	276
Figure 125 – Biseau salé de Henry en régime permanent : Extraits du fichier des « Paramètres Généraux ». ....	280
Figure 126 – Biseau salé de Henry en régime permanent : Récapitulation du couplage. ....	281
Figure 127 – Biseau salé de Henry en régime permanent : Bilan des débits en fin de calcul. ....	282
Figure 128 – Biseau salé de Henry en régime permanent : Bilan des flux massiques en fin de calcul. ....	282
Figure 129 – Biseau salé de Henry modélisé en coupe : salinité calculée ( $\text{kg/m}^3$ ). ....	283
Figure 130 – Biseau salé de Henry modélisé en coupe : charge hydraulique réelle calculée (cm). ....	283
Figure 131 – Biseau salé de Henry : charge en eau douce calculée (cm). ....	284
Figure 132 – Biseau salé de Henry : pression hydraulique calculée (cm). ....	284
Figure 133 – Biseau salé de Henry en régime permanent : Récapitulation du couplage et bilan des débits massiques. Calcul avec une densité élevée sans sous-relaxation. ....	285
Figure 134 – Biseau salé de Henry en régime permanent : Récapitulation du couplage et bilan des débits massiques. Calcul avec une densité élevée, avec une sous-relaxation égale à 0.50. ....	286
Figure 135 – Biseau salé de Henry en régime transitoire : Extraits du fichier des « Paramètres Généraux ». ....	288

Figure 136 – Biseau salé de Henry en régime transitoire : Résultats au pas de temps n°1, après 0.5 mn. ....	289
Figure 137 – Biseau salé de Henry en régime transitoire : Résultats au pas de temps n°15, après 80 mn : Récapitulation du couplage et bilan des débits d'eau. ....	290
Figure 138 – Biseau salé de Henry en régime transitoire : Résultats au pas de temps n°15, après 80 mn : Bilan massique du transport de la salinité. ....	291
Figure 139 – Biseau salé de Henry en régime transitoire : salinité calculée : après 3 mn (isovaleurs bleues) et après 80 mn (isovaleurs rouges). ....	292
Figure 140 – Biseau salé de Henry en régime transitoire : évolution au cours du temps du pied de l'interface. Comparaison avec des calculs réalisés par Frind (1982) et Galeati et al. (1992). ....	292
Figure 141 – Biseau salé de Henry en régime transitoire sans dispersion : salinité calculée par la méthode MOC : après 3 mn (isovaleurs bleues) et après 80 mn (isovaleurs rouges). ....	294
Figure 142 – Biseau salé de Henry en régime transitoire sans dispersion : salinité calculée par la méthode : TVD après 3 mn (isovaleurs bleues) et après 80 mn (rouges).....	295
Figure 143 – Écoulement plan monocouche avec un chenal : Extraits du fichier des « Paramètres Généraux ». ....	297
Figure 144 – Écoulement monocouche horizontal en présence d'un chenal. Salinité calculée après 80 mn : avec effets de densité. ....	297
Figure 145 – Écoulement monocouche horizontal en présence d'un chenal. Salinité calculée après 80 mn : sans effets de densité. ....	298
Figure 146 – Retour à l'équilibre dans un tube en U : Évolution de la position de l'interface (Symboles = solution analytique ; Trait continu = MARTHE Différences Finies). ....	302
Figure 147 – Retour à l'équilibre dans un tube en U : Évolution du débit entrant en bas de la colonne, et sortant par le haut. (Symboles= solution analytique ; Trait continu = MARTHE Méthode Différences Finies). ....	303
Figure 148 – Retour à l'équilibre dans un tube en U : Évolution de la charge à 38.5 m de profondeur. (Trait continu = Solution analytique ; - - - = MARTHE Méthode MOC). ....	303
Figure 149 – Retour à l'équilibre dans un tube en U : Évolution de la salinité à 38.5 m de profondeur. (Trait continu = Solution analytique ; - - - = MARTHE Méthode MOC). ....	303
Figure 150 – Retour à l'équilibre dans un tube en U : évolution de la charge à 38.5 mètres de profondeur. (Trait continu = Solution analytique ; - - - = MARTHE Méthode TVD). ....	304
Figure 151 – Retour à l'équilibre dans un tube en U : Évolution de la salinité à 38.5 m de profondeur (Trait continu = Solution analytique ; - - - = MARTHE Méthode TVD). ....	304
Figure 152 – Dôme de sel avec forte diffusion : Salinité calculée avec le code de calcul MARTHE (trait continu) comparée à celle obtenue (traits interrompus) par Herbert (1988). ....	307
Figure 153 – Dôme de sel avec faible dispersion : Salinité calculée avec le code MARTHE (trait continu) comparée à celle obtenue (traits interrompus) par Oldenburg et Pruess (1995). ....	308
Figure 154 – Injection d'un liquide dense non miscible. Salinité calculée après 50 minutes d'injection : Méthodes TVD, MOC et DF. ....	310
Figure 155 – Épandage d'un fluide léger et percolation à travers la Zone Non Saturée. Salinité calculée après 5000 mn. ....	313

Figure 156 – Prise en compte de la salinité, sans transport de la salinité Extraits du fichier des « Paramètres Généraux ».....	315
Figure 157 – Utilisation d'un champ de salinité, sans transport. Fichier des pas de temps. ....	316
Figure 158 – Salinité imposée, sans transport : visualisation du champ de charge calculée En rouge : les isovaleurs de charge réelle, en noir les trajectoires calculées. ....	316

# 1 Introduction

La modélisation du transfert de solutés en milieux saturés ou non-saturés est fondamentale pour les études de protection contre les pollutions et pour les études de dépollution.

La modélisation du transfert thermique permet la prise en compte des effets de la température sur la densité du fluide et sur sa viscosité.

La modélisation du transfert de salinité permet la prise en compte des effets densitaires.

Le code de calcul MARTHE ® du BRGM Thiéry (2015b) permet de modéliser les écoulements en 2 ou 3 dimensions (2D ou 3D) dans les milieux poreux saturés ou non saturés.

La notice d'utilisation générale de MARTHE v7.5 pour le calcul des écoulements dans les hydrosystèmes en zone saturée est le rapport [BRGM/RP-64554-FR](#) (Thiéry, 2015b)

Le principe et les algorithmes de calculs en Zone Non Saturée (ZNS) sont décrits par Thiéry (1993). Le module de calcul en ZNS de MARTHE version 7.5 est décrit par [Thiéry \(2015c\)](#) dans le rapport [BRGM/RP- 64495-FR](#).

MARTHE permet le calcul du transport de masse et du transfert thermique en zone saturée et en zone non saturée en 3D. Différentes méthodes de calcul sont disponibles :

- La méthode TVD (Total Variation Diminishing)
- La méthode des Différences Finies
- La méthode MOC (Méthode des Caractéristiques)
- La méthode Random Walk par déplacement de particules.

Le transport de masse et le transfert thermique sont simulés en régime permanent ou transitoire, en zone saturée ou non-saturée, en 3D, en 2D, en 1D, en coupe ou en symétrie cylindrique.

Les transferts de masse et de chaleur concernent les aquifères et aussi les réseaux de rivières et de drains.

Ce rapport présente en détail la manière de modéliser le transport en 3D à travers un milieu poreux saturé ou non-saturé, en régime permanent ou transitoire. Les différents aspects suivants sont abordés :

- Modélisation du [transport de masse classique](#).
- Modélisation du transport de masse à [double porosité](#) (avec cinétique d'échange).
- Modélisation du [transfert thermique](#) (transfert de chaleur).
- Modélisation du [transport de salinité](#) avec prise en compte des effets densitaires.

Pour chacun de ces aspects le rapport présente :

- Les principes, les phénomènes et les équations
- La mise en œuvre dans MARTHE avec une description détaillée des paramètres et des champs de données.
- Des [exemples de validation](#) et des exemples d'application.

Merci à Jean-Jacques Seguin pour sa relecture de ce rapport et ses suggestions d'améliorations.

La modélisation du transfert réactif par couplage avec PHREEQC-RM (Parkhurst et Wissmeier, 2015) est décrite par [Thiéry, 2015d](#) dans le rapport [BRGM/RP-65010-FR](#).

La version décrite dans ce rapport est la version 7.5 de Décembre 2015.

Pour mettre en œuvre ces fonctionnalités de transfert de masse, de transfert thermique ou de transport de salinité, il est conseillé de lire le « [Didacticiel du code de calcul MARTHE v7.5](#) », rapport [BRGM/RP-64997](#) ([Thiéry, 2015a](#)).

Des informations détaillées sur le code de calcul MARTHE ® du BRGM sont disponibles sur le site : <http://marthe.brgm.fr/>



## 2 TRANSPORT DE MASSE CLASSIQUE

Les chapitres suivant présentent la fonctionnalité de transport de masse classique.

Le transport de masse classique désigne le transport de masse :

- Sans prise en compte de la [double porosité](#)
- Sans effets densitaires dus au [transport de salinité](#)
- Sans [transfert thermique](#).

Des exemples d'applications de calcul de transport de masse sont décrits dans le chapitre des [applications de transfert masse](#).



### 3 Notations pour le transport de masse classique

Notations		Unité SI	Relation
x, y	distances	m	
z	altitude (positive vers le haut)		
z	temps	s	
q	vitesse (de Darcy)	m/s	
u	vitesse réelle (vitesse de pore)	m/s	$u = q / \theta_m$
$\theta$	teneur en eau volumique	$m^3/m^3$	$\theta = \theta_m + \theta_F$
$\theta_m$	teneur en eau mobile	$m^3/m^3$	
$\theta_F$	teneur en eau fixe	$m^3/m^3$	
$\omega$	porosité totale	$m^3/m^3$	$\omega \geq \theta$
$\rho_s$	masse volumique sèche du terrain	$kg/m^3$	
$k_d$	coefficient de partage	$m^3/kg$	
KD	coefficient de partage volumique	$m^3/m^3$	$KD = \rho_s \cdot k_d$
R	coefficient de retard	[-]	$R=1 + (KD + \theta_F) / \theta_m$
$t_d$	temps de demi-dégradation (ou « période »)	s	
D	tenseur de dispersion	$m^2/s$	$D_L = D_0 + \alpha_L \cdot u$ $D_T = D_0 + \alpha_T \cdot u$
$D_0$	diffusion moléculaire	$m^2/s$	

Notations		Unité SI	Relation
$\alpha_L$	dispersivité longitudinale	m	
$\alpha_T$	dispersivité transversale	m	
$S_L$	coefficient d'emménagement en nappe libre	$m^3/m^3$	
$C$	concentration volumique	$kg/m^3$	
$S_m$	concentration massique du solide	kg/kg	
$C_r$	nombre de Courant	[-]	$Cr = u.dt/dx$ en 1D
$Pe$	nombre de Péclet	[-]	$Pe = u.dx/D$ en 1D
$N_d$	nombre de dispersion	[-]	$N_d = C_r/Pe$
TVD	Méthode TVD, à limiteur de flux		
MOC	Méthode des caractéristiques		
DF	Méthode des Différences Finies		
RW	Méthode Random Walk		

## 4 Définition des variables

La [liste des champs et des fichiers](#) de MARTHE pouvant être utilisés pour le transport de concentration est donnée Figure 16.

### 4.1 Concentration

Concentration :	C'est la concentration volumique en soluté. Elle est exprimée en masse de soluté par volume de fluide (eau).
Concentration extérieure :	C'est la concentration d'un éventuel apport d'eau dans l'aquifère, soit par injection artificielle, soit par des limites à potentiel imposé.
Concentration de la recharge :	C'est la concentration de la recharge de l'aquifère : dans MARTHE, elle concerne uniquement la recharge ou l'infiltration par les pluies et ne s'applique pas aux flux d'irrigation.
Concentration sortante :	C'est la concentration dans un flux sortant (captage ou limite hydrodynamique).

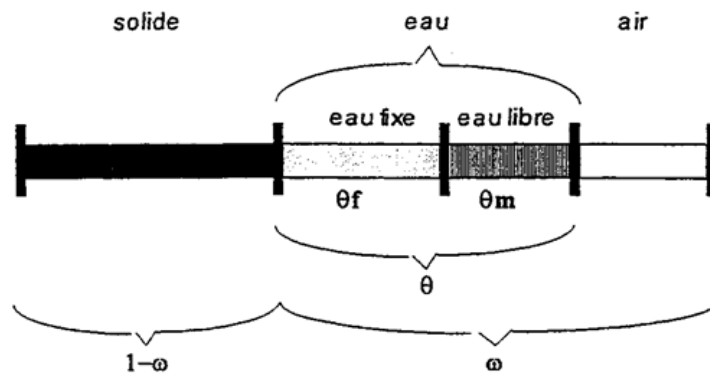
### 4.2 Teneur en eau

Teneur en eau (volumique) :	C'est le rapport du volume d'eau au volume de terrain qui le contient. Pour exprimer que c'est une valeur sans dimension, on note parfois, sur les graphiques, l'unité : $m^3/m^3$ .
Eau mobile (ou : eau libre) :	Fraction de la teneur en eau qui est mobile.
Eau liée (ou eau : fixe)	Fraction de la teneur en eau qui est liée à la matrice rocheuse. Cette fraction est quasi immobile, mais, si les échanges sont instantanés, elle a la même concentration que l'eau mobile.

### 4.3 Porosité

Pour le calcul du transport, il faut définir la porosité aussi bien en régime permanent qu'en régime transitoire.

On considère la représentation suivante, en volume, avec quatre phases :



Avec :

- $\omega$  : Porosité totale
- $\theta_f$  : Teneur en eau fixe
- $\theta_m$  : Teneur en eau mobile
- $\theta$  : Teneur en eau totale

On introduit les notations :

- $\rho_s$  : Masse volumique sèche du terrain  
(Attention ce n'est pas la masse volumique du solide.  
C'est la masse d'1 m<sup>3</sup> de terrain duquel on aurait retiré l'eau).
- C : Concentration dans l'eau mobile
- $C_f$  : Concentration dans l'eau liée
- $S_v$  : Concentration volumique du solide : masse de soluté fixée par le solide, par unité de volume de terrain.

Pour un volume unitaire de terrain (donc une masse  $\rho_s$ ), on obtient les relations de la Figure 1

	Volume	Masse de soluté	Concentration volumique	Concentration massique
Eau mobile	$\theta_m$	$m_m$	$C = m_m/\theta_m$	
Eau liée	$\theta_f$	$m_f$	$C_f = m_f/\theta_f$	
Solide	$1 - \omega$	$m_s$	$S_v = m_s/1$	$S_m = m_s/\rho_s$

Figure 1 – Volumes, masses et concentrations relatives à un volume unitaire de terrain.

#### 4.3.1 Calculs en zone saturée

On utilise le champ POROSITE, d'extension de fichier [.poros], qui peut, comme tous les champs du code de calcul MARTHE, être défini : par grille, par couche, par zone ou par maille. Le champ POROSITE représente la porosité totale. Un autre champ, notée PORO\_FIX, d'extension de fichier [.porfx], représente la porosité « fixe » (eau immobile).

On en déduit :

$$\text{Porosité cinématique} = \text{POROSITE} - \text{PORO\_FIX}$$

La porosité cinématique doit toujours être supérieure à zéro, c'est-à-dire :

$$\text{POROSITE} > \text{PORO\_FIX}$$

Par défaut, la porosité « fixe » est égale à zéro.

Remarque : S'il n'y a pas de transfert thermique (et pas d'échanges entre phases), on peut utiliser classiquement :  $\text{POROSITE} = \text{Porosité Cinématique}$ , et  $\text{PORO\_FIX} = 0$ .

Si le calcul hydrodynamique est effectué en régime transitoire, et si la nappe est libre par endroits, la porosité cinématique devra obligatoirement être égale au coefficient d'emmagasinement libre, sinon les calculs pourraient conduire à des résultats inacceptables.

#### 4.3.2 Calculs en Zone Non Saturée (ZNS)

Le champ POROSITE est utilisé uniquement pour définir les lois de rétention. C'est la teneur en eau (champ SATURAT), variable au cours du temps, qui est utilisée pour les calculs. Comme pour les calculs en zone saturée, le champ PORO\_FIX représente la porosité fixe (eau immobile).

On en déduit :

$$\text{Teneur en eau mobile} = \text{SATURAT} - \text{PORO\_FIX}$$

La teneur en eau mobile doit toujours être supérieure à zéro :

$$\text{SATURAT} > \text{PORO\_FIX}$$

Pour être assuré de respecter cette condition, il suffit de choisir :

$$\text{PORO\_FIX} \leq \text{SATUR\_RESI}$$

(SATUR\_RESI étant la teneur en eau résiduelle ou irréductible).

#### 4.4 Coefficient de partage

MARTHE permet de prendre en compte des échanges instantanés entre deux phases : l'eau libre (porosité cinématique) et l'eau liée.

À l'équilibre, on admet généralement pour le solide la relation suivante, qui correspond à un « isotherme d'équilibre linéaire » :

$$S_m = k_d \cdot C$$

Avec :  $S_m$  = concentration massique du solide (kg/kg).

$k_d$  = coefficient de partage ( $m^3/kg$ ).

$k_d$  est le rapport de la « masse de soluté fixée par masse de solide », par unité de concentration  $C$  de l'eau libre.

#### 4.5 Coefficient de partage volumique

Compte tenu de la définition de  $k_d$  et de  $S_v$ , on a :

$$S_v = \rho_s \cdot k_d \cdot C$$

Cette relation dépend de la masse volumique sèche  $\rho_s$  du terrain, qui n'est pas un paramètre pertinent pour le transport de masse en milieu poreux. On a donc choisi de définir un nouveau paramètre, appelé « coefficient de partage volumique », et noté ici RhoKD :

$$\text{RhoKD} = \rho_s \cdot k_d$$

Avec :  $\rho_s$  : masse volumique sèche du terrain.

(Attention ce n'est pas la masse volumique du solide)

Remarque : Pour les sols courants  $\rho_s$  est de l'ordre de  $1600 \text{ kg/m}^3$ .

Le coefficient RhoKD est adimensionnel ( $\text{kg/m}^3$  par  $\text{kg/m}^3$ ).

Pour un volume de terrain donné on a :

$$\text{RhoKD} = \theta_m \cdot \frac{m_s}{m_f}$$

On a alors le bilan masse, par unité de volume de terrain :

Eau libre	:	$m_m$	=	$C \cdot \theta_m$
Eau liée	:	$m_f$	=	$C_f \cdot \theta_f$
Solide	:	$m_s$	=	$S_v$
TOTAL		$M$	=	$C \cdot \theta_m + C_f \cdot \theta_f + S_v$

À l'équilibre on a :  $C_f = C$

et :  $S_v = \text{RhoKD} \cdot C$

D'où la masse :  $M = C \cdot (\theta_m + \theta_f + \text{RhoKD})$ .

On peut donc interpréter RhoKD comme la teneur en eau équivalente du solide qui donnerait la même concentration que dans l'eau mobile.

D'un point de vue macroscopique, si on ne distingue que la masse  $m_m$  dans la phase mobile  $\theta_m$  et la masse immobile  $m_{im}$  (à la fois dans l'eau liée et le solide), on a :

$$m_{im} = m_f + m_s$$



$$C = M / (\theta_m + K_E)$$

Avec :  $K_E = \theta_f + \text{RhoKD}$

$K_E$  est la teneur en eau équivalente à la somme de l'eau liée et de l'effet du solide.

Dans le code de calcul MARTHE, le paramètre RhoKD est un champ spatialisé noté « RHO\_KD », d'extension de fichier [.rhokd], qui peut être défini, comme tous les champs, par grille, par couche, par zone ou par maille.

#### 4.6 Coefficient de retard

Si on considère un écoulement d'eau sans dispersion, en régime permanent, avec une vitesse réelle  $u$ , on constate généralement qu'un traceur se déplace à une vitesse  $u_t$  inférieure à  $u$ . On note généralement :

$$u_t = u / R$$

Avec :  $R$  = coefficient de retard (adimensionnel).

Ce retard est dû aux interactions avec l'eau liée et/ou avec le solide.

On montre que, dans le cas d'échanges instantanés, le coefficient de retard  $R$  s'écrit :

$$R = 1 + \frac{\theta_f + \text{RhoKD}}{\theta_m}$$

On remarque tout de suite que si  $\theta_m$  n'est pas uniforme, ce qui est le cas général en zone non saturée, ou dans un écoulement en nappe libre, le coefficient de retard  $R$  est variable. L'application d'un coefficient de retard uniforme à un écoulement à saturation variable peut conduire à des résultats inacceptables, comme des sur-concentrations extrêmement fortes, non physiques. Il est donc nettement préférable d'utiliser la notion de RhoKD. De plus, la notion de RhoKD peut être étendue aux cas d'échanges avec cinétique, ce qui n'est pas le cas du coefficient de retard.

Par exemple, si on a une teneur en eau mobile (porosité cinématique) variable de 5 % à 25 % (soit une moyenne de 15 %) et si on souhaite un coefficient de retard équivalent égal à 3, il suffira de fixer  $\text{RhoKD} = 30 \%$ .

Si on a accès uniquement à la mesure de  $\theta = \theta_m + \theta_f$ , par une mesure neutronique par exemple :

- Avec un traceur parfait, n'ayant pas d'interactions avec le solide, on identifiera une vitesse de traceur  $u_p$  :

$$u_p = \frac{q}{(\theta_m + \theta_f)}$$

Avec  $q$  = vitesse de Darcy

et on n'aura pas accès à  $\theta_f$ .

- Avec un traceur réel, qui interagit avec le solide, on obtiendra une vitesse  $u_r$  :

$$u_r = \frac{q}{(\theta_m + \theta_f + \text{RhoKD})}$$

D'où un coefficient de retard apparent  $R_a$  :

$$R_a = \frac{u_p}{u_r} = 1 + \frac{\text{RhoKD}}{\theta_m + \theta_f}$$

$$R_a = 1 + \frac{\text{RhoKD}}{\theta}$$

Au lieu de :

$$R = 1 + \frac{\text{RhoKD}}{\theta_m}$$

Dans le code de calcul MARTHE, il est possible de prendre en compte un coefficient de retard  $R$ . Ce coefficient de retard éventuel est une constante (égale à 1 par défaut).

Si les calculs hydrodynamiques s'effectuent avec un schéma de Zone Non Saturée, le coefficient de retard n'est pas pris en compte par MARTHE et il faut obligatoirement lui substituer l'utilisation d'un coefficient de partage volumique  $\text{RhoKD}$ .

#### 4.7 Convection inverse et trajectoires inverses

Si on affecte un signe négatif au coefficient de retard  $R$ , MARTHE calcule une convection (ou advection) inverse. La convection inverse est calculée avec un champ de vitesse de signe opposé au champ réel, mais l'amplitude du coefficient  $R$  est conservée. En particulier, pour le calcul des vitesses, les pompages sont automatiquement remplacés par des injections, et réciproquement.

##### Trajectoires inverses

Il est également possible de calculer des trajectoires inverses. Dans ce cas, les points de départ définis par l'utilisateur correspondent alors à des points d'arrivée. MARTHE calcule donc les trajectoires en partant de ces points, mais avec un champ de vitesse de signe opposé.

#### 4.8 Dispersivité mécanique

Dans un système de référence formé par la direction  $L$  de la vitesse locale et deux directions perpendiculaires  $T$  et  $V$ , le tenseur de dispersion se ramène au vecteur  $\bar{\mathbf{D}}$  de composantes  $D_L$ ,  $D_T$ ,  $D_V$  dont on admet les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} D_L &= D_o + \alpha_L \cdot u \\ D_T &= D_o + \alpha_T \cdot u \\ D_V &= D_o + \alpha_V \cdot u \end{aligned}$$

Avec :

$$\begin{aligned} \alpha_L &= \text{dispersivité longitudinale [L]} \\ \alpha_T &= \text{dispersivité transversale [L]} \end{aligned}$$

$\alpha_V$  = dispersivité transversale verticale [L] ; Le plus souvent on choisit  $\alpha_V = \alpha_T$   
 $u$  = vitesse réelle (vitesse de pore) [ $LT^{-1}$ ]  
 $D_0$  = diffusion moléculaire [ $L^2T^{-1}$ ]

Pour les solutés classiques, le coefficient de diffusion moléculaire est généralement très faible, de l'ordre de  $10^{-9}$  m<sup>2</sup>/s.

Si on désire simuler une dispersion isotrope D, on pourra cependant utiliser :

$$D_0 = D$$

$$\alpha_L = \alpha_T = 0$$

#### 4.9 Dégradation du soluté

Le soluté en solution dans l'eau peut se dégrader exponentiellement. Cette dégradation est une disparition définitive de produit. Il peut s'agir :

- d'une décroissance radioactive,
- d'une fixation irréversible,
- d'une précipitation définitive.

La seule contrainte est que cette disparition doit être exponentielle en fonction du temps, c'est-à-dire, en notant m la masse de soluté (et en l'absence de convection et de dispersion) :

$$m = m_0 \cdot e^{-\frac{t}{T_d}}$$

Avec :

$m_0$  = masse initiale  
 $t$  = temps  
 $T_d$  = constante de temps de dégradation

Dans le code de calcul MARTHE, on utilise le temps de ½ dégradation  $t_d$ , appelé aussi « période » ou « temps de ½ vie », qui est le temps après lequel la moitié de la masse a été dégradée.

$$t_d = T_d \cdot \ln(2)$$

Avec :

$\ln(2) = 0.6931$   
 $t_d$  = Temps de ½ dégradation

Dans le code de calcul MARTHE, le paramètre  $t_d$  est une constante qui s'applique à toute la masse de soluté (dans l'eau mobile, l'eau liée et la phase solide).



## 5 Modélisation avec le code de calcul MARTHE

### 5.1 Équation du transport de masse résolue par le code de calcul MARTHE

Dans le cas monodimensionnel, l'équation du transport de masse classique s'écrit :

$$\frac{\partial(\theta_m \cdot C)}{\partial t} = \frac{\partial^2(D \cdot \theta_m \cdot C)}{\partial x^2} - \frac{\partial(q \cdot C)}{\partial x} - \frac{C \cdot \theta_m}{T_d} + q_m - (\theta_f + \text{RhoKD}) \cdot \frac{\partial S_v}{\partial t}$$

$$\frac{\partial^2(D \cdot \theta_m \cdot C)}{\partial x^2} = \text{Dispersion}$$

$$- \frac{\partial(q \cdot C)}{\partial x} = \text{Convection}$$

$$- \frac{C \cdot \theta_m}{T_d} = \text{Dégradation}$$

$$-(\theta_f + \text{RhoKD}) \cdot \frac{\partial S_v}{\partial t} = \text{Échanges}$$

Avec :

C = Concentration dans l'eau mobile (kg de soluté / m<sup>3</sup> d'eau mobile)

S<sub>v</sub> = Concentration volumique dans la phase immobile, identique dans l'eau liée et dans le solide, (kg de soluté / m<sup>3</sup> d'eau liée) et (kg de soluté / m<sup>3</sup> de terrain)

θ<sub>m</sub> = Teneur en eau mobile [-]

θ<sub>f</sub> = Teneur en eau liée [-]

RhoKD = Coefficient de partage volumique = teneur en eau équivalente du solide [-]

q = Vitesse de Darcy [LT<sup>-1</sup>]

D = Coefficient de dispersion [L<sup>2</sup>T<sup>-1</sup>]

T<sub>d</sub> = Constante de temps de dégradation [T]  
Selon le cas T<sub>d</sub> peut parfois s'appliquer également à la concentration S<sub>v</sub>

q<sub>m</sub> = Flux massique injecté par unité de volume [M.L<sup>-3</sup>.T<sup>-1</sup>]

Comme les échanges sont instantanés, on a S<sub>v</sub> = C ; d'où l'équation résultante :

$$\frac{\partial[(\theta_m + \theta_f + \text{RhoKD}) \cdot C]}{\partial t} = \frac{\partial^2(D \cdot \theta_m \cdot C)}{\partial x^2} - \frac{\partial(q \cdot C)}{\partial x} - \frac{C \cdot \theta_m}{T_d} + q_m$$

Le premier membre peut s'écrire :

$$\frac{\partial(R \cdot \theta_m \cdot C)}{\partial t}$$

Ou bien :

$$\frac{\partial(\theta_m \cdot C)}{\partial(t/R)}$$

Avec :

$$R = 1 + \frac{(\theta_f + \text{RhoKD})}{\theta_m}$$

R est un coefficient de retard qui n'est pas constant si  $\theta_m$  varie au cours du temps.

## 5.2 Les méthodes de calcul du transport de masse

Dans MARTHE il existe quatre méthodes de calcul du transport :

- La méthode TVD (Total Variation Diminishing) à limiteur de flux ;
- La méthode des Différences Finies (DF) ;
- La méthode MOC (Method Of Characteristics) : méthode des caractéristiques.
- La méthode « Random Walk » (RW), ou méthode des « déplacements aléatoires de particules ». Cette méthode est décrite pour mémoire, car le plus souvent elle ne donne pas de résultats satisfaisants.

### 5.2.1 Principes des méthodes

#### Méthode des Différences finies DF

La méthode des différences finies, DF, consiste à discrétiser l'équation du transport d'une manière un peu similaire à l'équation de l'hydrodynamique. On obtient un système d'équations (une par maille) qui est résolu itérativement par gradients conjugués (méthode Orthomin).

#### Méthode TVD

La méthode TVD est proche de la méthode DF, avec les différences suivantes : la convection est calculée suivant un schéma temporel explicite, alors que la dispersion, la dégradation et les échanges font intervenir un schéma implicite. Les calculs sont stabilisés par l'introduction d'un schéma de « limiteur de flux » qui garantit la monotonie de la concentration en l'absence de termes source (Leonard, 1988).

La méthode TVD, qui a une contrainte sur le nombre de Courant, fonctionne uniquement en régime de transport transitoire.

#### Méthode des caractéristiques MOC

La méthode des caractéristiques de MARTHE v7.5 consiste à modéliser la convection et la dispersion par deux méthodes différentes. Le calcul se déroule en deux étapes successives : d'abord la convection, par déplacement de particules qui portent la masse en solution, puis la

dispersion. Dans la première étape, on génère des particules correspondant à la concentration initialement dans les mailles et aux apports de masse puis on déplace toutes les particules en suivant la vitesse réelle de l'écoulement, sans tenir compte de la dispersion ; on calcule alors la concentration dans chaque maille par comptage des particules dans les mailles. Dans la deuxième étape, on calcule l'effet de la dispersion pure par un schéma aux différences finies, sans tenir compte de la convection. On réajuste alors les nombres de particules dans les mailles du domaine modélisé en fonction du champ de concentration calculée.

### Méthode Random Walk (*pour mémoire*)

La méthode Random Walk (RW) consiste à déplacer un grand nombre de particules en suivant la vitesse réelle de l'écoulement en chaque point. La dispersion est modélisée par ajout d'un terme aléatoire sur la durée (ou la vitesse) de déplacement. Chaque particule porte une masse élémentaire identique. On obtient la concentration d'une maille en comptant le nombre de particules, donc la masse de soluté dans la maille, et en la divisant par le volume d'eau dans la maille (variable si la nappe n'est pas captive).

La méthode de transport Random Walk en Zone Non Saturée en 1D, avec échanges, a été décrite par Thiéry et lung (1990, 1991) et par Thiéry (1991).

### 5.2.2 Nombres de Péclet et de Courant généralisés

Quand on discrétise l'équation du transport en 1D en différences finies, on fait apparaître deux nombres adimensionnels :

- le nombre de Courant, noté  $C_r$ , qui est égal à la distance parcourue par un élément de concentration pendant un pas de temps, divisée par la dimension d'une maille :

$$\text{en 1D : } \boxed{C_r = u \cdot dt / dx}$$

- le nombre de Péclet, noté  $P_e$ , qui est égal au flux massique par convection divisé par le flux massique par dispersion :

$$\text{en 1D : } P_e = (q \cdot dC) / (D \cdot \omega \cdot dC/dx)$$

Soit, en divisant au numérateur et au dénominateur par le terme de variation de concentration :

$$\text{en 1D : } \boxed{P_e = u \cdot dx / D}$$

Ou encore, si on admet que  $D \approx \alpha \cdot u$  :

$$\text{en 1D : } \boxed{P_e = dx / \alpha}$$

en notant  $\alpha$  la dispersivité, de dimension [L].

Ces nombres de Péclet et de Courant peuvent se généraliser en 3D de la manière suivante :

On définit trois grandeurs : la capacitance, la conductance et l'advectance :

Capitance = volume en eau équivalent d'une maille ;

Conductance = débit massique s'écoulant par dispersion (conduction) ;

Advectance = débit massique s'écoulant par convection (« advection » en anglais) ;

D'où les expressions mathématiques suivantes :

$$\text{Capacitance} = R \cdot \omega \cdot dx \cdot dy \cdot dz$$

$$\text{Conductance} = \sum_v \frac{\omega \cdot D \cdot A}{dx}$$

$$\text{Advectance} = \sum_a q \cdot A$$

Avec :

R = coefficient de retard

$\omega$  = porosité cinématique

D = coefficient de dispersion mécanique

q = vitesse de Darcy

A = aire de la maille dans la direction perpendiculaire à l'écoulement

a = indice des mailles amont

v = indice des mailles voisines.

On peut alors définir des nombres de Péclet ( $P_e$ ) et de Courant ( $C_r$ ) équivalents par :

$$P_e = 2 \cdot \frac{\text{Advectance}}{\text{Conductance}}$$

$$C_r = \frac{\text{Advectance} \cdot dt}{N_a \cdot \text{Capacitance}}$$

Avec :

dt = durée du pas de temps de calcul

$N_a$  = nombre de mailles amont

On vérifie qu'en 1D on retrouve bien les expressions classiques :

$$P_e = 2 \cdot \frac{q \cdot A}{2 \cdot \frac{\omega \cdot D \cdot A}{dx}} = \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{dx}}{\mathbf{D}}$$

$$C_r = \frac{q \cdot A \cdot dt}{1 \cdot R \cdot \omega \cdot A \cdot dx} = \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{dt}}{\mathbf{R} \cdot \mathbf{dx}}$$



En 3D, avec un coefficient D isotrope et des mailles carrées, on obtient également :

$$P_e = 2 \cdot \frac{3 \cdot q \cdot A}{6 \cdot \frac{\omega \cdot D \cdot A}{dx}} = \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{dx}}{\mathbf{D}}$$

$$C_r = \frac{3 \cdot q \cdot A \cdot dt}{3 \cdot R \cdot \omega \cdot A \cdot dx} = \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{dt}}{\mathbf{R} \cdot \mathbf{dx}}$$

En 3D, pour un écoulement mono dimensionnel, de vitesse u, on obtient :

$$C_r = \frac{q \cdot A \cdot dt}{1 \cdot R \cdot \omega \cdot A \cdot dx} = \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{dt}}{\mathbf{R} \cdot \mathbf{dx}}$$

$$P_e = 2 \cdot \frac{q \cdot A}{2 \cdot \frac{\omega \cdot A}{dx} \cdot \left[ D_0 + \frac{q}{\omega} \cdot (\alpha_L + 2\alpha_T) \right]}$$

Soit, en négligeant la diffusion moléculaire  $D_0$  :

$$P_e = 2 \cdot \frac{q \cdot A}{2 \cdot \frac{\omega \cdot A}{dx} \cdot \frac{q}{\omega} \cdot (\alpha_L + 2\alpha_T)} = \frac{\mathbf{dx}}{\alpha_L + 2\alpha_T}$$

Dans le code de calcul MARTHE, on définit également le « Nombre de dispersion », noté  $N_d$ , par le rapport :  $N_d = C_r / P_e$ .

En 1D on a :

$$N_d = \frac{C_r}{P_e} = \frac{D \cdot dt}{dx^2}$$

C'est le rapport de la durée du pas de temps  $dt$  divisée par le temps caractéristique de la dispersion dans la maille :  $dx^2 / D$ .

### 5.2.3 Dispersion numérique

La dispersion numérique est une dispersion additionnelle générée par le calcul. Par exemple :

Si la dispersion réelle est égale à  $2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$  et si le calcul génère une dispersion numérique égale à  $0.2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$ , la simulation correspondra approximativement à une simulation parfaite, donc sans dispersion numérique, avec une dispersion de  $2.2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$ , c'est-à-dire 10 % trop grande.

La dispersion numérique dépend :

- De la méthode de transport
- De la discrétisation du temps et de l'espace (dimension des mailles)

La méthode DF, qui est simple et rapide, génère davantage de dispersion numérique.

Les méthodes TVD et MOC génèrent très peu de dispersion numérique, mais présentent certaines restrictions d'application. La méthode RW quand elle s'applique génère, elle aussi, peu de dispersion numérique

Une dispersion numérique raisonnable n'est généralement pas un problème, compte tenu du fait qu'il est difficile de déterminer précisément les vraies valeurs de la dispersivité, et que ces valeurs dépendent de l'échelle spatiale à laquelle on s'intéresse.

#### 5.2.4 Avantages et inconvénients des différentes méthodes

Dans tous les cas, les résultats obtenus sont d'autant plus précis que la discrétisation de l'espace et du temps est fine. Par exemple, dans la méthode DF, les simulations seront d'autant plus exactes que le nombre de Péclet sera petit (discrétisation spatiale fine) et que le nombre de Courant sera petit (discrétisation temporelle fine).

Il est erroné de penser qu'on obtient des simulations sans aucune dispersion numérique si on respecte les conditions :  $P_e < 1$  et  $C_r < 1$ .

##### a) Méthode DF

Avantages : Pas d'aléas statistiques ; pas de problème pour traiter les hétérogénéités ; prise en compte facile de mailles à concentration imposée ; durées de calcul très courtes ; facilité pour un calcul de transport en régime permanent.

Inconvénients :

- On obtient d'autant moins de dispersion numérique que le nombre de Péclet «  $P_e$  » est petit c'est-à-dire que :

$$P_e \ll 1$$

En négligeant la diffusion moléculaire et en notant  $D = \alpha \cdot u$  (avec  $\alpha$  = dispersivité), cette condition devient :

$$dx \ll \alpha$$

Pour minimiser la dispersion numérique, il faut donc utiliser un maillage fin, de dimension inférieure à la dispersivité.

- En régime transitoire, on obtient d'autant moins de dispersion numérique que le nombre de Courant «  $C_r$  » est petit, c'est-à-dire que :

$$C_r \ll 1, \quad \text{d'où} \quad dt \ll R \cdot dx / u$$

Il faut donc utiliser de petits pas de temps.

Les simulations seront d'autant plus exactes que le nombre de Péclet sera petit (discrétisation spatiale fine) et que le nombre de Courant sera petit (discrétisation temporelle fine).

Il est erroné de penser qu'on obtient des simulations sans aucune dispersion numérique si on respecte les conditions :  $P_e < 1$  et  $C_r < 1$ .

### **b) Méthode TVD à limiteur de flux**

Avantages : Cette méthode présente les avantages de la méthode DF (pas d'aléas statistiques, facilité de prise en compte de mailles à concentration imposée et d'hétérogénéités), tout en ne générant quasiment pas de dispersion numérique, sans nécessité de respecter une quelconque condition sur le nombre de Péclet (donc sur la dimension des mailles).

Inconvénients : Peu d'inconvénients ; Les pas de temps doivent respecter un nombre de Courant  $\leq 1$ . C'est MARTHE qui respecte automatiquement cette condition en générant des sous-pas de temps pour le calcul du transport. Si les écoulements s'effectuent en zone non saturée, les pas de temps sont alors généralement petits et la condition de Courant étant souvent déjà vérifiée, peu ou pas de sous-pas de temps sont générés. Les temps de calcul sont alors peu augmentés par rapport à la méthode DF.

En revanche, il n'est pas possible de faire un calcul TVD en régime de transport permanent (puisque le nombre de Courant serait infini.)

Par ailleurs, dans cette version de MARTHE, la méthode TVD n'est pas opérationnelle avec les maillages contenant des sous-maillages gigoques.

### **c) Méthode des caractéristiques (MOC)**

Avantages : Cette méthode combine les avantages de la méthode DF (peu d'aléas statistiques, facilité de prise en compte de mailles à concentration imposée et d'hétérogénéités) et les avantages de l'utilisation de particules (quasiment pas de dispersion numérique, sans nécessité de respecter une condition sur le nombre de Péclet. Si le milieu poreux est homogène, il est possible ne pas respecter de condition de Courant et d'utiliser de grands pas de temps. Si le milieu est hétérogène, il faut cependant respecter approximativement la condition de Courant puisque la dispersion s'effectue après la convection par particules ; pendant un sous-pas de temps de calcul, les particules ne doivent pas traverser plusieurs mailles ayant des propriétés différentes.

Inconvénients :

- Peu d'inconvénients ; pour un même nombre de particules, les temps de calcul seraient comparables à la méthode Random Walk (RW), mais le peu d'aléas statistiques permet d'utiliser nettement moins de particules et donc d'obtenir des durées de calcul plus courtes.
- Le transport en régime permanent nécessite de définir une « durée » équivalente au permanent, c'est-à-dire une durée au bout de laquelle on considère que le régime est quasi-permanent.
- Difficulté pour représenter de très forts contrastes de concentration (queues de distribution).

### **d) Méthode Random Walk (RW) (pour mémoire)**

Avantages : Pas de dispersion numérique (pas besoin de respecter un nombre de Péclet). Si le milieu est homogène, et uniquement dans ce cas, il est possible de ne pas respecter la condition de Courant ( $Cr > 1$ ) et d'utiliser de très grands pas de

temps. Les calculs sont précis uniquement si on utilise un grand nombre de particules.

Inconvénients :

- Aléas statistiques
- Difficulté d'imposer des concentrations, surtout près des limites du maillage.
- Calculs imprécis s'il y a de fortes hétérogénéités de vitesse, de porosité ou d'épaisseur de mailles (par exemple, en écoulement cylindrique).
- Difficulté de simuler des prélèvements de masse par pompage ou par les limites (aval), sauf si on respecte la condition de Courant.
- Transport en régime permanent peu pratique.

### 5.3 Les méthodes de calcul du transport disponibles dans MARTHE

#### 5.3.1 Méthode des Différences finies DF

Le schéma utilisé pour la discrétisation du temps est totalement implicite. La pondération spatiale est choisie de sorte que les débits entrants dans une maille arrivent avec la concentration de la maille d'où ils proviennent ; le débit sort avec la concentration de la maille courante.

Un tel schéma, parfois appelé « donor cell », est inconditionnellement stable quelles que soient les dimensions des pas de temps et d'espace. Il respecte toujours le 2<sup>ème</sup> principe de la thermodynamique, c'est-à-dire que, en l'absence de terme source, la concentration finale d'une maille de calcul est toujours comprise entre les concentrations finales des 6 mailles voisines et la concentration de la maille de calcul en début de pas de temps. Le schéma de calcul de la convection et de la dispersion conduit à une matrice creuse non symétrique, avec 9 diagonales en 2D, et 19 diagonales en 3D. La résolution du système d'équations se fait par une méthode de gradients conjugués pour matrices non symétriques : la méthode Orthomin. La routine de résolution par la méthode Orthomin de MARTHE a été adaptée de la routine Orthofem (opérationnelle pour les éléments finis) qui nous a été transmise par Carl A. Mendoza du Waterloo Center for Groundwater Research de l'Université de Waterloo (Canada).

#### 5.3.2 Méthode TVD

La méthode TVD est proche de la méthode DF avec cependant les différences suivantes : la convection est calculée suivant un schéma temporel explicite, alors que la dispersion, la dégradation et les échanges font intervenir un schéma implicite. Les calculs sont stabilisés par l'introduction d'un limiteur de flux qui garantit la monotonie de la concentration en l'absence de terme source.

La méthode TVD, qui a une contrainte sur le nombre de Courant, fonctionne uniquement en régime de transport transitoire.

#### 5.3.3 Méthode des caractéristiques MOC

Le déplacement des particules s'effectue en premier, en utilisant la méthode de Pollock (1988) (sans dispersion). Les particules portent des masses, et non pas des concentrations comme c'est le cas dans les méthodes des caractéristiques classiques. La dispersion se fait ensuite avec le même schéma que celui utilisé par la méthode DF. La matrice obtenue est cependant

symétrique puisque les termes de convection, qui sont responsables de l'asymétrie, sont traités à part.

### 5.3.4 Méthode Random Walk (*pour mémoire*)

Le schéma de déplacement utilisé est un schéma continu. Le calcul des vitesses locales se fait suivant la méthode continue de Pollock (1988), par interpolation linéaire des vitesses normales aux faces de chaque maille. Le calcul de la convection, de la dispersion longitudinale et des deux dispersions transversales se fait simultanément suivant un schéma original qui permet d'utiliser de grands pas de temps de calcul en milieu relativement homogène. L'utilisation de grands pas de temps (ne respectant pas la condition de Courant) peut poser cependant des problèmes dans certains cas listés plus haut.

## 5.4 Les conditions aux limites du transport de masse

Les conditions aux limites pour le transport sont indépendantes des conditions aux limites pour les calculs du champ de charge hydraulique.

Il y a deux types de conditions aux limites et on peut de plus introduire des termes source dans n'importe quelle maille du domaine.

### 5.4.1 Concentration imposée

Il est possible d'imposer la concentration dans n'importe quelle maille du domaine. L'imposition d'une concentration dans une maille revient à introduire le flux massique (qui sera calculé par MARTHE) nécessaire au maintien de cette concentration compte tenu des concentrations des mailles voisines. Pour imposer la concentration dans une maille, il suffit, après avoir défini une concentration dans cette maille, de définir une « concentration extérieure » égale à la valeur code : 9999.

Remarque : Cette démarche est analogue à celle utilisée par MARTHE pour imposer une charge hydraulique en fixant un « débit extérieur » égal à la valeur code : 9999.

### 5.4.2 Limite étanche en concentration

Une telle condition à la limite correspond à une limite à travers laquelle il ne peut y avoir aucun échange de masse. Par exemple, en bordure d'un aquifère limité par un milieu imperméable ou sur les parois latérales d'un lysimètre. Une telle limite est automatique dans MARTHE (c'est la limite par défaut).

## 5.5 Termes source

### 5.5.1 Flux massique

En toute maille du domaine, il est possible d'imposer un flux massique : champ QMASS\_CONC, d'extension de fichier [.qmassc].

Le flux massique est une masse par unité de temps ( $M.T^{-1}$ ). Il est exprimé en unité utilisateur de masse par unité utilisateur de temps.

Il est cependant possible, au moyen d'un paramètre du fichier des « paramètres généraux », de choisir d'exprimer le flux massique : par mètre carré de surface de maille.

Ce flux massique, comme la plupart des champs de MARTHE, peut être introduit au choix :

- par grille ;
- par couche ;
- par zone géométrique ;
- par zone d'infiltration ;
- par zone d'irrigation ;
- par maille.

#### Remarque 1 :

Il n'est pas possible d'imposer un flux massique sur une maille dont on a imposé la concentration : ce serait une contradiction.

#### Remarque 2 :

Avec les méthodes de transport TVD et DF, il est possible d'appliquer un flux massique négatif qui correspondrait par exemple à une dégradation de soluté à taux constant ou bien à un pompage de calories. Ceci n'est pas possible directement dans les méthodes de transport à particules (MOC et RW).

### **5.5.2 Injection instantanée de masse (Dirac)**

En n'importe quelle maille du domaine, il est possible d'imposer un apport instantané de masse, sous forme d'un « Dirac » : champ MASS\_CONCEN d'extension de fichier [.mconc].

Cette injection de masse est exprimée en unité utilisateur de masse.

Il est cependant possible, au moyen d'un paramètre du fichier des « paramètres généraux », de choisir d'exprimer l'injection de masse : par mètre carré de surface de maille.

L'injection de masse peut être définie par grille, par zone, par couche ou par maille.

Comme pour les flux massiques, il n'est pas possible d'imposer une injection instantanée de masse dans une maille à concentration imposée ; dans les méthodes de transport TVD et DF l'injection de masse peut être négative, alors qu'elle doit être positive avec les méthodes de transport à particules.

Avec les méthodes de transport à particules, MOC ou RW, une injection instantanée de masse correspond à l'ajout instantané, en début de pas de temps, du nombre de particules correspondant à la masse injectée. Ceci est indépendant de la durée du pas de temps. Dans les méthodes TVD et DF, une injection instantanée correspond à un débit massique réparti sur la durée du pas de calcul.

Remarque : Dans le code de calcul MARTHE, toutes les champs définis à un moment donné restent actifs jusqu'à ce qu'on les désactive. L'injection instantanée de masse (Dirac) est une exception à cette règle puisque c'est un champ discontinu. Si on injecte une masse en début de calcul, ou à une date donnée, cette injection sera prise en compte uniquement pour ce pas de temps.

### 5.5.3 Concentration extérieure

En toute maille du domaine on peut définir la concentration du fluide extérieur, appelée « concentration extérieure ». C'est la concentration à laquelle se trouve l'eau qui rentre dans le domaine (concentration zéro par défaut). Cette eau peut rentrer :

- Par un débit injecté (dans un forage par exemple) ;
- Par un débit entrant dans une maille à charge hydraulique imposée (maille à potentiel hydrodynamique imposé).

Si une maille ne reçoit aucun débit fluide de l'extérieur, ou bien si elle est soumise à un débit sortant (pompage, exportation par une limite), la concentration extérieure n'est pas utilisée.

Il convient de remarquer qu'un débit extérieur entrant à une concentration extérieure fixée ne correspond pas à une concentration imposée dans la maille (sauf en régime permanent et en l'absence de dispersion).

L'intérêt de ce type de terme source est d'être physique et d'éviter d'imposer une concentration ou un flux massique si on ne sait pas *a priori* si le débit échangé avec l'extérieur sera entrant ou sortant. Le sens du débit d'échange n'est en effet pas toujours évident, par exemple en zone non saturée ou bien à proximité de la mer ou encore en régime hydrodynamique transitoire.

La concentration extérieure (champ CONCEN\_EXT, d'extension de fichier [.conex]) peut, comme les autres champs du code de calcul MARTHE, être définie par grille, par couche, par zone ou par maille. Une concentration extérieure égale à 9999 est un code permettant d'imposer la concentration de la maille à sa valeur définie en début de pas de temps. Si on désire juste fixer une concentration extérieure à 9999 (kg/m<sup>3</sup> par exemple), il suffirait de la fixer à une valeur très légèrement différente : par exemple à 9999.1.

### 5.5.4 Asservissement de la concentration d'injection

Quand on injecte par un puits d'injection de l'eau dans une maille du domaine modélisé, la concentration d'injection peut être asservie à la concentration d'un point de pompage (puits de production). En effet dans le cas d'un dispositif de dépollution par exemple, la concentration de l'eau réinjectée est égale à la concentration de l'eau pompée multipliée par un facteur constant de dépollution. La concentration des puits de production peut évoluer au cours du calcul, elle n'est donc pas connue a priori.

Une fonctionnalité de MARTHE permet de prendre en compte ce phénomène.

Remarque : Cette fonctionnalité est opérationnelle uniquement en régime transitoire de transport de masse.

Un « asservissement » de concentration est défini par :

- Un « point cible » correspondant à un puits d'injection, qui devrait a priori avoir un débit d'injection (donc positif) au moins à certains pas de temps.
- Un « point source » correspondant généralement à un puits de production (mais pour la modélisation ce n'est pas obligatoire : il peut ne pas y avoir de débit pompé).
- Un taux d'abattement « Concentration Injection / Concentration Production a priori < 1. Par défaut, si on donne un taux d'abattement égal à 0 on considère qu'il n'y a pas d'abattement (comme si le taux d'abattement était égal à 1). L'eau est alors injectée à la concentration du point source.


Les caractéristiques de cette fonctionnalité d'asservissement de concentration sont les suivantes :

- On peut définir un grand nombre d'asservissements, c'est-à-dire de couples puits de production – puits d'injection (500 asservissements au maximum dans la version courante).
- Il est possible d'avoir plusieurs puits d'injection asservis à un même puits de production.
- Le point cible peut être identique au point source : par exemple dans le cas de doublets avec pompage et injections alternés selon la saison, ou bien dans le cas d'un puits unique avec injection et pompage alternés.
- L'asservissement peut être modifié au cours du temps, c'est-à-dire qu'à partir d'une certaine date on peut modifier le taux d'abattement. On peut également modifier le puits de production associé. On peut même supprimer l'asservissement : en définissant des coordonnées hors domaine pour le puits de production (colonne n°0, ligne n°0 par exemple).

À chaque pas de temps de modèle, la concentration de l'eau réinjectée « CONCEN\_EXT » sera automatiquement égale à la concentration « CONCENTR » calculée à la fin du pas de temps précédent au puits de production (« source ») associé, multipliée par le « taux d'abattement de la concentration ». S'il y a un débit injecté au puits d'injection, l'eau sera injectée à cette concentration CONCEN\_EXT.

$$\text{CONCEN\_EXT\_injection} = \text{CONCENTR\_production\_associée} \times \text{Taux\_d\_Abattement}$$

Pour définir un asservissement de concentration, on procède de la manière suivante : On

appuie sur l'icône , pour arriver au menu des paramètres non maillés. On sélectionne alors « Asservissement Concentration pompage => injection ». (Figure 2).

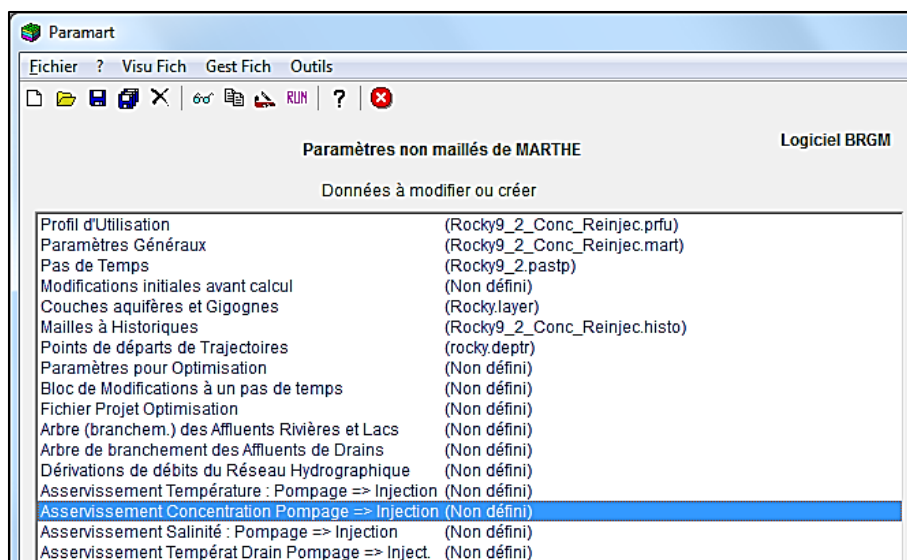


Figure 2 – Création ou modification d'un fichier d'asservissements de concentration.



On voit alors apparaître un tableur pour définir les paramètres de l'asservissement (Figure 3)

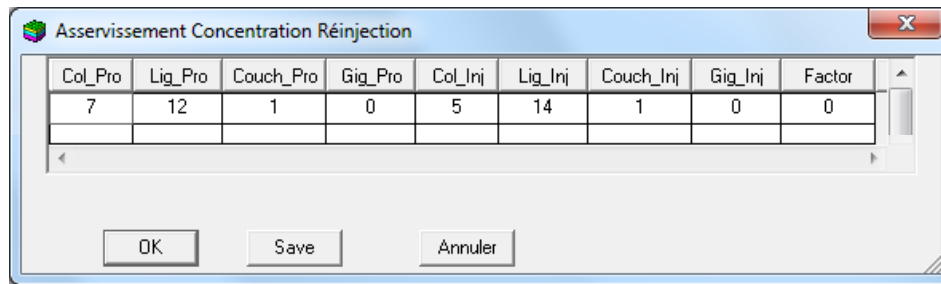


Figure 3 – Définition des paramètres de l'asservissement de concentration.

Dans l'exemple de la Figure 3 : le point de pompage (production) est situé dans la maille de coordonnées (Colonne = 7, Ligne = 12, Couche = 1) et le puits d'injection est situé dans la maille de coordonnées (Colonne = 5, Ligne = 14, Couche = 1). L'eau est injectée sans abattement de concentration, donc avec la concentration de la maille du point de pompage.

Le tableur génère un petit fichier d'extension [.c\_reinj] définissant les paramètres des différents asservissements.

Un exemple de fichier d'asservissement généré pour 2 asservissements est présenté Figure 4.

```

Injected Concentration connected to production well (2 connections)
  7   12   1   0 = Production : Col, Lign, Couch, Gig
  5   14   1   0 = Injection  : Col, Lign, Couch, Gig
  0 = Taux d'abattement Concentration Injection / Production
  9   12   1   0 = Production : Col, Lign, Couch, Gig
 11   15   1   0 = Injection  : Col, Lign, Couch, Gig
 0.2 = Taux d'abattement Concentration Injection / Production
*** Fin du fichier Asservissement Concentr. Injection ***

```

Figure 4 – Exemple de fichier d'asservissement de concentration (2 asservissements).

La première ligne du fichier est un libellé descriptif ignoré par MARTHE, puis chaque asservissement est défini par 3 lignes :

- Ligne n°1 : colonne, ligne, (couche), (gigogne) de la maille contenant le puits de production associé.
- Ligne n°2 : colonne, ligne, (couche), (gigogne) de la maille contenant le puits de réinjection asservi.
- Ligne n°3 : Abattement de concentration

Le nom de ce fichier d'asservissements apparaît dans le fichier projet de MARTHE [.rma], cependant pour voir apparaître ce nom dans les préprocesseurs, il faut dans le « profil d'utilisation » avoir choisi l'option « Utilisation avancée » (ou bien n'avoir pas défini de profil d'utilisation).

### Modification d'asservissements de concentration :

Si à un certain pas de temps, par exemple au pas de temps n°7, on veut introduire de nouveaux asservissements, ou modifier des asservissements existants, il suffit de créer un nouveau fichier d'asservissement, par exemple de nom « Asserv\_apres\_7\_ans.c\_reinj ». Si on a créé ce fichier avec le tableur intégré : il ne faut pas l'affecter au fichier projet [.rma], donc ne pas « sauvegarder le fichier projet ». En effet si on sauvegardait le fichier projet ce nouveau fichier

d'asservissement remplacerait le précédent dès le pas de temps n°0. Au pas de temps de modèle choisi, on définit alors le nom du fichier d'asservissements par l'objet « CONCEN\_RE-INJ » = « Asservissement de Concentration » (Figure 5).

Le nouveau fichier d'asservissement remplace l'éventuel fichier déjà défini. Les éventuels asservissements existants existant préalablement sont annulés avant prise en compte du nouveau fichier.

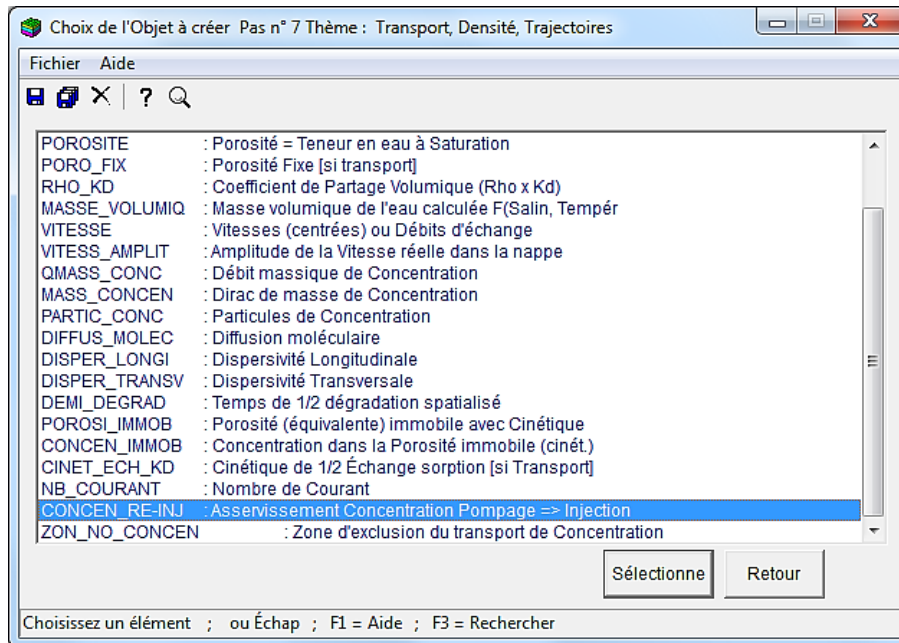


Figure 5 – Introduction d'un nouveau fichier d'asservissement de concentration au pas de temps n°7.

### 5.5.5 Concentration de la recharge

C'est la concentration de l'infiltration (ou de la recharge) dans les zones où elle est positive. Cette concentration s'applique uniquement à l'infiltration. Elle ne s'applique pas à l'excès d'irrigation. En cas de besoin, il faudrait donc définir l'excès d'irrigation comme une recharge.

La concentration de la recharge (champ CONCEN\_RECH) peut être définie uniquement par zone d'infiltration. Elle ne peut pas être définie par maille. Il n'y a pas de fichier grille de concentration de la recharge.

#### Remarque 1 :

Il est possible de définir simultanément dans une même maille :

- un flux massique ;
- une injection instantanée de masse ;
- une concentration du fluide extérieure ;
- une concentration de l'infiltration.

**Remarque 2 :**

En notant « Surf » la surface horizontale de la maille, « dt » la durée du pas de temps, « QI » le débit injecté dans une maille, « Infiltr » l'infiltration. On a les équivalences suivantes (sans tenir compte des unités) :

$Q_{\text{MASS\_CONC}} = Q_{\text{I}} \cdot \text{CONCEN\_EXT}$ $Q_{\text{I}} \cdot \text{CONCEN\_EXT} = \text{Infiltr} \cdot \text{Surf} \cdot \text{CONCEN\_RECH}$ $Q_{\text{MASS\_CONC}} \cdot dt = \text{MASS\_CONCEN}$
---

**5.6 Initialisation**

On définit en début de calcul une concentration initiale avec, en particulier, les valeurs de concentration imposée. La concentration est un champ, de nom « CONCENTR » et d'extension de fichier [.conce], qui peut éventuellement être changée en cours de calcul. Si le transport se fait par la méthode TVD ou DF, la concentration peut être négative. Une telle concentration négative pourrait par exemple être utilisée lors de calculs géochimiques, pour représenter l'écart de concentration par rapport à un état de référence. Si le transport se fait par particules (MOC ou RW), la concentration doit être positive ou nulle puisque le nombre de particules dans une maille (qui est obtenu en divisant la masse en solution par la masse d'une particule) doit être positif.

**5.7 Maillage****5.7.1 Liaisons étanches**

Les liaisons étanches entre mailles utilisées lors des calculs hydrodynamiques (calcul du champ de charge hydraulique ou du champ de pression) sont prises en compte dans les calculs de transport : il n'y a pas de convection ni de dispersion entre deux mailles séparées par une liaison étanche.

**5.7.2 Maillages contenant des sous-maillages gigognes**

Les méthodes de transport DF, MOC et RW peuvent être utilisées avec des maillages gigognes. En revanche, la méthode TVD ne peut pas être utilisée avec des maillages gigognes.

**5.8 Champ de vitesses et trajectoires**

Pour visualiser les écoulements, il est possible de représenter graphiquement les vitesses au centre de chaque maille. On a ainsi la possibilité de visualiser la totalité de l'écoulement, sans choix *a priori* d'un point de départ. Si on veut visualiser les trajectoires passant par certains points donnés, avec les temps écoulés pour parcourir ces trajectoires, il peut être plus intéressant de calculer automatiquement ces trajectoires en tenant compte des éventuels coefficients de retard et du régime hydrodynamique en transitoire.

Le calcul des trajectoires est toujours possible, même si on ne calcule pas de concentration.

### 5.8.1 Définition des départs de trajectoires

Le nombre de points de départ de trajectoires n'est pas limité. L'utilisateur peut en choisir autant qu'il le souhaite.

Les points de départ sont définis dans un fichier « Départ de trajectoires », dont le nom d'extension de fichier [.deptr], est donné dans le fichier projet (répertoire des fichiers) du code de calcul MARTHE.

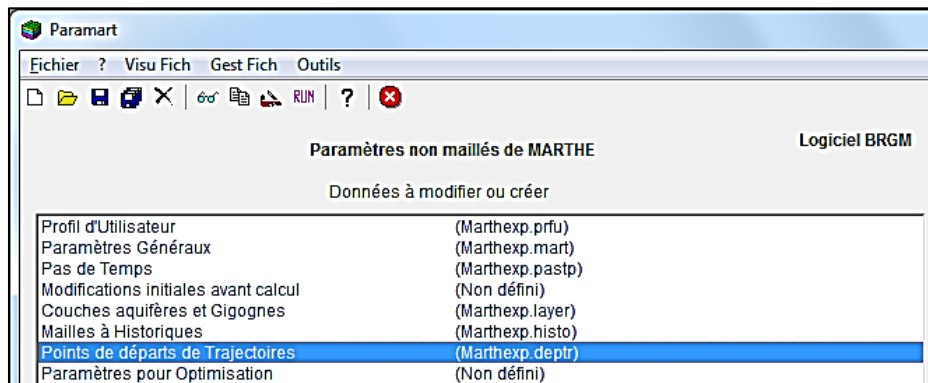


Figure 6 – Sélection du fichier « Points de départ de trajectoires ».

Pour respecter la cohérence des trajectoires, ce fichier ne peut pas être modifié au cours des pas de temps de simulation.

### 5.8.2 Coordonnées des points de départ

Les coordonnées des points de départ peuvent être données de deux manières :

- sous forme de coordonnées X, Y, Z quelconques ;
- ou bien sous forme de numéros (ligne, colonne, couche) de maille : les trajectoires partent alors, dans ce dernier cas, à l'intérieur des mailles correspondantes.

Dans les deux cas, le fichier commence par une ligne titre descriptive, suivie des coordonnées des points en format libre, à raison d'une ligne de fichier par point de départ :

#### a) Coordonnées réelles

Les coordonnées sont données, en format libre, sous forme :

X, Y	si l'écoulement est en 2D
X, Y, Z	si l'écoulement est en 3D
X, Z	si l'écoulement est en coupe ou en cylindrique (radial).

#### b) Coordonnées des mailles

Une ligne comportant les coordonnées des mailles doit obligatoirement commencer en premier caractère par le caractère « M » (pour Maille) ou « C » (pour Cell) ; on donne alors :

N° Col, N° Lign	en 2D (numéros de colonne et de ligne)
N° Col, N° Lign, N° Cou	en 3D
N° Col, N° Cou	en coupe ou en cylindrique (radial).

Si le maillage contient des sous-maillages gigognes, on définira en dernière coordonnée le numéro N° Gig du sous-maillage gigogne (0 pour le maillage principal) par exemple :

N° Col, N° Lign, N° Gig                                  en 2D

Ou bien :

N° Col, N° Lign, N° Cou, N° Gig                          en 3D

Avec :

N° Cou =        Numéro de la couche = nombre entier

N° Gig =        Nombre entier

Pour faciliter la définition des points de départ, il est possible de donner le numéro de ligne (N° Col) et le numéro de ligne (N° Lig) sous forme décimale.

Par exemple :

N° Col = 3        : Correspond à l'abscisse du centre de la colonne n°3

N° Col = 3.2    : Correspond à la colonne n°3, à 20 % de la largeur (de la colonne n°3) à l'est du centre

N° Col = 2.7    : Correspond à la colonne n°3, à 30 % de la largeur (de la colonne n°3) à l'ouest du centre

N° Col = 3.5    : Correspond à la limite entre la colonne n°3 et la colonne n°4

N° Lign = 4.2   : Correspond à la ligne n°4, à 20 % de la largeur (de la ligne n°4) au sud du centre, donc en dessous, ce qui est logique car la ligne n°5 est située en dessous de la ligne n°4.

Par ailleurs, on a introduit la facilité suivante :

N° Col = \*        : Indique toutes les colonnes

N° Lign = \*       : Indique toutes les lignes

N° Cou = \*        : Indique toutes les couches.

Remarque : Il est tout à fait possible de mélanger, dans un même fichier des coordonnées réelles et des coordonnées de mailles.

```

Exemple de fichier de << Départs de Trajectoires >>
M      7      3
M     12     9   [Centres de Mailles : (Colonne, Ligne)]
M      8      3
M     7.3    9.2 [Colonne n°7, 30% vers Est ; Ligne n°9, 20% vers le Sud]
M      *     1   [Toutes les Colonnes de la Ligne n°1]
M     18     12
1820.  2080.
1840.  2060.
1860.  2040.   [Départs coordonnées (X , Y) ]
1880.  2020.
1621.  1857.
*** Fin du fichier Départ de Trajectoires ***

```

Figure 7 – Exemple de fichier « Départ de trajectoires ».

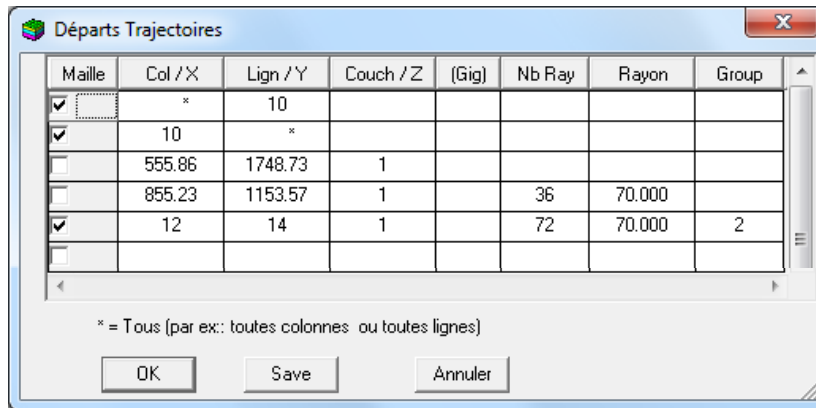


Figure 8 – Sélection des points de départ de trajectoire.

Dans l'exemple présenté :


- Quand il y a une « coche » (ou « check ») dans la colonne « Maille » la définition se fait par colonne, ligne, couche, gigogne : c'est le cas des lignes n°1, n°2 et n°5 de l'exemple
- Quand il n'y a pas de « coche » (lignes n°3 et n°4) le point de départ est défini par X, Y, Couche. (L'éventuel numéro de gigogne n'est alors pas pris en compte).
- Si on ne précise pas le numéro de couche : c'est la couche n°1 qui est choisie
- Le numéro de groupe (dans la dernière colonne) est facultatif. Il apparaît dans le fichier de trajectoires calculées « trajmar.out » et peut servir à distinguer des faisceaux de trajectoires d'origines différentes.

## 5.9 Durée des pas de temps de calcul (en régime transitoire)

Les calculs de transport de masse peuvent être réalisés en régime permanent ou en régime transitoire, indépendamment des calculs hydrodynamiques (calcul du champ de charge hydraulique), qui peuvent eux aussi être réalisés en régime permanent ou en régime transitoire.

Si on est en régime transitoire pour les calculs hydrodynamiques et en régime transitoire pour le transport, les pas de temps de calcul (définis dans le fichier des pas de temps) seront les mêmes.

Si le régime hydrodynamique est permanent, et si on désire faire un transport de masse en régime transitoire : les pas de temps pour le transport seront définis dans le « fichier des pas de temps », d'extension de fichier [.pastp]. Cette définition des pas de temps se fait avec le module

de « Gestion des données non maillées » (module « Paramart »), accessible par le bouton  de la barre d'outils du bas du cadre de WinMarthe.

### 5.9.1 Sous-pas de temps de modèle

Dans MARTHE, dans le paragraphe « Pas de temps et sous-pas de temps » du fichier des paramètres, il est possible de définir des « sous-pas de temps de modèle ». Les calculs d'hydrodynamique et de transport de masse s'effectuent tous les sous-pas de temps de modèle. Il est absolument identique de définir 100 pas de temps de modèle ayant chacun une durée de 1 unité de temps, ou de définir un seul pas de temps de modèle de durée 100 unités de temps et 100 sous-pas de temps de modèle. L'utilisation de sous-pas de temps de modèle est très souple puisqu'elle permet par un seul paramètre de faire varier la durée des pas de temps de calcul (par exemple pour réaliser un calcul à pas de temps plus fin). Quand on utilise

des sous-pas de temps de modèle, les éventuels « Diracs » (injections instantanées) seront logiquement appliqués en début du premier sous-pas de temps, et les éventuelles sauvegardes demandées seront logiquement faites à la fin du dernier sous-pas de temps.

### 5.9.2 Sous-pas de temps de calculs en ZNS

Les calculs hydrodynamiques en Zone Non Saturée (ZNS) font intervenir des pas de temps de calcul, avec un pas de temps minimal et un pas de temps maximal. Ces pas de temps de calcul variables ne sont pas uniquement internes au calcul du champ de charge hydraulique. Ils s'appliquent également au calcul du transport.

### 5.9.3 Sous-pas de calcul pour les trajectoires, ou pour les particules RW

Pour les calculs de trajectoires, ou pour les calculs de transport par particules RW, il est possible de définir un nombre fixe de sous-pas pour le déplacement des particules (ou des trajectoires). Les particules sont déplacées pendant des temps plus courts ce qui permet une meilleure prise en compte des conditions aux limites à concentration imposée et des sorties des particules dans les exutoires naturels ou artificiels.

- Pour un calcul de trajectoires : on peut obtenir des points intermédiaires, d'où des courbes plus lisses, mais les intersections avec les limites de mailles sont inchangées ;
- Pour le transport par RW : le calcul est plus précis en cas de singularités... mais les temps de calculs peuvent être significativement plus longs ;
- Pour le transport par la méthode des caractéristiques (MOC) : les résultats sont quasi inchangés puisque la convection par particules est faite en premier, pour tous les sous-pas de temps, avant la dispersion unique par différences finies.

Remarque : Ces sous-pas de temps pour les particules sont sans objet pour les calculs avec la méthode TVD ou DF.

### 5.9.4 Transport par particules ou calcul de trajectoires en régime permanent

Le transport par particules (MOC, RW) et le calcul de trajectoires se font par déplacement de particules au cours du temps (les trajectoires se comportent comme des particules). Pour ces méthodes (MOC, RW ou trajectoires), la notion de régime permanent du transport n'existe pas exactement. Il faut en effet déplacer les particules pendant une certaine durée réelle et on calcule le champ de concentration après cette durée. Pour faire un calcul de transport par particules en régime permanent on peut :

- Soit faire un calcul en régime transitoire pendant une assez longue durée en contrôlant que le champ de concentration se stabilise ;
- Soit donner, dans le fichier des paramètres, une grande durée équivalente à un permanent. Il faut choisir une durée assez grande, mais pas trop car le temps de calcul de la simulation est directement proportionnel à cette durée.

Remarque : Si le calcul de transport est réalisé avec la méthode TVD ou DF, ou bien en régime transitoire, cette durée n'est pas prise en compte.

Pour un calcul de trajectoires en régime permanent, une grande durée est automatiquement choisie par MARTHE, sauf si une durée a déjà été donnée (pour un transport par particules).

## 5.10 Calibration automatique des paramètres

Si on dispose d'observations de concentration (champ CONCENTR), les paramètres de transport de MARTHE peuvent être déterminés par calibration automatique.

Les paramètres de transport pouvant être déterminés par calibration automatique sont les suivants :

DIFFUS_MOLEC	= Diffusion moléculaire
DISPER_LONGI	= Dispersivité longitudinale
DISPER_TRANSV	= Dispersivité transversale
POROSITE	= Porosité
RETAR_CONC	= Coefficient de retard
DEGRA_CONCEN	= Constante de temps de dégradation
RHO_KD	= Coefficient de partage volumique
PORO_FIX	= Teneur en eau liée (en Zone Non Saturée).
POROSI_IMMOB	= Porosité de la phase immobile
CINET_ECH_KD	= Cinétique d'échange avec la concentration immobile

Il est bien entendu possible de calibrer également les paramètres hydrodynamiques (perméabilité, coefficient d'emmagasinement, facteurs d'infiltration, etc.).

La calibration automatique des paramètres peut s'effectuer sur des observations de :

- 1 ou 2 champs de concentration (CONCENTR) ;
- Des historiques de concentration (Concentr) ;
- Des historiques de concentration dans le débit sortant (Concent\_Sort).

## 5.11 Sauvegarde des résultats de calcul

### 5.11.1 Champs calculés

À n'importe quel pas de temps, il est possible de sauvegarder des champs calculés sous forme de « grilles MARTHE ».

En plus des champs classiques, les champs relatifs au transport de masse qui peuvent être sauvegardés sont les suivants :

- CONCENTR = Concentration.
- CONCEN\_IMMOB = Concentration dans la porosité immobile (échanges avec cinétique, si on a choisi l'option : « Calculs avec cinétique d'échange »).
- VAR\_CONCENT = Différence de concentration par rapport à la concentration initiale : (accessible en sélectionnant le champ « CONCENTR »).
- QMASS\_CONC = Débit massique « concentration ».
- ECH\_MASS\_FACE = Débit massique échangé par chaque face des mailles.
- NB\_COURANT = Nombre de Courant (dans les modélisations en régime transitoire).
- QMASSE\_RESID = Débit massique résiduel (pour contrôler la convergence).

Également, dans les modélisations avec réseau hydrographique (rivières) :

- CONCEN\_RIVI = Concentration dans les tronçons de rivière.



- QMASS\_RIVI = Débit massique « concentration » à l'aval des tronçons de rivière.
- Débit massique d'échange Nappe-Rivière dans les tronçons Positif quand le flux va de la nappe vers la rivière.

Également, dans les modélisations avec réseau de drains-conduits :

- CONCEN\_DRAIN = Concentration dans les Drain-Conduits.
- Q\_MASS\_DRAIN = Débit massique « concentration » à l'aval des tronçons de Drain-Conduit.
- Débit massique d'échange Nappe-Drain dans les tronçons Positif quand le flux va de la nappe vers le drain-conduit.

Le débit massique est exprimé en « unité utilisateur de masse par unité utilisateur de temps ».

La méthode de sélection est celle qui est utilisée pour sauvegarder les champs lors des calculs d'hydrodynamique. Par exemple :

Sélectionner l'objet : CONCENTR (par exemple).  
Puis sélectionner l'action : EDITION

Les grilles MARTHE sélectionnées sont sauvegardées, en clair ou en binaire :

- Dans le fichier « chasim.out » pour les états (concentrations)
- Dans le fichier « debsim.out » pour les flux ou débits.

En outre, si le domaine est monodimensionnel, les valeurs apparaissent en format libre dans le fichier séquentiel « chasimsq.prn », importable directement dans Excel® (ou un tableur équivalent), et également dans le fichier « chasimsq.out ».

### 5.11.2 Champ du débit massique calculé

#### ***Champ du débit massique dans chaque maille.***

C'est le débit massique échangé avec l'extérieur du domaine : QMASS\_CONC.

Le débit massique est exprimé en unité de masse par unité de temps. Il est sauvegardé dans le fichier « debsim.out ». Une valeur positive indique un débit massique entrant ; une valeur négative indique un débit massique sortant. Le débit massique apparaît uniquement pour les mailles suivantes :

- Mailles avec injection ou prélèvement de masse ;
- Mailles à concentration imposée ;
- Mailles limites du domaine à charge hydraulique imposée.

#### ***Débits massiques échangés par les faces de chaque maille***

Les débits massiques échangés par les 4 ou 6 faces de la maille, ainsi que les termes source, sont sauvegardés dans un fichier séquentiel de nom « flux\_mass.out ».

Le débit massique échangé est exprimé en unité de masse par unité de temps. Le terme source comprend les injections ou prélèvements massiques, ainsi que les termes de dégradation. Par exemple, la Figure 9 présente un extrait d'un tel fichier séquentiel pour deux mailles : une maille interne (n°22) et une maille avec injection (maille n°112). Dans la maille n°112, on injecte un

débit massique de +318.73 ; dont 5.82 se dégrade, soit un débit net de 312.91 qui sort par les quatre faces avec la répartition :

Nord	=	-54.25	
Ouest	=	-75.48	
Est	=	-79.82	
Sud	=	-103.35	
Stockage	=	0.008	
Source	=	+312.91	(318.73 - 5.82)

La sauvegarde des débits échangés par face est possible uniquement avec les méthodes de transport faisant intervenir des différences finies (TVD, DF ou MOC). Avec la méthode MOC, le bilan correspond uniquement à la phase dispersion par différences finies.

```
Exemple Rocky Mountain +Dégrad=20 ans *Transpor <QFACE> Pas n°7 (>0 =Entrant)
```


[Maille n°22 : Maille interne]												
#	Cou	Lig	Col	N	Mai	Nord	Ouest	Source	Est	Sud	Stockage	Somme
0	1	2	5		22	0.146	-0.007.64	-0.0203	0.00959	-0.128	-4.27E-04	-2.96E-12
[Maille n°112 : Maille d'injection]												
#	Cou	Lig	Col	N	Mai	Nord	Ouest	Source	Est	Sud	Stockage	Somme
0	1	7	10		112	-54.25	-75.48	+312.91	-79.82	-103.35	0.00815	-1.53E-08

Figure 9 – Extrait de fichier « flux\_mass.out » présentant les échanges massiques par les quatre faces des mailles n°22 et n°112.

### 5.11.3 Mailles à historiques

Il est possible de sélectionner certaines mailles du domaine modélisé pour lesquelles on souhaite sauvegarder l'évolution temporelle des valeurs de concentration (champ « Concentr ») ou de concentration dans le débit sortant (champ « Concent\_Sort »). On peut sauvegarder également d'autres historiques.

Comme pour les historiques de charge hydraulique, de débit ou de teneur en eau, etc., cette sélection s'effectue dans le fichier des « mailles à historiques », d'extension [.histo].

La sélection des mailles et des champs est réalisée par le module de « Gestion des données non maillées », accessible par le bouton  de la barre d'outils du bas du cadre de WinMarthe. On choisit alors la ligne « Mailles à Historiques ».

Les historiques calculés des mailles sélectionnées sont sauvegardés dans les fichiers « historiq.prn » et « historiq.out » habituels.

### Concentration dans le débit sortant

Avec les méthodes de transport TVD et DF, la concentration dans un débit sortant par un exutoire naturel (limite à charge hydraulique imposée) ou artificiel (captage) est égale à la concentration de la maille de laquelle sort le débit. Avec la méthode RW, ces deux concentrations peuvent être différentes à cause de l'irréversibilité due au fait qu'une particule sortie (par effet aléatoire) ne peut plus rentrer à nouveau. La différence entre ces deux concentrations peut être d'autant plus grande que le pas de temps (le nombre de Courant) est grand. Avec la méthode MOC, ces concentrations peuvent également être différentes

dans certains cas, à cause du découpage du transport en deux étapes successives convection (et sortie par les exutoires) puis dispersion. La concentration dans la maille de calcul peut alors être supérieure, si la dispersion apporte plus de masse qu'elle n'en évacue, ou bien inférieure dans le cas contraire.

On a donc défini une « concentration sortante » (champ « Concent\_Sort ») qui est la concentration dans un débit sortant. Ce champ est utilisé uniquement avec les méthodes de transport à particules et seulement pour la sauvegarde des historiques de concentration (ou pour la calibration automatique des paramètres sur des historiques d'observations).

On peut sauvegarder des historiques de :

• Concentration calculée	: Champ : Concentr
• Concentration du débit sortant	: Champ : Concent_Sort
• Concentration dans un tronçon de rivière	: Champ : Concen_Rivi
• Concentration dans un tronçon de drain	: Champ : Concen_Drain
• Concentration immobile	: Champ : Concen_Immobil
• Flux massique (lié à la concentration)	: Champ : Q_Mass_Concen
• Flux massique dans un tronçon de drain	: Champ : Q_Mass_Drain
• Flux massique Nappe => Drain	: Champ : Qmas_Napp_Dra
• Flux massique dans un tronçon de rivière	: Champ : Q_Mass_River
• Flux massique Nappe => Drain	: Champ : Qmas_Napp_Riv

#### 5.11.4 Trajectoires

Les coordonnées des points définissant les trajectoires sont sauvegardées en clair ; en « fichier texte » dans le fichier « trajmar.out » (Figure 10) ; elles sont sauvegardées trajectoire par trajectoire. Pour chaque trajectoire, toutes les positions et dates sont données sous forme de quelques lignes descriptives suivies d'une ligne par date contenant (en format libre) :

(X, Y, Z, Date)	En 3D
ou bien	
(X, Y, Date)	En écoulement monocouche 2D
ou bien	
(X, Z, Date)	En coupe verticale ou en cylindrique.

Le « Groupe » est un indice, introduit par l'utilisateur, qui peut permettre de distinguer des trajectoires provenant par exemple de différentes limites ou de différents puits d'injection.

En écoulement 2D, les trajectoires sont également sauvegardées dans le fichier « trajmar.bln » qui peut être importé dans le préprocesseur WinMarthe par le menu « Polygones ».

```

17 <Trajectoires> : (X,Y,Z,T,C) X=1,Y=1,Z=0,C=0 : Rocky Mount
! Nombre de Points = 29 ;
! Trajectoire n° 1 ===== [V7.5]
      X           Y           Z           Temps           Groupe
0.000000      20000.00      0.000000      0.000000           1
0.000000      19863.18      0.000000      1.000000           1
0.000000      19500.00      0.000000      2.865608           1
-3.193862     18982.07      0.000000      5.000000           1
. . . . .
-297.6186     500.0000      0.000000      54.31149           1
-297.6186    -466.6041      0.000000      60.00000           1
! Nombre de Points = 30 ;
! Trajectoire n° 2 =====
1000.000      20000.00      0.000000      0.000000           1
1000.000      19865.09      0.000000      1.000000           1
100.9915      1500.000      0.000000      53.01187           1
104.6454      500.0000      0.000000      54.68022           1
104.6454     -458.3718      0.000000      60.00000           1
    
```

Figure 10 – Exemple de fichier trajectoires : fichier « trajmar.out ».

### 5.11.5 Position des particules

Avec les méthodes de transport à particules (MOC ou RW), il est possible de demander à n'importe quel pas de temps la sauvegarde des positions des particules. Les coordonnées seront sauvegardées en clair, en « fichier texte » ou en binaire dans le fichier « partic.out » (dans les calculs avec salinité ou température, les trois types de particules concentration, salinité, température, seront sauvegardés à la suite les uns des autres). Si on demande la sauvegarde des particules à différentes dates, on obtiendra sur ce même fichier les positions de toutes les particules à une date donnée, puis à la date suivante, etc.

Si les positions des particules sont sauvegardées en fichiers « texte ». Le fichier peut être utilisé pour représenter graphiquement le nuage de particules. Si le domaine de calcul est en 2D, les particules peuvent être directement visualisées par un logiciel de dessin comme Surfer® ou Grapher®.

Pour choisir de sauvegarder les particules (à un pas de temps donné) il faut :

Sélectionner l'objet : PARTIC\_CONC  
 Puis sélectionner l'action : EDITION.

Si on choisit une sauvegarde en clair, les positions des particules apparaissent sous la forme suivante :

- une ligne titre descriptive ;
- une ligne donnant le nombre de particules et le nombre de coordonnées par particule ;
- puis une ligne par particule sous l'une des formes suivantes :

X, Y, Numéro de maille (en 2D)  
 ou bien  
 X, Z, Numéro de maille (en coupe verticale)  
 ou bien  
 X, Y, Z, Numéro de maille (en 3D)

### 5.11.6 État final du modèle

Si, dans le paragraphe « sauvegardes et contrôles » du fichier des paramètres, on a choisi l'option : « sauvegarde de l'état de fin de calcul », MARTHE sauvegarde en fin de calcul tous les fichiers modifiés. Il sauvegarde en particulier les « grilles MARTHE » du champ de charge hydraulique et du champ de concentration. Il est ainsi possible de poursuivre les calculs si nécessaire.

Avec les méthodes à particules, si on l'a demandé spécifiquement dans le paragraphe « couplage et transport » du fichier des paramètres, MARTHE sauvegarde les positions des particules en fin de calcul. Ces positions sont sauvegardées, en fichier texte ou en binaire, dans le fichier de nom générique « Etat\_final.partc ». Il est ainsi possible de réutiliser ces positions de particules pour relancer une simulation, comme si on ne s'était pas arrêté.

### 5.12 Suivi du déroulement des calculs

Le déroulement et la convergence des calculs peuvent être suivis sur le fichier « bilandeb.txt ». Les Figure 11 à Figure 13 présentent les étapes d'un calcul par la méthode TVD ou DF :

- Calcul par résolution matricielle du champ de concentration ;
- Bilan des débits massiques ;
- Nombre de Courant et de Péclet ;
- Cumul des masses échangées.

La Figure 14 présente un calcul par la méthode MOC. La Figure 15 présente un calcul par la méthode Random Walk (RW).

Calcul du transport de la Concentration						
=====						
Numéro	Variation	Variation	Variation	Variation Maximale Concentration		
Itération	moyenne	algèbr. moyenne	Valeur ;	Col	Lig	Cou #
	par maille	par maille				
4	2.414E-05	-6.200E-06	6.043E-04	5	8	1
Après calcul : Écart de bilan en Masse						
=====						
	Écart	Écart Algèbr.	Écart maximal de Bilan (Masse)			
	moyen	moyen	Valeur ;	Col	Lig	Cou #
	1.453E-08	-1.122E-09	2.987E-07	4	9	1

Figure 11 – Calcul du champ de concentration.

```

=====
Bilan du Transport de la Concentration - Nappe :
=====
Bilan en unité de Masse/unité de Temps : Pas de temps n° 4 - t= 10.000
(c'est à dire en : 3.169 kg/s)
par les Limites      =      Entrant      Sortant      Net
Injection/Pompage   =      318.735     -9.132      309.603
Mailles Internes Rési= 2.394E-06     -2.794E-06  -4.006E-07
Dégradation         =              -93.611
-----
Stockage            =      209.950     -1.398      208.552
Bilan de Contrôle   = 3.157E-13 (Somme totale y compris résidus)
Somme Résidus Intern = 5.188E-06 (Somme val. absolues des résidus)

Somme val abs des résidus = 5.188E-06 Plus grande composante = 321.487
=> Converg. Interne Masse à : 1.614E-06 % d'erreur
Écart de bilan Masse global = 4.006E-07 (Bilan entrées/sorties)
=> Converg. Masse globale à : 1.246E-07 % d'erreur

Résidu Interne Maximal = 2.987E-07 Col: 4 , Lig: 9 , Cou: 1
Soit un écart de Concen de : -3.194E-06
    
```

Figure 12 – Méthode TVD ou DF : bilan des débits massiques et critères de convergence.

```

===== Pas de temps n° 4 - t= 10.000
Nombre de Courant maxi = 2.465 Col: 10, Lig: 7, Cou: 1
Nombre de Courant moyen= 0.683 (357 valeurs)
Nombre de Courant      = 1.017 (Pondéré par le débit massique)
Nombre de Péclet moyen= 1.885 (357 valeurs)
Nombre de Péclet      = 1.999 (Pondéré par le débit massique)
===== Pas de temps n° 4 - t= 10.000
- Cumul des masses 'Concentration' Dans le pas Depuis début de la simulation
Entrant par les Limites = 6.880 27.52
Sortant par les Limites = -25.48 -81.01
Entrant dans les mailles Internes = 796.8 3187.
Sortant par les mailles Internes = -22.83 -53.75
Dégradation = -234.0 -664.7
Stockage = 521.4 2415.
[Stockage Positif (Entrant)] = 524.9 2443.
[Stockage Négatif (Sortant)] = -3.494 -27.63
Écart de bilan de masse ou de chaleur= 1.0014E-06 5.9083E-06
(%) = 1.2567E-07 1.8537E-07

Masse totale (phase mobile) = 2701.
    
```

Figure 13 – Nombres de Courant et de Péclet ; cumul des masses échangées au cours de la simulation.

Calcul du Transport de la Concentration pas de temps n°4 : **Méthode MOC**  
Convection par particules  
Initialement :  
22930 Particules existantes (24379 numéros)

Nombre de Courant maxi =	2.47	Col: 10, Lig: 7, Cou: 1
Nombre de Courant moyen=	0.683	(357 valeurs)
Nombre de Courant =	1.05	(Pondéré par le débit massique)
Nombre de Péclet moyen=	1.92	(357 valeurs)
Nombre de Péclet =	2.77	(Pondéré par le débit massique)
Nombre de Diffus moyen=	1.25	(357 valeurs)

(c'est  $dt \cdot dx \cdot dx / D$  cad : pas de temps/pas critique pour la diffusion)  
Après Transport (sans dispersion) :  
28512 particules existantes (28512 numéros) [variat.=5582]  
75598 déplacements effectués  
(2457 particules sorties)

Variation moyenne par maille	Variation algèbr. moyenne par maille	Variation Maximale Valeur ;	Concentration Col	Concentration Lig	Concentration Cou	Concentration #
21.632	19.545	295.000	11	13	1	

=====  
Bilan du Transport de la Concentration - Nappe :  
(convection seule sans dispersion)  
=====

Bilan en unité de Masse/unité de Temps : Pas de temps n° 4 - t= 10.000  
(c'est à dire en : 3.169 kg/s)

	Entrant	Sortant	Net
par les Limites =	2.840	-5.520	-2.680
Injection/Pompage =	318.760	-2.600	316.160
Dégradation =		-90.200	
-----			
Stockage =		223.280	

Contrôle du Bilan = 4.843E-11

Dispersion par différences finies

Calcul du transport de la Concentration  
=====

Numéro Itération	Variation moyenne par maille	Variation alg. moyenne par maille	Variation Maximale Valeur ;	Concentration Col	Concentration Lig	Concentration Cou	Concentration #
4	2.042E-05	-5.515E-09	4.763E-04	9	8	1	

Après calcul : Écart de bilan en Masse  
=====

Écart moyen	Écart Algèbr. moyen	Écart maximal de Bilan (Masse) Valeur ;	Concentration Col	Concentration Lig	Concentration Cou	Concentration #
1.739E-08	-4.639E-09	4.001E-07	12	7	1	

28518 Particules existantes : Après dispersion (variat.=6)

Figure 14 – Calcul du champ de concentration par la méthode MOC. 2 étapes :  
1) convection par particules ; 2) dispersion par différences finies.

Calcul du Transport de la Concentration pas de temps n°4 : Random Walk						
22916 Particules existantes (22916 numéros)						
Nombre de Courant maxi =	2.47	Col: 10, Lig: 7, Cou: 1				
Nombre de Courant moyen=	0.683	(357 valeurs)				
Nombre de Courant =	1.33	(Pondéré par le débit mas				
Nombre de Péclet moyen=	1.92	(357 valeurs)				
Nombre de Péclet =	4.18	(Pondéré par le débit mas				
Nombre de Diffus moyen=	1.25	(357 valeurs)				
(c'est $dt \cdot dx \cdot dx / D$ cad : pas de temps/pas critique pour la diffusion)						
Après transport :						
28549 particules existantes (28549 numéros) [variat.=5633]						
86277 déplacements effectués						
(2405 particules sorties)						
Variation	Variation		Variation	Maximale	Concentration	
moyenne	algèbr. moyenne		Valeur ;	Col	Lig	Cou #
par maille	par maille					
22.854	19.723		230.000	10	13	1
=====						
Bilan du Transport de la Concentration - Nappe :						
=====						
Bilan en unité de Masse/unité de Temps : Pas de temps n° 4 - t= 10.000						
(c'est à dire en : 3.169 kg/s)						
	Entrant	Sortant	Net			
par les Limites =	2.840	-5.600	-2.760			
Injection/Pompage =	318.720	-2.520	316.200			
Dégradation =		-88.120				
-----						
Stockage =		225.320				
Contrôle du Bilan =	4.832E-11					

Figure 15 – Calcul du champ de concentration par la méthode Random Walk, et bilan des débits massiques.



### 5.13 Les fichiers de données supplémentaires pour le transport de masse


Les fichiers ou champs supplémentaires pouvant être utilisés pour le transport de masse sont listés dans la Figure 16.

<i>Aquifère :</i>	
Porosité = Teneur en Eau à Saturation	: POROSITE
Concentration dans la nappe	: CONCENTR
Concentration Extérieure	: CONCEN_EXT
Concentration dans la Recharge [Ce n'est pas un fichier spatialisé]	: CONCEN_RECH
Débit Massique Concentration	: QMASS_CONC
Dirac de Masse_Concentration	: MASS_CONCEN
Coefficient de Partage Volumique (Rho x Kd)	: RHO_KD
Cinétique de 1/2 Échange Sorption	: CINET_ECH_KD
Diffusion Moléculaire spatialisée	: DIFFUS_MOLEC
Dispersivité Longitudinale spatialisée	: DISPER_LONGI
Dispersivité Transversale spatialisée	: DISPER_TRANSV
Temps de 1/2 Dégradation spatialisé	: DEMI_DEGRAD
Porosité (équivalente) immobile avec Cinétique	: POROSI_IMMOB
Concentration dans la Porosité immobile (cinétique)	: CONCEN_IMMOB
Asservissement Concentration Pompe => Injection	: CONCEN_RE-INJ
<i>Rivières :</i>	
Concentration dans la Rivière	: CONCEN_RIVI
Concentration Extérieure de Rivière	: CONC_EXT_RIVI
Débit Massique de Concentration dans la Rivière	: QMASS_RIVI
Dirac Masse de Concentration dans la Rivière	: MASSE_RIVI
<i>Drains :</i>	
Concentration de Drain/Conduit	: CONCEN_DRAIN
Concentration Extérieure de Drain/Conduit	: CONC_EXT_DRAI
Débit Massique Concentrat. de Drain/Conduit	: Q_MASS_DRAIN
Dirac de Masse_Concentrat. de Drain/Conduit	: MASSE_DRAIN
Porosité des Drains_Conduits si Zone Non Saturée	
<i>Multicomposant - Dégradation en chaine :</i>	
Temps de 1/2 Dégradation Multicomposant	: DEGRAD_MULTIC
Coefficients de Retard Multicomposant	: RETARD_MULTIC
Coefficient de partage Rho_Kd Multicomposant	: RHOKD_MULTIC
Taux de Filiation (si Dégradation Parallèle)	: TAUX_FILIAT
<i>Autres :</i>	
Index d'exclusion du calcul de concentration	: ZON_NO_CONCEN
Particules de Concentration	: PARTIC_CONC
Départs de Trajectoires	: DEPART_TRAJ

Figure 16 – Liste des fichiers (et des champs) relatifs au transport de masse.



## 6 Description détaillée des paramètres généraux relatifs au transport

Le fichier des « Paramètres Généraux » est créé ou modifié par le module de « Gestion des données non maillées » (« Paramart »), accessible par le bouton  de la barre d'outils du bas du cadre de WinMarthe. On choisit alors la ligne « Paramètres Généraux » (Figure 17).

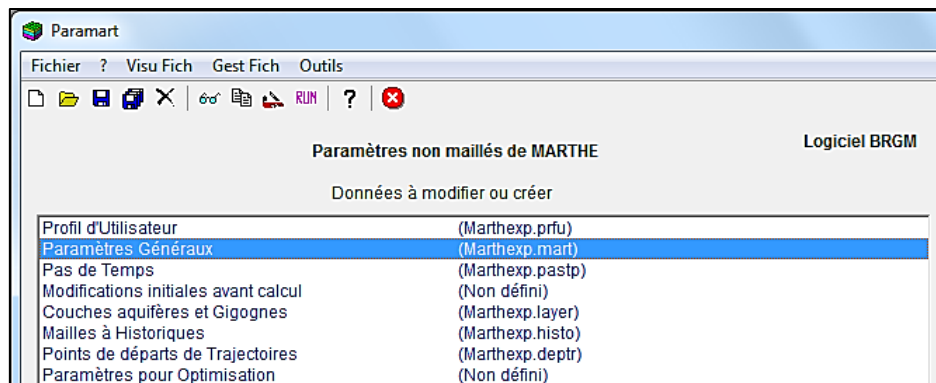


Figure 17 – Sélection du fichier des « Paramètres Généraux ».

Le fichier des « Paramètres Généraux », d'extension [.mart], est organisé en paragraphes, chacun étant relatif à des fonctionnalités différentes. On décrit ici uniquement les paragraphes en relation avec le transfert de masse :

- Unités des données
- Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs
- Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité
- Concentration et Trajectoires

### 6.1 Unités des données

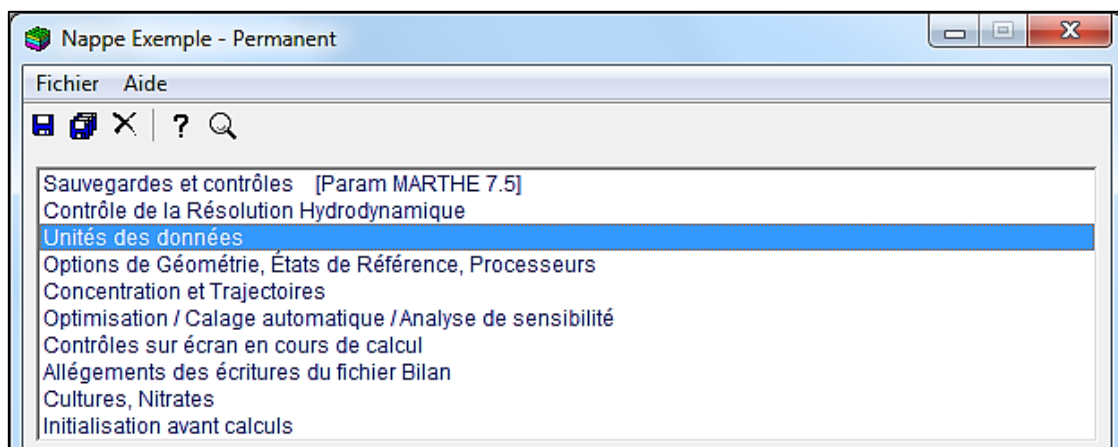


Figure 18 – Paramètres généraux : Paragraphe « Unités des données ».

```

*** Unités des données                                     ***
Ann = Unité de Temps (des Pas de modèle) (sec, min, heu, jou, déca, moi, ann)
0 = Unité de Salinité en kg/m3
0 = Unité de Concentration en kg/m3
% = Unité de Porosité = Teneur en eau en [-] [%' si en %]
0 = Unité de Volume d'eau (ou de stock) en m3
1000 = Unité de Masse en kg
      = Type de Débit Massique et de Chaleur lu : [Déf=par maille ; 'm2'=par m2]
    
```

On décrit ci-dessous uniquement les paramètres de ce paragraphe qui sont nécessaires au transport de masse.

### 6.1.1 Unité de concentration en kg/m<sup>3</sup>

C'est le facteur par lequel il faut multiplier la concentration pour obtenir des kg/m<sup>3</sup>.  
Rappel : 1 g/L = 1 kg/m<sup>3</sup>.

On peut également utiliser les unités abrégées : « kg/m<sup>3</sup> », « g/l », « mg/L », « mug/L », « mug/m<sup>3</sup> », « ppm », « ppb ». Dans les abréviations « mu » signifie « μ » donc « mug/m<sup>3</sup> » correspond à μg/m<sup>3</sup>. Si la masse est donnée en moles, on peut également utiliser les unités abrégées « mol/l » ou « mmol/l ».

### 6.1.2 Unité de porosité et de teneur en eau

C'est le facteur par lequel il faut multiplier la teneur en eau (libre et fixe), la porosité et le coefficient RhoKD volumique pour obtenir des données en m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>. Par exemple, s'ils sont donnés en %, On utilisera le caractère « % », ou bien le facteur numérique 0.01.

**Attention** : Bien noter que le RhoKD, lui aussi, est donné en unité de porosité. Par exemple si l'unité est le %, le RhoKD devra être donné en %, la valeur adimensionnelle devra donc être multipliée par 100.

### 6.1.3 Unité de masse

C'est le facteur qui permet de transformer en kg la masse indiquée par l'utilisateur (par exemple 0.001, ou « g » si la masse est en gramme). Ce facteur est affecté aux données suivantes :

- la masse d'une particule (paragraphe « concentration et trajectoires ») ;
- la masse injectée (Diracs) ;
- le flux massique injecté qui est en unité de masse par unité de temps.

Le cumul de masse calculé est également exprimé dans cette unité.

Unités abrégées : « kg », « g », « mg », « mug » (pour μg), « t » (pour « tonne »).

### 6.1.4 Type de Débit Massique et de Chaleur en entrée

Type de débit Massique et de Chaleur (et de Dirac) donnés en entrée :

- 0 = Les débits massiques (et les Diracs) sont donnés par maille et par tronçon de Rivière ou de Drain. C'est la méthode par défaut.
- « m2 » ou « -1 » = Les débits massiques et de Chaleur (et les Diracs) sont donnés :
  - Par m<sup>2</sup> de surface (perpendiculaire à la pesanteur).
  - Et par mètre de longueur de Rivière ou de Drain.

## 6.2 Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs

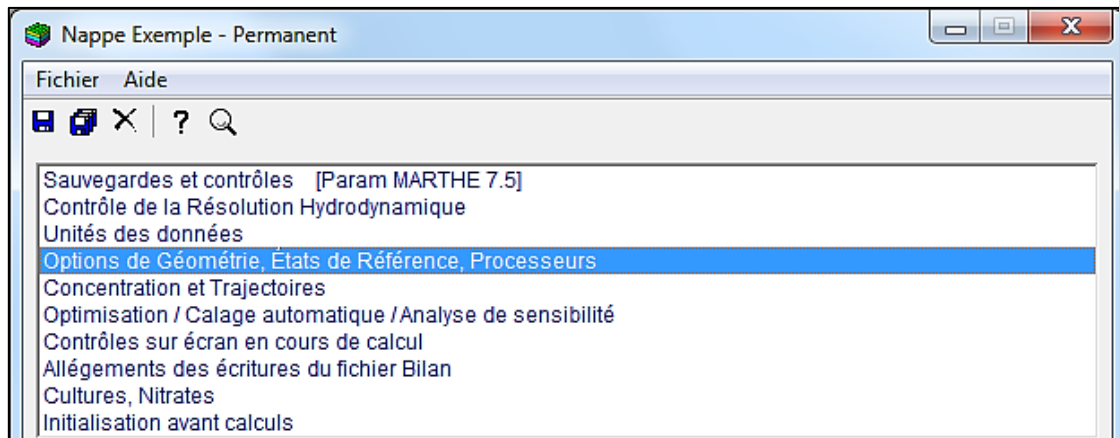


Figure 19 – Fichier des paramètres généraux : Paragraphe « Options de Géométrie, etc. ».

```

*** Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs ***
40 = Épaisseur de la tranche de coupe (Unité de Coordonnée de mailles ou degré)
0 = État initial lu
    [0=Charge ; 1=Press. ; 2=Satur ; 3=NAQ ; 4=S_Liq ; 5=S_NAQ] (Déf=Charge)
Vertic = Orientation du maillage : 0=Standard ; 1=Coupe Verticale : pesanteur sur Oy
0 = Angle correcteur de la Direction de la Pesanteur (degrés)
0 = Effet de l'angle correcteur : 0=Orthonormé ; 1=Escalier (Perspect. Cavalière)
0 = Initialisation des Nombres Aléatoires (pour les particules) [Déf=1789]
0 = Calcul à symétrie Cylindrique (Radial) [0=Non ; 1=Oui]
  
```

Dans ce paragraphe également, on décrit uniquement les paramètres pouvant concerner le transport de masse.

### 6.2.1 Orientation du maillage

Par défaut, la pesanteur est sur la verticale (sur l'axe des Z). Pour faire une modélisation en coupe, il est cependant possible d'imposer la pesanteur sur l'axe des Y vers le bas (Y négatifs). La conséquence d'imposer la pesanteur sur l'axe des Y est que l'altitude est alors l'ordonnée Y. La superficie sur laquelle s'applique : le flux de recharge, le flux massique surfacique et le flux de chaleur surfacique injectés, est toujours la surface perpendiculaire à la pesanteur.

La superficie prise en compte est donc :

- $dX.dY$  : si la pesanteur est sur Z
- $dX.dZ$  : si la pesanteur est sur Y

$dX$ ,  $dY$ ,  $dZ$  étant les dimensions de la maille dans les directions X, Y et Z.

La valeur de ce paramètre « Orientation du maillage » est :

- 0 : Maillage standard : pesanteur sur l'axe des Z vers le bas.
- « Vertic » ou 1 : Pesanteur sur l'axe des Y vers le bas ( $Y < 0$ ) => Coupe verticale.

### 6.2.2 Initialisation des nombres aléatoires

C'est la « semence » à partir de laquelle sont calculés les nombres aléatoires utilisés pour le transport par les méthodes à particules : Méthode des Caractéristiques (MOC) ou méthode Random Walk (RW). Par défaut (si on laisse ce paramètre à zéro), c'est la valeur 1789 qui est utilisée comme semence. Si on veut voir l'influence des aléas sur les résultats on peut utiliser une autre semence : de préférence un nombre assez grand et premier si possible. Dans tous les cas, si on conserve la même semence des nombres aléatoires, on est assuré que deux simulations successives, avec les mêmes paramètres, donneront les mêmes résultats.

### 6.3 Couplage et transport

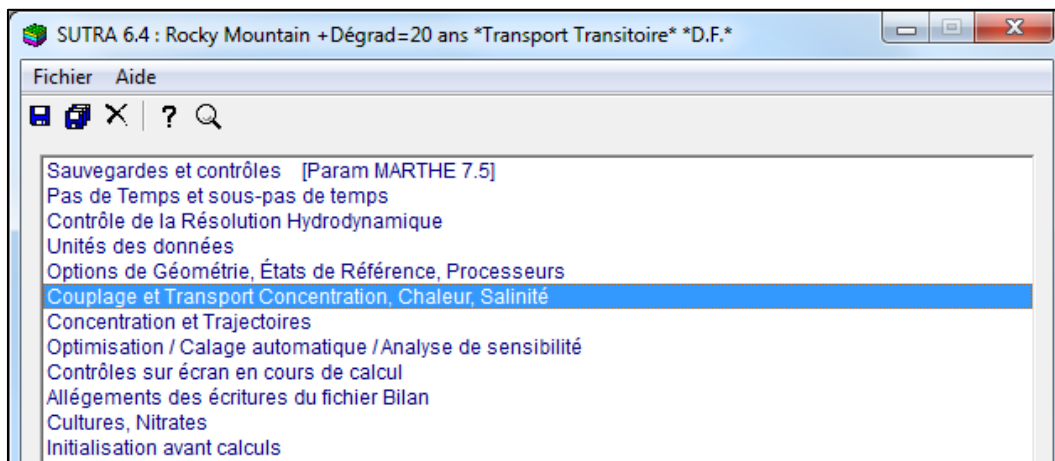


Figure 20 – Fichier des paramètres généraux : Paragraphe « Couplage et transport ».

```

*** Couplage et Transport : Concentration, Chaleur, Salinité ***
  0 = Nombre maximal d'Itérations pour le *Couplage* Densité/Pression ou Viscosité
  0 = Coefficient de Relaxation pour Couplage Densité/Pression ou Viscosité [Déf=1]
  0 = Nombre maximal d'Itérations *Transport* Salinité/Chaleur/Concentration
    [Déf=20]
  TVD = Méthode de Transport [0=Diff_Finies ; 1=Random_Walk ; 2=MOC ; 3=TVD]
1e-9 = Diffusion moléculaire (m2/s) [* = Spatialisée]
  10 = Dispersivité Longitudinale (m) [* = Spatialisée]
   2 = Dispersivité Transversale (m) [* = Spatialisée]
   0 = Transport Permanent préliminaire avant régime transitoire [Déf=0 => Non]
   0 = Sauvegarde des positions des particules en fin de calcul (-1=Binaire)
   0 = Lecture d'un fichier de Position Initiales des Particules
   0 = Nombre de sous-pas de temps pour les Particules R.W. [Déf=0 => Aucun]
   0 = Méthode de réflexion des particules R.W. (0=Schéma standard ; 1=Schéma Ito)
   0 = Écriture (fichier 'bilandeb.txt')des Bilans Massiques Cumulés (0=Oui ; -1=Non)
   0 = Solveur pour les calculs de Transport [0=Orthomin ; 2=Autre]
   0 = Omission des Termes Diagonaux en Diff. Finies (0=Calcul Complet ; 1=Omission)
   0 = Concentration/Température Non limitées par les mini/maxi
    [Déf=0 => Limitées ; 1=Non Limitées]
   0 = Nombre maximal d'itérations pour une sorption de schéma Langmuir/Freundlich
    [Déf=0 => 20]
   0 = Coefficient de Relaxation pour un calcul avec sorption Langmuir/Freundlich
    [Déf=0 => Pas de sous-relaxation]
   0 = Méthode TVD complète [0=Allégé = standard (rapide) ; 1=Méthode complète]
   0 = Rapport Dispersivité Transversale Verticale / Dispersiv. Transv. Horizontale

```

### 6.3.1 Nombre maximal d'itérations pour le couplage

Valeur par défaut : 0 => Pas de couplage.

Ce paramètre est utilisé uniquement en cas de couplage avec prise en compte de la variation de la densité de l'eau, en fonction de la température et/ou de la salinité, ou de sa viscosité, en fonction de la température.

### 6.3.2 Coefficient de sous-relaxation pour le couplage

Valeur par défaut : 0 => Pas de sous-relaxation pour le couplage.

Ce paramètre est lui aussi utilisé uniquement en cas de couplage. Si le couplage présente des oscillations : fixer ce coefficient de (sous) relaxation à une valeur inférieure à 1 permettra une convergence plus régulière.

### 6.3.3 Nombre maximal d'itérations pour le transport

C'est le nombre maximal d'itérations utilisé pour les calculs de transport quand le transport est calculé :

- par la méthode TVD ;
- ou par la méthode DF (Différences Finies) ;
- ou par la méthode MOC (Méthodes des caractéristiques).

Pour choisir ce nombre maximal d'itérations, on peut se baser *a priori* sur la règle suivante :

- Régime permanent  
Résolution matricielle (méthode Orthomin) : 10 à 50 itérations.

- Régime transitoire  
Le nombre d'itérations peut être plus petit. Il peut être d'autant plus petit que les pas de temps de calcul sont petits.

### 6.3.4 Méthode de résolution des calculs de transport

- « DF » ou « 0 » = Transport par la méthode des différences finies DF.
  - « RW » ou « 1 » = Transport par la méthode des particules Random Walk RW.
  - « MOC » ou « 2 » = Transport par la méthode des caractéristiques MOC.
  - « TVD » ou « 3 » = Transport par la méthode TVD (à limiteur de flux).
- La méthode la plus précise est la méthode TVD, ou bien la méthode des caractéristiques MOC.
  - La méthode la plus rapide est la méthode DF, qui a cependant l'inconvénient, si la dispersion réelle est faible, d'introduire de la dispersion numérique.

#### Restrictions :

- Seule la méthode DF est bien adaptée à un calcul de transport directement en régime permanent.
- La méthode TVD n'est pas opérationnelle avec les maillages gigognes.

### 6.3.5 Diffusion moléculaire

C'est le coefficient de diffusion uniforme  $D_o$ , utilisé dans le calcul de la dispersion mécanique. S'il s'agit réellement de diffusion moléculaire,  $D_o$  est de l'ordre de  $10^{-9}$  m<sup>2</sup>/s pour une solution saline.

Il est cependant possible de considérer que  $D_o$  représente un coefficient de dispersion macroscopique uniforme (par exemple  $D_o = 10^{-6}$  ou  $10^{-5}$  m<sup>2</sup>/s). Ce coefficient est exprimé en m<sup>2</sup>/s.

### 6.3.6 Dispersivité longitudinale

C'est le coefficient, généralement noté  $\alpha_L$ , qui permet de calculer la dispersion mécanique  $D_L$  (appelée aussi « dispersion cinématique »).

$$D_L = D_o + \alpha_L \cdot u \quad (\text{dans la direction de la vitesse}).$$

Avec :

$u$  = vitesse réelle (ou « vitesse de filtration » ou encore « vitesse de pore »).

En l'absence de données de terrain, pour modéliser un transport sur une distance  $L$ , on peut prendre en première approximation :  $\alpha_L \approx L / 10$ .

(Par exemple :  $\alpha_L = 10$  cm pour une colonne de 1 m, ou bien  $\alpha_L = 100$  m pour une pollution sur 1 km d'extension).

La dispersivité longitudinale est donnée en mètres, indépendamment de l'unité utilisateur de coordonnées des mailles.

### 6.3.7 Dispersivité transversale

C'est le coefficient, noté  $\alpha_T$ , qui permet de calculer la dispersion mécanique  $D_T$ , dans la direction perpendiculaire à la vitesse.



En l'absence de données de terrain, on admet l'ordre de grandeur suivant :

$$\alpha_T \approx [0.05 \alpha_L \text{ à } 0.2 \alpha_L]$$

La dispersivité transversale est également donnée en mètres (elle n'est pas utilisée dans le cas d'un écoulement en 1D).

Dans une modélisation en 3D, il est possible d'utiliser différente, dans la direction verticale, une [dispersivité transversale verticale](#) différente.

### 6.3.8 Transport permanent préliminaire avant transitoire

Valeur par défaut : 0 => Pas de transport permanent préliminaire.

Exceptionnellement, quand le transport est en régime transitoire, il peut être intéressant de faire un calcul de transport en régime permanent avant de débiter le régime transitoire. On peut ainsi obtenir un état initial en équilibre (avant d'introduire des modifications). Dans le cas, assez exceptionnel, où l'on veut utiliser cette option, il faut donner la valeur 1 à ce paramètre.

### 6.3.9 Sauvegarde des positions des particules en fin de calcul

Cette option est possible uniquement si on utilise une méthode de transport à particules (méthode MOC ou RW). Si, dans le paragraphe « sauvegardes et contrôles » du fichier des paramètres, on a choisi l'option : « sauvegarde de l'état de fin de calcul », il est possible de conserver également la position des particules en fin de calcul. Ce choix est fait par cet index :

- 0 = Pas de sauvegarde des particules
- 1 = Sauvegarde en format texte des positions des particules
- -1 = Sauvegarde en binaire.

Soit « nom\_fin » le nom générique pour les données de l'état de fin de calcul. Les particules seront sauvegardées dans les fichiers :

- nom\_fin.partc : pour les particules de masse de concentration.
- nom\_fin.parts : pour les particules de masse de salinité.
- nom\_fin.partt : pour les particules de chaleur.

Indépendamment de la sauvegarde dans l'état de fin de calcul, il est possible également de sauvegarder, à chaque pas de temps, la position des particules. Les coordonnées seront alors sauvegardées dans le fichier de nom « partic.out ». (Les positions des trois types de particules seront écrites à la suite les unes des autres dans ce même fichier).

Si on a sauvegardé la position des particules (en fichier texte, ASCII, ou en binaire), il est possible de reprendre les résultats d'un calcul pour le poursuivre comme si on ne s'était pas arrêté. Si la position des particules est sauvegardée en clair, en format « texte », le fichier peut être utilisé également pour représenter graphiquement le nuage de particules. Si les calculs sont en 2D, les particules peuvent être directement visualisées par le logiciel « Shalimar » du BRGM ou bien par tout autre logiciel de dessin classique.

(Il n'y a pas de particules si les calculs de transport se font par la méthode TVD ou DF).

### 6.3.10 Lecture d'un fichier de particules initiales

C'est l'opération inverse de la précédente : si on avait sauvegardé les positions des particules (MOC ou RW) en fin de calcul, il est possible de relire les particules pour enchaîner un nouveau calcul sans aucune perte de précision. Le code de calcul MARTHE détecte automatiquement si le fichier est un fichier « texte » ou bien un fichier binaire.

### 6.3.11 Nombre de sous-pas pour les particules ou les trajectoires

Valeur par défaut : 0 => Pas de sous-pas pour les particules.

Dans le cas d'un calcul par particules RW, les calculs seront plus précis, surtout en cas de milieu hétérogène ou à proximité de singularités, si les pas de temps de déplacement sont plus petits. Dans le cas de trajectoires, on obtiendra des points intermédiaires, mais les points d'intersection avec les limites des mailles seront identiques. Dans le cas d'un calcul la méthode MOC, les résultats sont très peu modifiés puisque, pour chaque pas de temps de calcul, la dispersion n'est effectuée qu'après le déplacement des particules, pendant tous les « sous-pas de temps de particules ».

Dans tous les cas, on choisit un nombre de « sous-pas de temps de particules ou de trajectoires » en donnant la valeur :

- 0 = Il n'y aura pas de sous-pas de temps.
- n = n sous-pas pour le déplacement des particules ou le dessin des trajectoires.

Il convient de remarquer que l'utilisation de sous-pas de temps associée à des particules peut allonger le temps d'exécution des calculs.

### 6.3.12 Méthode de réflexion des particules

Valeur par défaut : 0 => Schéma standard.

En cas de calcul par la méthode Random Walk (RW) dans un milieu très hétérogène, cette option peut permettre - dans certains cas - une réduction des problèmes d'accumulation de particules dans des zones peu dispersives. On choisit cette option de la manière suivante :

- 0 = Schéma standard (*Conseillé*).
- 1 = Schéma avec correction par prise en compte des termes de « Ito » (*déconseillé*).

Il convient de remarquer que cette option, qui prend en compte le gradient de concentration, peut allonger significativement les calculs et que la correction n'est pas souvent efficace, surtout si les pas de temps de calcul sont grands. Il est alors conseillé d'utiliser la méthode MOC (ou TVD).

### 6.3.13 Écriture dans le fichier « bilandeb.txt » des bilans cumulés de masse ou de chaleur

Valeur par défaut : 0 => Affichage.

Cette option, conseillée, permet d'évaluer le cumul des différents termes du bilan de masse et/ou de chaleur :

- 0 ou 1 = Affichage (au prix d'un léger ralentissement des calculs).
- -1 = Pas d'affichage.

Les différents termes du bilan sont affichés en unité de masse (choisie par l'utilisateur) pour les calculs de concentration, et en Joules pour les calculs de transfert thermique.

Les termes du bilan massique ou thermique sont les suivants :

Masse ou Chaleur :

- |   |
|---|
| <ul style="list-style-type: none"> <li>• Entrant par les limites du domaine</li> <li>• Sortant par les limites du domaine</li> <li>• Entrant dans les mailles à concentration imposée</li> <li>• Sortant par les mailles à concentration imposée</li> <li>• Sortant par les mailles à débordement (ou suintement)</li> <li>• Entrant par infiltration et irrigation</li> <li>• Entrant dans les mailles internes (injection de masse)</li> <li>• Sortant dans les mailles internes (prélèvement de masse)</li> <li>• Disparaissant par dégradation (ou précipitation ou fixation irréversible)</li> <li>• Stockée dans le domaine.</li> </ul> |
|---|

MARTHE affiche également l'écart du bilan cumulé.

Dans le cas de transfert thermique, les mailles à concentration imposée sont remplacées par les mailles à température imposée et la masse est remplacée par la chaleur (en Joule).

### 6.3.14 Résolution matricielle des calculs de transport

Valeur par défaut : 0 => Résolution par la méthode Orthomin.

Deux méthodes de résolution des calculs de transport sont possibles avec les méthodes utilisant des différences finies (méthodes TVD, DF ou MOC) :

- 1 = Résolution directe par gradients conjugués par la méthode Orthomin.

Cette méthode Orthomin utilise une adaptation du module Orthofem qui nous a été transmis par Carl A. Mendoza, du Waterloo Center for Groundwater Research de l'Université de Waterloo (Canada).

C'est la méthode de calcul par défaut.

- 2 = Résolution itérative, maille par maille (*Obsolète*)

La méthode Orthomin est la plus rapide. Les deux méthodes de calcul sont itératives et font intervenir un [nombre maximal d'itérations](#) : le processus itératif s'arrête éventuellement avant ce nombre d'itérations maximal si la variation moyenne de concentration entre deux itérations successives est inférieure à un seuil défini par l'utilisateur dans le paragraphe « Concentration et trajectoires » (ou dans le paragraphe « Salinité, densité » ou « Température, effets thermiques » suivant le cas).

Remarque : Ce paramètre n'est pas utilisé lors d'un calcul avec la méthode RW (*méthode déconseillée*).

### 6.3.15 Omission des termes diagonaux en différences finies

Valeur par défaut : 0 => Pas d'omission.

Dans le cas de calculs de dispersion en différences finies (TVD, DF ou MOC) avec des vitesses quelconques par rapport au maillage, le calcul de la dispersion fait intervenir :

- 19 termes en 3D.
- 9 termes en 2D.

Si les vitesses sont parallèles à l'un des axes du maillage, le nombre de termes se réduit à :

- 4 termes en 3D (centre, ox, oy, oz).
- 3 termes en 2D (centre, ox, oy).

Dans ce cas particulier, il est possible de faire un calcul plus rapide et nécessitant moins de mémoire. Dans le cas d'un écoulement avec une vitesse sensiblement parallèle à un axe du maillage, on obtiendra rapidement une solution approchée qui sera peu éloignée de la solution exacte.

Pour faire un calcul omettant les termes diagonaux (parfaitement exact si les vitesses sont parallèles à l'une des directions du maillage), il suffit de donner la valeur « 1 » à ce paramètre.

### 6.3.16 Concentration et Température non limitées par les minimum/maximum

Valeur par défaut : 0 => Limitées.

- 0 = Concentration et Température limitées (conseillé).
- 1 = Concentration et Température non limitées.

Par défaut la Concentration et la Température sont limitées par les minimum/maximum dans les mailles à concentration ou température imposée, et/ou par les minimum/maximum en début de pas de temps.

Dans les calculs avec dispersivités, cette limitation - qui permet des résultats conservatifs - peut introduire un léger biais dans le bilan.

- ⇒ Exceptionnellement, si on donne la valeur « 1 » à ce paramètre, il n'y aura pas de limitation.

### 6.3.17 Nombre maximal d'itérations pour une sorption de schéma Langmuir ou Freundlich

Valeur par défaut : 0 => 20 itérations.

Ce paramètre est utilisé uniquement avec des interactions de schéma Langmuir ou Freundlich. Ces lois d'interactions sont des fonctions non linéaires de la concentration. Le calcul est donc itératif.

Ce paramètre n'est pas utilisé avec des interactions linéaires (coefficient de partage Kd).

Ces choix d'interaction peuvent être sélectionnés dans le paragraphe « Concentration et trajectoires ».

### 6.3.18 Coefficient de sous-relaxation pour un calcul avec sorption de Langmuir ou Freundlich

Valeur par défaut : 0 => Pas de sous-relaxation.

Ce paramètre est utilisé uniquement avec des interactions de schéma Langmuir ou Freundlich. Ce paramètre peut contribuer à limiter des éventuelles oscillations lors du calcul itératif des interactions.

Ce paramètre n'est pas utilisé avec des interactions linéaires (coefficient de partage Kd).

### 6.3.19 Méthode TVD complète

Valeur par défaut : 0 => Schéma standard (allégé).

Ce paramètre est utilisable uniquement si on utilise la méthode TVD en 2D ou 3D.

- 0=Calcul allégé, plus rapide. C'est la méthode standard.
- 1=Calcul complet prenant en compte les gradients dans toutes les directions.

La dispersion numérique peut alors parfois être encore diminuée au prix de temps de calculs un peu plus long et de besoins en mémoire accrus.

Ce paramètre n'a aucun effet pour les domaines 1D.

### 6.3.20 Rapport : Dispersivité Transversale Verticale / Dispersivité Transversale Horizontale.

Valeur par défaut : 0 => 1 => Pas de diminution de la dispersivité transversale verticale.

Dans les milieux naturels, la dispersivité transversale Verticale est souvent nettement inférieure à la dispersivité transversale Horizontale.

Ce paramètre est le rapport R :

$$R = \frac{\text{Dispersivité Transversale Verticale}}{\text{Dispersivité Transversale Horizontale}}$$

Ce rapport R a souvent une valeur de l'ordre de 0.1.

On a donc : Dispersivité Transversale Verticale = R · Dispersivité Transversale Horizontale

Remarque : Ce paramètre est utilisé uniquement en 3D ou multicouche. En particulier il n'est pas utilisé en coupe verticale, puisqu'il n'y a pas de dispersivité transversale horizontale.

## 6.4 Concentration et Trajectoires

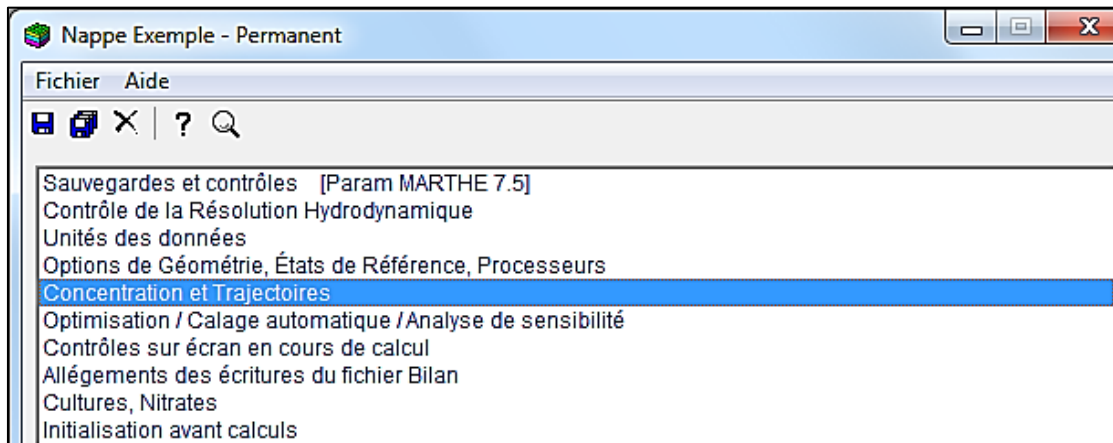


Figure 21 – Fichier des paramètres généraux : Paragraphe « Concentration et trajectoires »

```

*** Concentration et Trajectoires ***
1 = Calcul de la Concentration
250 = Masse de chaque particule de Concentration (si particules)
1e-5 = Variation moyenne de concentration entre 2 itérations pour convergence
Transit = Régime du Transport de concentration [0=Transitoire ; 1=Permanent]
0 = Concentration correspondant à 0 particule [si particules] [Déf=0]
Invers = Calcul de Trajectoires (1 = Oui ;
          'Invers' = -1 = Trajectoires inverses)
80000 = Nombre maximum possible de particules de concentration
        (méthode MOC ou R.W.) [Déf=60000]
0 = Durée <==> Permanent si transport MOC ou R.W. en Permanent [Déf=0]
0 = Coefficient de Retard (sauf si calcul en ZNS) [Déf=1]
20 = Temps de 1/2 Dégradation de la concentration (en unité temps) [Déf=0]
0 = Nombre de points intermédiaires pour le dessin des Trajectoires [Déf=1]
    = Type de Sorption [0=Non = Linéaire ; 1=Langmuir ; 2=Freundlich]
0 = Paramètre de Sorption n°1 [Concent_Refer_Langmuir ; Kfv_Freundlich]
0 = Paramètre de Sorption n°2 [Site_Total_Langmuir ; Expos_Freundlich]
0 = Dégradation=f(Température) [0=Non 1=Leachp 2=Agriflux 3=Macro 4=Wave ..]
0 = Paramètre pour la Dégradation = F(Température)
0 = Dégradation = F(Saturation) [0=Non ; 1=Leachp ; 2=Agriflux ;
    3=Macro ; 4=Wave ..]
0 = Paramètre n°1 Dégradation = F(Saturation)
0 = Paramètre n°2 Dégradation = F(Saturation)
0 = Paramètre n°3 Dégradation = F(Saturation)
0 = Nombre d'éléments de Filiation en chaîne de la Dégradation [déf=0]
    = Schéma de Dégradation / Filiation [0=Série (Chaîne) ; 1=Parallèle]
0 = Calculs avec Cinétique d'échange entre Concentration_Mobile
    et Concentration_Immobile
0 = Numéro du pas de temps (réel) pour le démarrage des trajectoires
    [Défaut=0]
    
```

### 6.4.1 Calcul de concentration

On précise ici si on désire faire un calcul de concentration :

- 0 = Pas de calcul de concentration
- 1 = Calcul de concentration

### 6.4.2 Masse d'une particule de concentration

Pour les méthodes de transport à particules (MOC ou RW), on donne ici la masse d'une particule (toutes les particules auront la même masse). Cette masse est donnée en unité de masse.

Lors de l'initialisation : dans chaque maille, le nombre initial de particules sera donc obtenu en divisant la masse en solution dans la maille par la masse d'une particule.

### 6.4.3 Variation moyenne de concentration entre 2 itérations pour convergence

Valeur par défaut : 0 =>  $10^{-8}$ .

C'est le critère de convergence pour les calculs de concentration par méthode itérative (TVD, DF ou MOC). Quand la variation moyenne de concentration (en valeur absolue) entre deux itérations successives est inférieure à ce seuil, la convergence est jugée acceptable et le calcul de transport se termine même si le nombre maximal d'itérations n'est pas atteint. Cette variation moyenne est exprimée en unité de concentration. Un ordre de grandeur est d'environ  $10^{-5}$  fois la concentration moyenne du champ étudié.

Remarque : Ce paramètre n'est pas utilisé lors des calculs avec la méthode RW (*méthode déconseillée*).

### 6.4.4 Régime de transport de la concentration : transitoire ou permanent

Le calcul de transport ou de trajectoires peut être réalisé en régime permanent (pollutions chroniques, concentration imposée sur une limite) ou en régime transitoire (c'est le cas général). On choisit le régime par ce paramètre :

- « Transit » ou « 0 » = Régime transitoire pour le transport de masse
- « Perman » ou « 1 » = Régime permanent pour le transport de masse.

### 6.4.5 Concentration correspondant à zéro particule

Avec les méthodes de transport à particules (MOC ou RW) il est possible de définir un seuil de concentration correspondant à zéro particule. Par exemple, si la concentration est toujours comprise entre 45 et 55 (mg/l) on pourra définir un seuil de 40 (mg/l). MARTHE générera alors des particules uniquement pour la différence de concentration par rapport à 40, d'où une forte diminution du nombre de particules permettant des calculs plus rapides ou plus précis.

### 6.4.6 Calcul de trajectoires

Il est possible de demander un calcul de trajectoires, que l'on ait choisi ou non de [calculer des concentrations](#).

La demande se fait par ce paramètre :

- 0 = Pas de calcul de trajectoires.
- 1 = Calcul de trajectoires directes.
- « Invers » ou « -1 » = Calcul de trajectoires inverses.

Un calcul de trajectoires inverses, est un calcul dans lequel les trajectoires aboutissent aux points de « départ ». Lors d'un tel calcul, les vitesses sont obtenues par remplacement automatique par MARTHE des pompages par des injections, et réciproquement.

Si on demande un calcul de trajectoires (directes ou inverses), il faut alors préciser leurs points de départ dans un fichier dont le nom a pour extension [.deptr].

#### 6.4.7 Nombre maximal de particules

Dans le cas d'un transport faisant intervenir des particules (MOC ou RW), on donne ici le nombre maximal de particules qui pourront être utilisées au cours des calculs. C'est le quota maximal de particules alloué pour la concentration (un autre quota peut être alloué pour le transport de la salinité ou de la température). Par défaut, si on laisse ce paramètre à zéro, le calcul dispose de 60 000 particules. Suivant la mémoire de l'ordinateur et la complexité du problème traité, il peut être nécessaire d'utiliser plusieurs centaines de milliers de particules.

#### 6.4.8 Durée équivalente au permanent si transport permanent

Ce paramètre s'applique uniquement si on calcule en régime permanent :

- Des trajectoires ;
- Ou la concentration par une méthode faisant intervenir des particules (MOC ou RW).

On donne alors ici une durée, en unité utilisateur de temps, suffisamment longue pour que le champ de concentration se stabilise. Par défaut, cette durée est de  $10^{12}$  unités de temps pour des trajectoires en régime permanent.

Ce paramètre ne s'applique pas : si le transport est en régime transitoire, ou bien s'il est réalisé avec la méthode TVD ou la méthode DF.

Remarque : Les méthodes de transport à particules ne sont pas très adaptées aux calculs en régime permanent.

#### 6.4.9 Coefficient de retard

On donne ici un coefficient de retard qui s'applique au transport de la concentration (par opposition à la salinité ou à la température). Ce coefficient de retard n'est pas pris en compte dans le cas d'un calcul en Zone Non Saturée (ZNS), car il n'a pas de sens quand la teneur en eau est variable au cours du temps. En ZNS, mais aussi dans le cas d'une nappe libre, il faut utiliser un terme RHO\_KD qui est un  $k_d$  volumique exprimé en teneur en eau (ou porosité) correspondant à un coefficient de retard variable : voir « [Coefficient de partage volumique](#) » et « [Équation du transport de masse](#) ».

On peut donner une valeur négative au coefficient de retard. MARTHE fait alors une « convection inverse ». Pour obtenir les vitesses et les apports de masse, MARTHE remplace automatiquement les pompages par des injections, et réciproquement.

La valeur absolue du coefficient de retard indique son amplitude. S'il est affecté d'un signe négatif, il y aura une convection inverse. Par défaut, le coefficient de retard est égal à 1.

Par exemple, une valeur de -1 indique un déplacement inverse, sans retard ; une valeur de -3 indique un déplacement inverse avec un coefficient de retard égal à 3.



### 6.4.10 Temps de ½ dégradation

On peut considérer que la masse (dont résulte la concentration) se dégrade exponentiellement avec un temps de ½ dégradation  $t_d$ . Au bout de ce temps  $t_d$ , la moitié de la masse est dégradée (ou précipitée ou fixée irréversiblement). La masse dégradée (libre ou fixe) disparaît du domaine. Par exemple le temps de ½ dégradation du tritium (c'est-à-dire la « période » du tritium) est de 12.3 ans. Par défaut, ce paramètre est égal à zéro. Le temps de ½ dégradation est exprimé en unité utilisateur de temps.

### 6.4.11 Autres paramètres

Les autres paramètres correspondant à une utilisation avancée seront décrits dans un rapport futur. On trouve cependant leur description dans le fichier « Help » accompagnant MARTHE.

## 6.5 Réseau Hydrographique, Drains, Lacs

S'il y a un réseau hydrographique (réseau de rivières) et/ou un réseau de « Drains-conduits », il est nécessaire de définir 2 paramètres supplémentaires.

\*\*\* Réseau Hydrographique, Drains, Lacs \*\*\*  
 1e-3 = Coefficient de Diffusion pour le transport en Rivières (m<sup>2</sup>/s)  
 3e-2 = Coefficient de Diffusion pour le transport dans les Drains-Conduits (m<sup>2</sup>/s)

### 6.5.1 Coefficient de Diffusion pour le transport en Rivières

C'est le coefficient de diffusion pour le transport de masse en rivière. C'est un coefficient de diffusion macroscopique qui intègre de la dispersion mécanique. Ce n'est pas uniquement un coefficient de diffusion moléculaire.

Il est exprimé en m<sup>2</sup>/s. Il n'y a pas de valeur par défaut.

### 6.5.2 Coefficient de Diffusion pour le transport dans les Drains-Conduits


C'est le coefficient de diffusion pour le transport de masse dans l'éventuel réseau de « Drains-conduits ». C'est un coefficient de diffusion macroscopique qui intègre de la dispersion mécanique. Ce n'est pas uniquement un coefficient de diffusion moléculaire.

Il est exprimé en m<sup>2</sup>/s. Il n'y a pas de valeur par défaut.

## 6.6 Mailles à historiques

Il est possible de sauvegarder l'évolution temporelle de certains champs dans des mailles particulières.

Dans cette version le nombre total d'historiques possible est limité à 4000.

La sélection des mailles et des champs est réalisée par le module de « Gestion des données non maillées », accessible par le bouton  de la barre d'outils du bas du cadre de WinMarthe. On choisit alors la ligne « Mailles à Historiques ». (Figure 22).

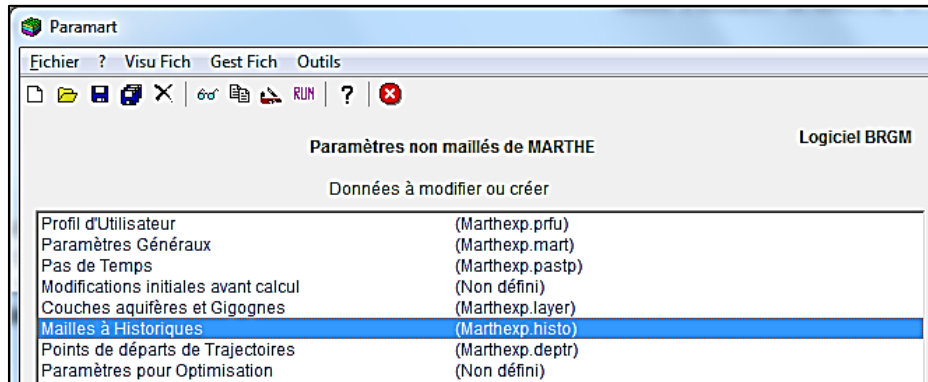


Figure 22 – Sélection du fichier des mailles à historiques.

Les champs et les mailles choisies sont écrits automatiquement dans le fichier de « mailles à historiques », d'extension de fichier [.histo] dont un exemple est présenté ci-dessous.

```

Simulation : Injection in Infinite Medium
/Concentr /HISTO/ = /MAIL:C= 19L= 1P= 10;
/Concent_Sort /HISTO/ = /MAIL:C= 19L= 1P= 10;
/Concen_Rivi /HISTO/ = /MAIL:C= 19L= 1P= 10;
/Concen_Drain /HISTO/ = /MAIL:C= 19L= 1P= 10;
/Concen_Immob /HISTO/ = /MAIL:C= 19L= 1P= 10;
/Q_Mass_Concen/HISTO/ = /MAIL:C= 19L= 1P= 10;
/Q_Mass_Drain /HISTO/ = /MAIL:C= 19L= 1P= 10;
/Qmas_Napp_Dra/HISTO/ = /MAIL:C= 19L= 1P= 10;
/Q_Mass_River /HISTO/ = /MAIL:C= 19L= 1P= 10;
/Qmas_Napp_Riv/HISTO/ = /MAIL:C= 19L= 1P= 10;
*** Fin du fichier Mailles à Historique ***
    
```

On peut sauvegarder des historiques de :

- Concentration calculée : Champ : Concentr
- Concentration du débit sortant : Champ : Concent\_Sort
- Concentration dans un tronçon de rivière : Champ : Concen\_Rivi
- Concentration dans un tronçon de drain : Champ : Concen\_Drain
- Concentration immobile : Champ : Concen\_Immob
- Flux massique (lié à la concentration) : Champ : Q\_Mass\_Concen
- Flux massique dans un tronçon de drain : Champ : Q\_Mass\_Drain
- Flux massique Nappe => Drain : Champ : Qmas\_Napp\_Dra
- Flux massique dans un tronçon de rivière : Champ : Q\_Mass\_River
- Flux massique Nappe => Drain : Champ : Qmas\_Napp\_Riv

## 7 Exemples de fichiers de « Paramètres Généraux » pour le transport de masse

À titre d'illustration, les Figure 23 à Figure 26 présentent les paragraphes « Couplage et Transport » et « Concentration et trajectoires » du fichier des « Paramètres Généraux » pour 4 exemples d'application :

- Trajectoires seules (Figure 23) ;
- Transport en régime permanent par la méthode DF + trajectoires (Figure 24) ;
- Transport en régime transitoire par la méthode TVD (Figure 25) ;
- Transport en régime transitoire par la méthode MOC (Figure 26).

```

Calcul avec uniquement trajectoires (sans transport)
*** Couplage et Transport : Concentration, Chaleur, Salinité ***
    << Rien de particulier à définir >>

*** Concentration et Trajectoires ***
    0 = Calcul de la Concentration
      [ . . . . . ]
    1 = Calcul de Trajectoires (1 = Oui ; 'Invers' = -1 = Trajectoires inverses)
      [ . . . . . ]
    0 = Numéro du pas de temps (réel) pour le démarrage des trajectoires [Défaut=0]

```

Figure 23 – Fichier des paramètres généraux : Trajectoires seules.

```

Transport Permanent par la méthode DF + Trajectoires
*** Couplage et Transport : Concentration, Chaleur, Salinité ***
    DF = Méthode de Transport [0=Diff_Finies ; 1=Random_Walk ; 2=MOC ; 3=TVD]
    1e-9 = Diffusion moléculaire (m2/s) [* = Spatialisée]
    500 = Dispersivité Longitudinale (m) [* = Spatialisée]
    100 = Dispersivité Transversale (m) [* = Spatialisée]

*** Concentration et Trajectoires ***
    1 = Calcul de la Concentration
    1e-5 = Variation moyenne de Concentration entre 2 itérations pour convergence
    Perman = Régime du Transport de Concentration [0=Transitoire ; 1=Permanent]
    1 = Calcul de Trajectoires (1 = Oui ; 'Invers' = -1 = Trajec. inverses)
    20 = Temps de 1/2 Dégradation de la concentration (en unité temps) [Déf=0]

```

Figure 24 – Fichier des paramètres généraux : Transport permanent par la méthode DF + trajectoires.

```

Transport Transitoire par la méthode TVD + Trajectoires
*** Couplage et Transport : Concentration, Chaleur, Salinité ***
  TVD = Méthode de Transport [0=Diff_Finies ; 1=Random_Walk ; 2=MOC ; 3=TVD]
  1e-9 = Diffusion moléculaire (m2/s) [* = Spatialisée]
  500 = Dispersivité Longitudinale (m) [* = Spatialisée]
  100 = Dispersivité Transversale (m) [* = Spatialisée]

*** Concentration et Trajectoires ***
  1 = Calcul de la Concentration
  1e-5 = Variation moyenne de Concentration entre 2 itérations pour convergence
  Transit = Régime du Transport de Concentration [0=Transitoire ; 1=Permanent]
  1 = Calcul de Trajectoires (1 = Oui ; 'Invers' = -1 = Trajec. inverses)
  20 = Temps de 1/2 Dégradation de la concentration (en unité temps) [Déf=0]
    
```

Figure 25 – Fichier des paramètres généraux : Transport transitoire par la méthode TVD.

```

Transport Transitoire par la méthode MOC + Trajectoires
*** Couplage et Transport : Concentration, Chaleur, Salinité ***
  MOC = Méthode de Transport [0=Diff_Finies ; 1=Random_Walk ; 2=MOC ; 3=TVD]
  1e-9 = Diffusion moléculaire (m2/s) [* = Spatialisée]
  500 = Dispersivité Longitudinale (m) [* = Spatialisée]
  100 = Dispersivité Transversale (m) [* = Spatialisée]

*** Concentration et Trajectoires ***
  1 = Calcul de la Concentration
  250 = Masse de chaque particule de Concentration (si particules)
  1e-5 = Variation moyenne de Concentration entre 2 itérations pour convergence
  Transit = Régime du Transport de Concentration [0=Transitoire ; 1=Permanent]
  1 = Calcul de Trajectoires (1 = Oui ; 'Invers' = -1 = Trajec. inverses)
  80000 = Nombre maximum possible de particules de concentration [Déf=60000]
  20 = Temps de 1/2 Dégradation de la concentration (en unité temps) [Déf=0]
    
```

Figure 26 – Fichier des paramètres généraux : Transport transitoire par la méthode MOC.

Des exemples d'applications de calcul de transport de masse sont décrits dans le chapitre des [applications de transfert masse](#).

## 8 Mise en œuvre rapide des calculs de transport de masse

### 8.1 Comment calculer des trajectoires ?

- 1) Dans le paragraphe « Concentration et trajectoires » du fichier des paramètres, sélectionner « [Calcul des trajectoires](#) ».
- 2) Créer un fichier « Départ de trajectoires » [.deptr] ; Donner son nom dans le « fichier projet » [.rma].
- 3) Donner un fichier « Porosité » (sauf si les calculs sont réalisés en ZNS car il y en a déjà un) ou bien donner une porosité uniforme (défaut = 100 %).
- 4) Durée totale des trajectoires :
  - Si l'hydrodynamique ou le transport est en régime transitoire, la durée des trajectoires sera la durée de la simulation ;
  - Si l'hydrodynamique et le transport sont tous les deux en permanent : durée par défaut =  $10^{12}$  unités de temps.

### 8.2 Comment faire un calcul de transport (Calcul de concentration) ?

#### 8.2.1 Paramètres à définir quel que soit la méthode de transport

##### a) Dans le paragraphe « Couplage et transport » du fichier des paramètres

- Choisir la [méthode de transport](#) (TVD, DF, Random Walk ou MOC) ;
- Donner les valeurs des paramètres de transport :
  - [Diffusion moléculaire](#),
  - [Dispersivité longitudinale](#) et transversale.

##### b) Dans le paragraphe « Concentration et trajectoires »

- Sélectionner : 1 = [Calcul de concentration](#) ;
- [Régime de transport de concentration](#) : Transitoire ou Permanent ;
- Donner les valeurs du [coefficient de retard](#) (éventuellement négatif) et du temps de  [\$\frac{1}{2}\$  dégradation](#).

#### 8.2.2 Paramètres à définir ensuite selon la méthode de transport choisie

##### a) Méthode de transport TVD, DF ou MOC : paragraphe « Couplage et transport »

- [Nombre maximal d'itérations pour la résolution](#) du transport ;
- [Variation moyenne de concentration entre deux itérations](#) pour convergence (défaut =  $10^{-8}$  unité de concentration).

**b) Méthode de transport à particules (méthode MOC ou RW) :**  
**Paragraphe « Concentration et trajectoires »**

- [Masse d'une particule](#) ;
- [Nombre maximal possible de particules](#).


### 8.2.3 Initialisation des champs

Il suffit alors d'initialiser la concentration dans certaines mailles (CONCENTR / MAILLE), de définir la concentration extérieure en certaines limites (CONCEN\_EXT / MAILLE) et d'imposer éventuellement des flux massiques (QMASS\_CONC) ou des injections instantanées (MASS\_CONCEN). Toutes ces valeurs peuvent être définies avant calcul ou bien au cours du calcul, à n'importe quel pas de temps de modèle.

### 8.2.4 Demande de sauvegardes

Pour sauvegarder les résultats désirés, il suffit de demander, aux pas de temps souhaités, la sauvegarde des « grilles MARTHE » de concentration (CONCENTR / EDITION), des positions des particules (PARTIC\_CONC / EDITION), ou bien des bilans massiques (QMASS\_CONC / EDITION).

Des historiques de concentration (Concentr) ou de concentration dans le débit sortant (Concent\_Sort) peuvent être sélectionnés.

Cette sélection s'effectue dans le fichier des « mailles à historiques », d'extension [.histo]. La sélection des mailles et des champs est réalisée par le module de « Gestion des données non maillées », accessible par le bouton  de la barre d'outils du bas du cadre de WinMarthe. On choisit alors la ligne « Mailles à Historiques ».

Les historiques calculés des mailles sélectionnées sont sauvegardés dans les fichiers « historiq.prn » et « historiq.out » habituels.

## 9 Dispersion numérique liée aux méthodes de calcul du transport

### 9.1 Le phénomène de dispersion numérique

La dispersion numérique est due à la discrétisation spatiale (dimension  $dx$  des mailles) et à la discrétisation temporelle (durée des pas de temps  $dt$ ). C'est un phénomène qui tend toujours à augmenter la dispersion réelle. En effet si on effectue une modélisation en introduisant une dispersivité «  $\alpha$  », le résultat des calculs sera identique, ou à peu près identique, à une simulation qui serait faite avec des mailles très petites, et des pas de temps très petits, mais avec une dispersion :

$$\alpha_{\text{apparente}} = \alpha + \text{Dispersion numérique}$$

Ceci montre qu'il serait erroné de choisir d'augmenter  $\alpha$ , pour diminuer les effets de la dispersion numérique. Au contraire, on pourrait être amené à diminuer  $\alpha$  pour obtenir une valeur de  $\alpha_{\text{apparente}}$  proche de la vraie valeur de  $\alpha$ .

En pratique, si c'est possible, on essaiera de choisir une discrétisation spatiale et temporelle, telle que la dispersion numérique soit nettement inférieure à la dispersion réelle. Par exemple une dispersion numérique ne dépassant pas 25 % de la dispersion réelle  $\alpha$ .

### 9.2 Éléments théoriques en 1D

La dispersion numérique dépend de la méthode de transport utilisée.

#### 9.2.1 Transport par la méthode DF

Dans un calcul de transport par la méthode des Différences Finies « **DF** » (ou Volumes Finis) avec :

- Un schéma spatial « donor cell », c'est-à-dire avec un flux entrant dans une maille avec la concentration de la maille amont,
- Un schéma temporel implicite classique (« backward »),

Fletcher (1991, p. 302-303) montre qu'on a une dispersion numérique totale «  $Disp\_Num$  » qui est égale à la somme de 2 termes de dispersion numérique : un terme spatial «  $Disp\_dx$  » et un terme temporel «  $Disp\_dt$  » :

$$Disp\_Num = Disp\_dx + Disp\_dt$$

- $Disp\_dx = dx / 2$
- $Disp\_dt = (u \cdot dt) / 2$

D'où :  $Disp\_Num = dx / 2 + (u \cdot dt) / 2$  (méthode DF)

Avec :  $u$  = vitesse réelle de l'écoulement.

Pour avoir une dispersion numérique ne dépassant pas 25 % de la dispersion réelle, il faut donc :

$$dx / 2 + (u \cdot dt) / 2 < 0.25 \cdot \alpha$$

Soit :  $Pe \cdot (1 + Cr) \leq 0.50$  (méthode DF)

Puisque :

$$Pe = dx / \alpha$$

$$Cr = (u \cdot dt) / dx$$

Il apparaît donc, contrairement à ce qu'on lit parfois, que :

$Cette\ condition\ ne\ correspond\ pas\ à\ la\ condition\ «\ Pe \leq 1\ et\ Cr \leq 1\ »$

En effet, si  $Pe = 1$ , et  $Cr = 1$ , on a  $Disp\_Num = \alpha$  :

⇒ la dispersion apparente est égale au double de la dispersion réelle  $\alpha$ ,  
puisque  $\alpha\_apparent = \alpha + \text{dispersion numérique}$

L'expression «  $Disp\_Num = dx / 2 + (u \cdot dt) / 2$  » (méthode DF) : montre aussi que :

Il est toujours intéressant de raffiner le maillage  $dx$ , même si on ne raffine pas la discrétisation temporelle  $dt$ , puisque les 2 effets sont indépendants.

### 9.2.2 Transport par la méthode TVD

Pour un calcul de transport par la méthode **TVD** (avec un schéma temporel classique) : on n'a pas d'élément précis dans la littérature.



### 9.3 Analyse sur un exemple 1D, de la dispersion numérique générée par MARTHE

Les calculs ont tous été effectués avec une vitesse réelle :  $u = 6.75$  m/s dans un milieu infini.

Les simulations ont été réalisées pour :

- Une injection continue
- Pour un Dirac, c'est-à-dire une injection instantanée de masse

#### 9.3.1 Transport par la méthode DF

##### ***Influence du maillage : $dx$ (méthode DF)***

Pour prendre en compte uniquement l'influence du maillage, on choisit un très petit pas de temps :  $dt = 0.1$  s, qui correspond à une distance parcourue  $u \cdot dt = 0.675$  mètre.

On a vu qu'en différences finies (DF), ce pas de temps induit une dispersion numérique égale à :  $u \cdot dt / 2$ , elle est donc égale à 0.34 mètre.

Les calculs ont été réalisés, avec une dispersivité nulle, pour des maillages de  $dx = 1$  mètre à 9 mètres. On obtient (Figure 27) :

- Injection continue : Dispersivité apparente =  $0.52 \cdot dx + 0.36$   
(Figure 27 en haut à gauche)  
D'où : Disp\_Num (due au maillage) =  $0.52 \cdot dx + (0.36 - 0.34)$   
 $= 0.52 \cdot dx + 0.02$  , qui est identique à la théorie  
à 0.02 près.
- Dirac : Dispersivité apparente =  $0.5 \cdot dx + 0.34$  (Figure 27 en haut à droite)  
D'où : Disp\_Num =  $0.50 \cdot dx$  (due au maillage), qui est identique à la théorie

##### ***Influence du pas de temps : $dt$ (méthode DF)***

Pour prendre en compte l'influence du pas de temps, on choisit un maillage  $dx = 1$  mètre. (En différences finies, ce maillage induit une dispersion numérique de 0.5 mètre, qu'on retranchera pour l'interprétation).

Les calculs ont été réalisés, avec une dispersivité nulle, pour des pas de temps  $dt$  variant de 0.1 à 7, c'est-à-dire des valeurs de  $u \cdot dt$  variant de 0.67 mètre à 47.25 mètres. On obtient (Figure 27) :

- **Injection continue** : Dispersivité apparente =  $0.34 \cdot u \cdot dt + 0.5$   
(Figure 27 en bas à gauche)  
D'où : Disp\_Num =  $0.34 \cdot u \cdot dt$  donc inférieure à la théorie ( $0.5 \cdot u \cdot dt$ )
- **Dirac** : Dispersivité apparente =  $0.5 \cdot u \cdot dt + 0.5$   
(Figure 27 en bas à droite)  
D'où : Disp\_Num =  $0.50 \cdot u \cdot dt$  (due au maillage), qui est identique à la théorie

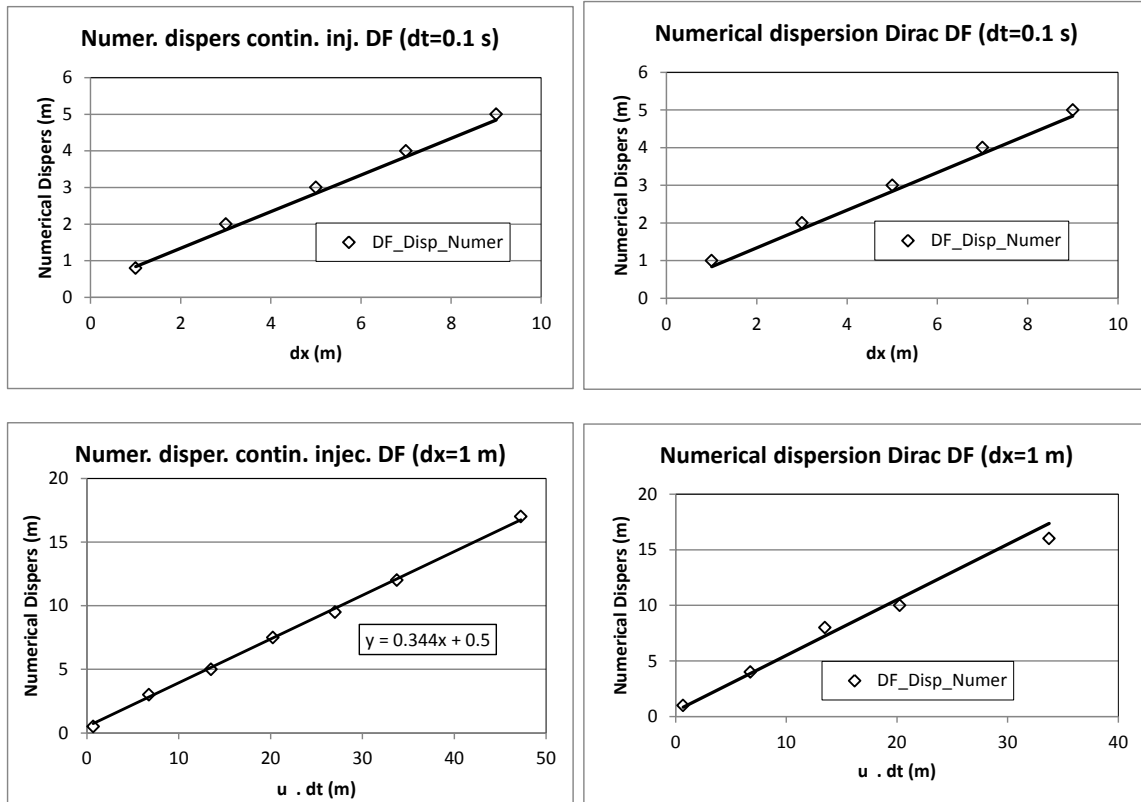


Figure 27 – Méthode DF : Dispersion numérique.  
 En haut : influence du maillage  $dx$ . En bas : influence du pas de temps  $dt$ .  
 Dessins de gauche : Injection continue. Dessins de droite : Dirac.

### 9.3.2 Transport par la méthode TVD

#### Influence du maillage : $dx$ (méthode TVD)

Pour prendre en compte uniquement l'influence du maillage, on choisit un très petit pas de temps :  $dt = 0.1$  s, qui correspond à une distance parcourue  $u \cdot dt = 0.675$  mètre.

Les calculs ont été réalisés, avec une dispersivité nulle, pour des maillages de  $dx = 1$  mètre à 9 mètres. On obtient :

- **Injection continue** : Dispersivité numérique =  $0.052 \cdot dx$  (Figure 28).  
 (Dispersivité introduite = 0)

Pour une **injection continue**, avec la méthode TVD : La dispersion numérique liée au maillage est égale à environ 1/20 de la taille des mailles,

Elle est donc 10 fois plus petite qu'avec la méthode DF.

- **Dirac** (Figure 29) :
  - ⇒  $Dispers \geq 1 \Rightarrow$  Dispersivité Numér. =  $0.115 \cdot dx - 0.315$   
 (Disp\_Num = 0 si  $dx \leq 3$ )
  - ⇒  $Dispers = 0 \Rightarrow$  Dispersivité Numér. =  $0.128 \cdot dx$

Pour un **Dirac**, avec la méthode TVD : La dispersion numérique due au maillage est inférieure à 1/10 de la taille des mailles (et nettement moins pour les faibles valeurs de dx). (Figure 30)

Si la dispersivité du domaine est égale à 0 (soit un nombre de Péclet Infini qui n'est pas physique pour un Dirac), le ratio de la dispersivité numérique est légèrement supérieur).

Donc pour un **Dirac**, avec la méthode TVD la dispersion numérique due au maillage est 5 fois à 10 fois plus petite qu'avec la méthode DF.

On verra plus bas que, si le pas de temps est plus grand et correspond à un nombre de Courant proche de 1, alors la dispersion numérique est encore considérablement réduite.

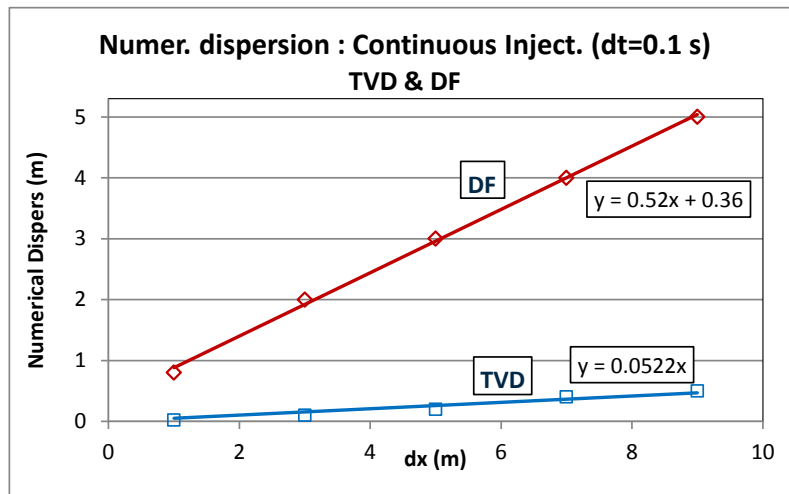


Figure 28 – Méthode TVD : Dispersion numérique lors d'une « Injection continue ». Influence du maillage dx. (La dispersion numérique est très inférieure à celle avec la méthode DF).

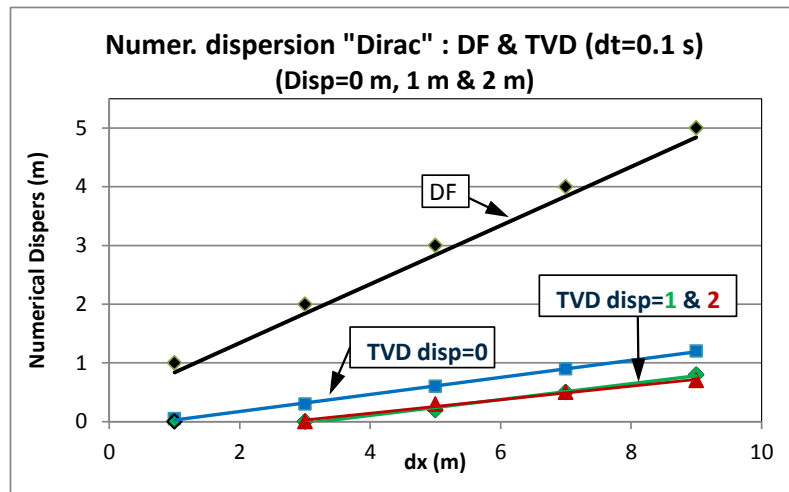


Figure 29 – Méthode TVD : Dispersion numérique pour un « Dirac ». Influence du maillage dx. (La dispersion numérique est très inférieure à celle obtenue avec la méthode DF).

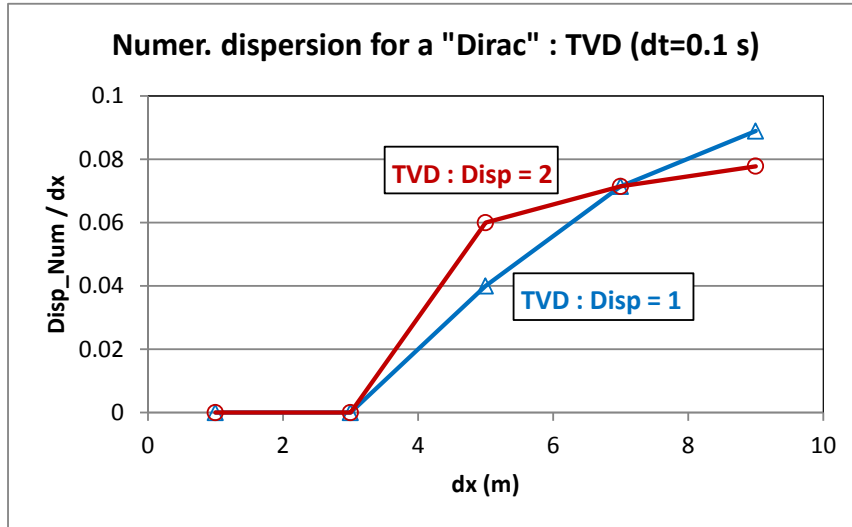


Figure 30 – Méthode TVD : Dispersion numérique pour un « Dirac ». Influence du maillage dx. Ratio : (Dispersion numérique) / dx. Il est inférieur à 0.1

### Influence du pas de temps : dt (méthode TVD)

Avec le schéma TVD : Le pas de temps est au maximum égal à  $dx / u$  (ce qui correspond à un nombre de Courant égal à 1).

Pour mettre en évidence l'influence de la durée du pas de temps : On a calculé la dispersion numérique pour un pas de temps =  $dx / u$  au lieu de 0.1 s. Ce pas de temps est 4.4 fois à 13 fois plus grand ( $dt = 0.44$  m pour  $dx = 3$  m,  $dt = 1.3$  s pour  $dx = 9$  m).

Avec la méthode TVD, et un pas de temps correspondant à un nombre de Courant égal à 1, on obtient une simulation des « Diracs » avec une dispersion numérique très fortement réduite par rapport à un pas de temps plus petit (Figure 31) :

$$\text{Dispersivité Numér.} = 0.05 \cdot dx - 0.22 \quad \text{en TVD, avec un nombre de Courant} = 1$$

Pour un **Dirac**, avec la méthode TVD et un nombre de Courant égal à 1 : La dispersion numérique liée au maillage est égale à environ 1/30 de la taille des mailles, soit 15 fois plus petite qu'avec la méthode DF. (Figure 32)

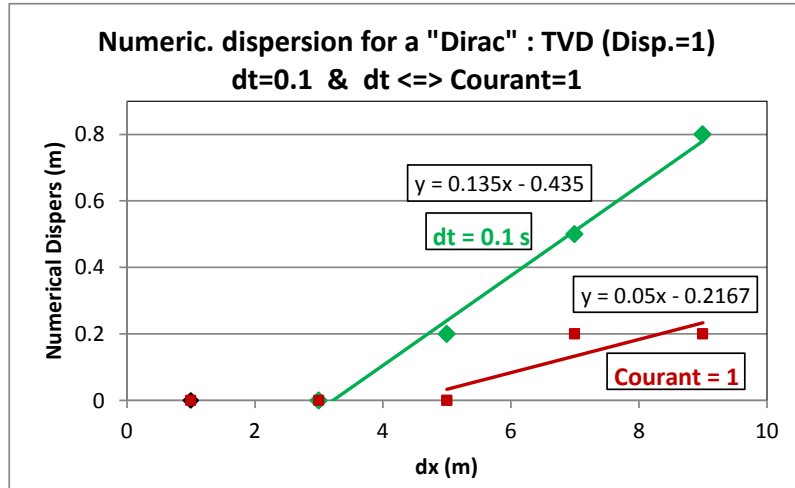


Figure 31 – Méthode TVD : Dispersion numérique pour un « Dirac ». Influence du maillage  $dx$ . Pas de temps  $\Leftrightarrow$  Nombre de Courant = 1 : La dispersion numérique est significativement réduite par rapport à un pas de temps plus petit.

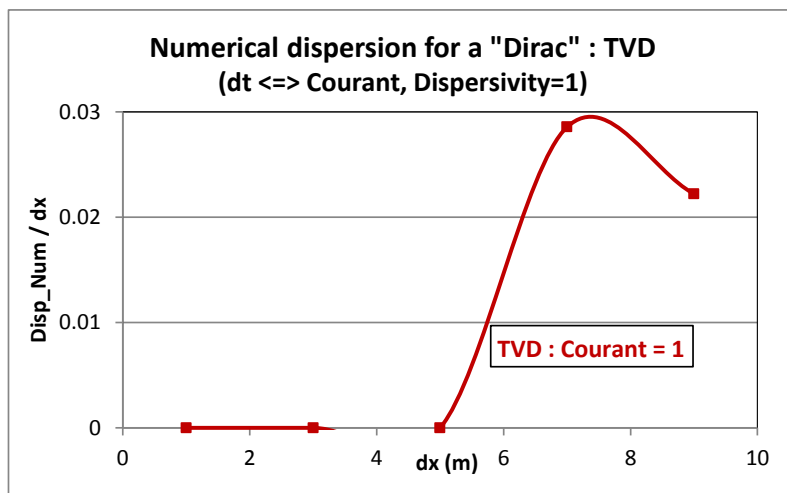


Figure 32 – Méthode TVD : Dispersion numérique pour un « Dirac ». Influence du maillage  $dx$ . Avec un Nombre de Courant = 1, la dispersion numérique ne dépasse pas  $dx/30$ .

### 9.3.3 Exemple pratique avec la méthode TVD et la méthode MOC

Pour montrer les résultats sous forme pratique, on présente ici les simulations de l'exemple présenté, avec un nombre de Péclet égal à 9, donc très grand. Les calculs sont réalisés :

- Avec la méthode de transport TVD
- Avec la méthode MOC

Les simulations se rapportent :

- À une injection continue
- À une injection instantanée (un « Dirac »)

Pour les 2 simulations avec la méthode MOC, le nombre maximal de particules est égal à 50 000.

Les Figure 33 et Figure 34 montrent que, dans les 4 cas, les simulations avec ce nombre de Péclet très supérieur à 1 donnent de bons résultats.

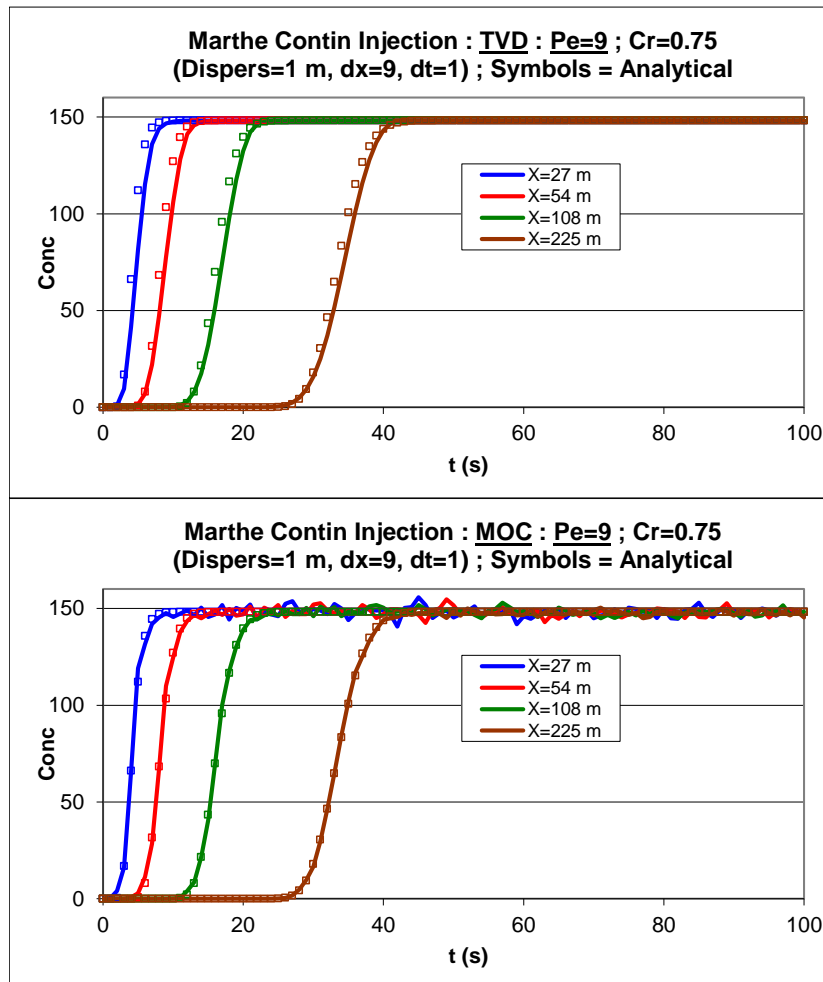


Figure 33 – Injection continue : Nombre de Péclet = 9.  
 En haut : méthode TVD ; En bas : méthode MOC.

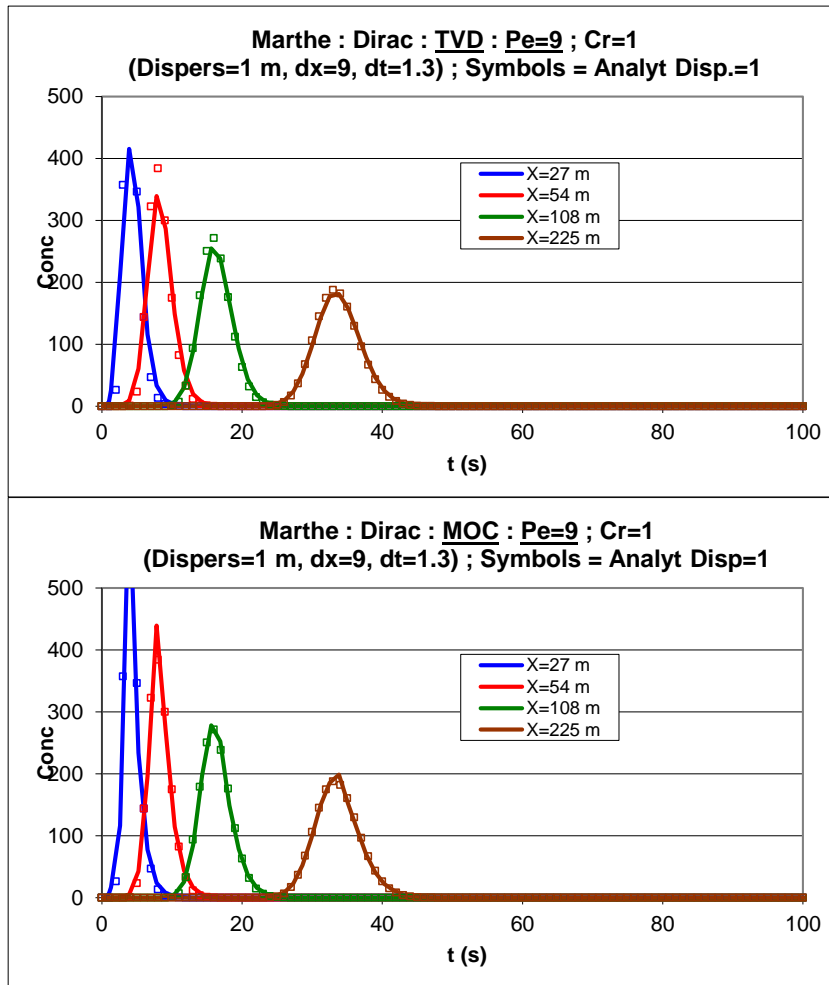


Figure 34 – Injection instantanée (Dirac) : Nombre de Péclet = 9.  
 En haut : méthode TVD ; En bas : méthode MOC.





## 10

# TRANSPORT AVEC DOUBLE POROSITÉ

Les chapitres suivants présentent la fonctionnalité de transport dans les schémas à « Double Porosité ».

Plusieurs cas de validation et d'application de calcul de [transport de masse avec double porosité](#) sont présentés à la fin de ce rapport.



## 11 Transport de masse avec double porosité

Les écoulements à travers les sols font très souvent intervenir une double porosité avec une porosité correspondant à de l'eau mobile (eau libre), et une porosité correspondant à de l'eau immobile (eau liée). Si on considère que les échanges de masse entre l'eau mobile et l'eau immobile sont linéaires et instantanés, l'effet de la double porosité se traduit simplement par un coefficient de retard ou plus généralement par un coefficient de partage ( $k_d$ ). En revanche, si les échanges de masse font intervenir une cinétique, l'eau mobile et l'eau immobile sont considérées comme deux phases distinctes et la modélisation du transport doit prendre en compte explicitement la concentration dans chacune de ces deux phases.

Les milieux faisant intervenir une double porosité lors du transport de masse sont les suivants :

- Milieux hétérogènes produisant des écoulements avec cheminements préférentiels (macropores ou fissures) ;
- Milieux comportant de l'eau immobile ou de la sorption sur la matrice poreuse.

Il est nécessaire de prendre en compte une cinétique d'échange quand les écoulements sont rapides comparés au temps nécessaire aux échanges de masse avec la porosité immobile ou la matrice poreuse.

L'objet des chapitres suivants est la description de la prise en compte des échanges linéaires avec cinétique pour les modélisations en 1D, 2D ou 3D.

Le transport de masse avec double porosité est opérationnel en milieu poreux saturé ou non saturé, en régime permanent ou transitoire.

Plusieurs cas de validation et d'[application de transport avec double porosité](#) sont présentés à la fin de ce rapport.



### 11.1 Notations pour le transport avec double porosité

Notation	Description	Unité S.I.	Notation MARTHE
$\theta$	Teneur en eau volumique mobile	[-]	SATURAT
$\omega_{\text{Fix}}$	Porosité équivalente de la phase immobile concernée par la cinétique	[-]	POROSI_IMMOB
C	Concentration volumique dans l'eau mobile (ou eau libre)	kg/m <sup>3</sup>	CONCENTR
$C_{\text{Fix}}$	Concentration volumique dans la phase immobile ( $\omega_{\text{Fix}}$ )	kg/m <sup>3</sup>	CONCEN_IMMOB
RhoKD*	Coefficient de partage volumique	[-]	RHO_KD*
$S_{\text{mc}}$	Concentration massique du solide de la région avec cinétique	kg/kg	
$\rho_s$	Masse volumique sèche du terrain (de l'ordre de 1600 kg/m <sup>3</sup> )	kg/m <sup>3</sup>	
$C_s$	Concentration volumique du solide en masse par Volume de terrain. $C_s = S_{\text{mc}} \cdot \rho_s$	kg/m <sup>3</sup>	
$m_s$	Masse fixée sur 1 m <sup>3</sup> de terrain	kg	
$k_{\text{dc}}$	Coefficient de partage de la région avec cinétique	m <sup>3</sup> /kg	
$\beta$	Cinétique d'échange	s <sup>-1</sup>	
$t_{1/2e}$	Temps de ½ échange de masse = $\text{Ln}(2) / \beta$	s	CINET_ECH_KD
Ln	Logarithme Népérien	[-]	
$\lambda_d$	Constante de dégradation	s <sup>-1</sup>	
$t_d$	Temps de demi-dégradation (ou « période ») = $\text{Ln}(2) / \lambda_d$	s	DEMI_DEGRAD
t	Temps	s	
$m_o$	Masse initiale	kg	
TVD	<b>Total Variation Diminishing</b> : Transport avec limiteurs de flux.		
MOC	<b>Method Of Characteristics</b> = Méthode des Caractéristiques		
	Concentration en eau mobile extérieure au domaine	kg/m <sup>3</sup>	CONCEN_EXT
$A_{xy}$	Coefficient d'anisotropie horizontale $A_{xy} = K_x/K_y$	[-]	
$K_s$	Perméabilité à saturation	m/s	
$\alpha_T$	Dispersivité transversale	m	
$u_1, u_2$	Vitesses réelles	m/s	

\* : Attention, dans le code de calcul MARTHE, le coefficient de partage volumique RHO\_KD est donné en unité utilisateur de porosité.

## 11.2 Principes du transport avec double porosité

### 11.2.1 Concentrations, porosités et teneur en eau

Dans le code de calcul MARTHE, le domaine modélisé peut être découpé en trois « régions » :

- 1) Une phase d'eau mobile ;
- 2) Une phase immobile « RhoKD » avec échanges instantanés qui peut être :
  - soit de l'eau liée (immobile),
  - soit l'effet de la sorption sur la matrice poreuse (solide).
- 3) Une phase immobile «  $\omega_{\text{Fix}}$  », avec échanges linéaires avec cinétique.

Phase d'eau mobile :

- Teneur en eau volumique (mobile) :  $\theta$  ;
- Concentration volumique : C

Phase d'eau immobile avec échanges instantanés :

- Teneur en eau volumique (immobile) : RhoKD ;
- Concentration volumique : C.

Phase d'eau immobile avec échanges avec cinétique :

- Teneur en eau volumique (immobile) :  $\omega_{\text{Fix}}$  ;
- Concentration volumique :  $C_{\text{Fix}}$ .

Selon les cas, RhoKD peut correspondre à une teneur en eau immobile, ou bien à une « teneur en eau immobile » équivalente à la sorption sur la phase solide.

De la même manière  $C_{\text{Fix}}$  peut correspondre à une teneur en eau immobile, ou bien à une « teneur en eau immobile » équivalente à la sorption sur la phase solide.

Dans le code de calcul MARTHE, RhoKD et  $\omega_{\text{Fix}}$  sont exprimés en unité utilisateur de porosité (et de teneur en eau).

Remarque n°1 : Dans le cas de sorption sur la matrice poreuse, la « porosité immobile équivalente » ( $\omega_{\text{Fix}}$  ou RhoKD) peut être supérieure à 100 %, et parfois même dépasser 10 000 %, par exemple dans le cas de métaux lourds très fortement adsorbés.

Remarque n°2 : Si le calcul hydrodynamique est effectué en régime transitoire, et si la nappe est localement libre, la porosité cinématique de ces zones devra obligatoirement être égale au coefficient d'emmagasinement libre, sinon les calculs pourraient conduire à des résultats inacceptables.

#### • Cinétique instantanée

Explicitation de RhoKD dans le cas où il représente une sorption sur la phase solide.

On utilise les notations suivantes :

$S_m$  = concentration massique sur le solide (kg/kg).

$\rho_s$  = masse volumique sèche du terrain (de l'ordre de  $1600 \text{ kg/m}^3$ ).

$m_s$  = masse fixée sur  $1 \text{ m}^3$  de terrain.

$k_d$  = coefficient de partage (massique) :

$$k_d = \frac{S_m}{C} \quad (\text{m}^3/\text{kg})$$

Avec ces notations :

- La masse fixée sur le solide est :

$$m_s = C \cdot \text{RhoKD}$$

- La concentration massique est :

$$S_m = \frac{m_s}{\rho_s} = \frac{C \cdot \text{RhoKD}}{\rho_s} \quad (\text{kg/kg})$$

- La teneur en eau immobile est :

$$\text{RhoKD} = \rho_s \cdot k_d$$

Par identification, puisque par définition :

$$S_m = k_d \cdot C$$

Dans ce schéma « eau mobile – solide », RhoKD est appelé « coefficient de partage volumique ». Il est adimensionnel ( $\text{kg/m}^3 \times \text{m}^3/\text{kg}$ ). Dans le code MARTHE, il est exprimé en unité utilisateur de porosité et de teneur en eau.

### • Échanges avec cinétique

Dans le schéma eau mobile – solide on utilise les notations suivantes :

$S_{mc}$  = concentration massique du solide de la région avec cinétique (kg/kg).

$k_{dc}$  = coefficient de partage ( $\text{m}^3/\text{kg}$ ) de la région avec cinétique.

$\beta$  = cinétique d'échange de masse [ $\text{T}^{-1}$ ].

$t_{1/2e}$  = temps de  $\frac{1}{2}$  échange de masse :

$$t_{1/2e} = \frac{\text{Ln}(2)}{\beta}$$

$$\text{Ln}(2) = 0.6931$$

Les échanges entre l'eau mobile et la phase immobile avec cinétique sont décrits de la manière suivante :

Schéma : **eau mobile – eau immobile** :

$$\frac{\partial(\omega_{\text{FIX}} \cdot C_{\text{FIX}})}{\partial t} = \beta \cdot (C - C_{\text{FIX}})$$

Schéma : **eau mobile – solide** :

$$\rho_s \cdot \frac{\partial S_{mc}}{\partial t} = \beta \cdot \left( C - \frac{S_{mc}}{k_{dc}} \right)$$

On a alors immédiatement, par identification :

$$\omega_{FIX} = \rho_s \cdot k_{dc}$$

$$C_{FIX} = \frac{S_{mc}}{k_{dc}} = S_{mc} \cdot \frac{\rho_s}{\omega_{FIX}}$$

Réciproquement :

$$k_{dc} = \frac{\omega_{FIX}}{\rho_s}$$

$$S_{mc} = C_{FIX} \cdot k_{dc} = C_{FIX} \cdot \frac{\omega_{FIX}}{\rho_s}$$

Les échanges avec cinétique font intervenir trois champs :

Nom dans les équations	Nom dans MARTHE	Extension du fichier	Description
$\omega_{FIX}$	POROSI_IMMOB	por_imm	Porosité liée à la matrice rocheuse. Elle est considérée comme immobile. Sa concentration est en relation avec celle de l'eau mobile avec une cinétique d'échange. $\omega_{FIX}$ peut également représenter la quantité d'eau liée équivalente à l'effet d'adsorption du solide. $\omega_{FIX} = \rho_s \cdot k_{dc}$ Elle est exprimée en unité utilisateur de porosité.
$C_{FIX}$	CONCEN_IMMOB	con_imm	Concentration volumique en soluté de la porosité liée à la matrice rocheuse. Elle est en relation avec celle de l'eau mobile avec une cinétique d'échange. Elle est exprimée en masse de soluté par volume de fluide $\omega_{FIX}$ (eau liée équivalente au solide). $C_{FIX} = \frac{S_{mc}}{k_{dc}} = S_{mc} \cdot \frac{\rho_s}{\omega_{FIX}}$
$t_{1/2e}$	CINET_ECH_KD	cinec	Temps de ½ échange de masse. Il est exprimé en unité utilisateur de temps. $t_{1/2e} = \frac{\text{Ln}(2)}{\beta}$



### 11.2.2 Dégradation du soluté

Le soluté en solution dans l'eau peut se dégrader exponentiellement. Cette dégradation est une disparition définitive de produit. Il peut s'agir :

- d'une décroissance radioactive ;
- d'une biodégradation.

Dans le code MARTHE on considère que cette disparition est exponentielle en fonction du temps, c'est-à-dire, en notant **m** la masse de soluté (et en l'absence de convection et de dispersion) :

$$m = m_0 \cdot e^{-t \cdot \lambda_d}$$

Avec :

$$\begin{aligned} m_0 &= \text{masse initiale} \\ t &= \text{temps} \\ \lambda_d &= \text{constante de dégradation [T}^{-1}\text{]} \end{aligned}$$

Dans le code MARTHE, on utilise le temps de ½ dégradation  $t_d$ , parfois appelé « période », qui est la durée après laquelle la moitié de la masse a été dégradée :

$$t_d = \frac{\text{Ln}(2)}{\lambda_d}$$

Avec :

$$\begin{aligned} \text{Ln}(2) &= 0.6931 \\ t_d &= \text{temps de demi-dégradation} \end{aligned}$$

Dans le code MARTHE on admet que la dégradation dans les phases immobiles s'effectue avec le même temps de ½ dégradation que dans l'eau mobile (ce qui n'est pas toujours le cas dans les milieux réels).

$$\frac{\partial(\omega_{\text{Fix}} \cdot C_{\text{Fix}})}{\partial t} = -\lambda_d \cdot (\omega_{\text{Fix}} \cdot C_{\text{Fix}})$$

## 12 Modélisation du transport à double porosité avec le code de calcul MARTHE

Certaines limitations ou restrictions s'appliquent à la prise en compte de la double porosité :

- La prise en compte de la double porosité avec cinétique peut être activée uniquement en régime de transport transitoire (en régime de transport permanent elle se ramènerait à un simple effet de RhoKD).
- Seul le transport de masse de type « Concentration » est concerné par la double porosité avec cinétique. Le transport de salinité et le transfert thermique ne font pas intervenir de double porosité.
- Il est cependant possible de combiner des échanges linéaires instantanés sur une partie de la phase immobile : champ « RHO\_KD », et des échanges avec cinétique sur une autre partie de la phase immobile : champs « POROSI\_IMMOB » et « CINET\_ECH\_KD ».

### 12.1 Méthode de calcul du transport

Dans le code MARTHE, il y a 4 méthodes de calcul du transport :

- la méthode TVD (Total Variation Diminishing) à limiteurs de flux ;
- la méthode des caractéristiques notée MOC (Method Of Characteristics) ;
- la méthode des différences finies : DF.
- La méthode Random Walk : RW

La double porosité avec cinétique peut être prise en compte avec les trois premières méthodes.

En revanche la double porosité ne peut pas être prise en compte avec la méthode Random Walk : RW (*méthode déconseillée*).

#### ○ **La méthode de transport DF par différences finies**

La méthode de transport par différences finies DF consiste à discrétiser l'équation du transport avec un schéma temporel implicite, d'une manière un peu similaire à l'équation de l'hydrodynamique. Cette équation intègre simultanément :

- la convection ;
- la dispersion ;
- la dégradation ;
- les échanges avec cinétique avec l'eau immobile.

On obtient un système d'équations, une équation par maille, qui est résolu par méthode itérative par gradients conjugués non symétriques (méthode Orthomin).

#### ○ **La méthode TVD**

Dans la méthode de transport TVD : la convection est calculée suivant un schéma temporel explicite, alors que la dispersion, la dégradation et les échanges font intervenir un schéma implicite.

La méthode TVD, qui a une contrainte sur le nombre de Courant numérique, fonctionne uniquement en régime de transport transitoire.

### ○ La méthode MOC (méthode des caractéristiques)

La méthode MOC du code de calcul MARTHE consiste à modéliser la convection et la dispersion en deux étapes :

- Dans un premier temps, MARTHE génère des particules correspondant aux apports de masse et déplace toutes les particules, sans tenir compte de la dispersion, mais en prenant en compte la dégradation. Le champ de concentration dans les mailles est alors calculé par comptage des particules dans les mailles.
- Dans un deuxième temps, MARTHE calcule la dispersion pure par différences finies en prenant compte des échanges avec l'eau immobile, sans tenir compte de la convection. Les nombres de particules dans les mailles du domaine modélisé sont alors réajustés.

## 12.2 Conditions initiales

En plus de la concentration initiale en eau mobile (champ « CONCENTR » et d'extension de fichier [.conce]), l'utilisateur peut également définir en début de calcul la concentration initiale en eau immobile de chaque maille.

Cette concentration en eau immobile est un champ, de nom « CONCEN\_IMMOB » et d'extension [.con\_imm]. Par défaut, comme pour les autres champs, si on ne lui donne pas explicitement de valeur, elle a initialement la valeur zéro dans tout le domaine.

## 12.3 Conditions aux limites

Les conditions aux limites sont les mêmes que pour les calculs avec transport de masse classique :

### ○ Concentration extérieure

En toute maille du domaine, on peut définir la concentration en eau (mobile) extérieure au domaine. C'est la concentration à laquelle rentrera l'éventuel flux entrant à cet endroit : champ « CONCEN\_EXT », d'extension [.conex].

### ○ Concentration imposée

En toute maille du domaine, on peut imposer la concentration en eau mobile. Pour cela il suffit de fixer dans cette maille « CONCEN\_EXT » à la valeur code : 9999.

La concentration immobile CONCEN\_IMMOB ne peut pas être imposée. En revanche, si la concentration en eau mobile est imposée, les échanges se produisent quand même et la concentration immobile CONCEN\_IMMOB peut évoluer.

### ○ Flux massique

En toute maille du domaine on peut introduire un flux massique. C'est le champ « QMASS\_CONC », d'extension [.qmasc]. Il est exprimé en unité utilisateur de masse par unité de temps de temps. Ce flux de masse est introduit (ou prélevé) dans l'eau mobile. Ce n'est pas réellement une condition à la limite, mais un « terme source ».

- Injection instantanée de masse (Dirac)


En n'importe quelle maille du domaine, il est possible d'imposer un apport instantané de masse, sous forme d'un « Dirac » : champ MASS\_CONCEN d'extension de fichier [.mconc]. Cette injection de masse est exprimée en unité utilisateur de masse.

Ce flux de masse est introduit (ou prélevé) dans l'eau mobile. Ce n'est pas réellement une condition à la limite, mais un « terme source ».

## 12.4 Résultats de calculs

- Mailles à historiques

Il est possible de sélectionner certaines mailles du domaine modélisé pour lesquelles on souhaite sauvegarder l'évolution des valeurs de concentration dans la phase mobile (champ « Concentr ») ou de concentration dans la phase immobile (champ « Concen\_Immob »). Avec la méthode de transport MOC, on peut également sauvegarder l'évolution de la concentration dans le débit sortant (« Concent\_Sort »).

La sélection des mailles et des champs est réalisée par le module de « Gestion des données non maillées », accessible par le bouton  de la barre d'outils du bas du cadre de WinMarthe. On choisit alors la ligne « Mailles à Historiques ».

Un fichier des « mailles à historiques », d'extension [.histo] est alors créé. Il contient la définition des champs et des mailles choisies.

```
/Concentr      /HISTO/ = /MAIL:C=  1L= 351P= 1;  
/Concen_Immob /HISTO/ = /MAIL:C=  1L= 351P= 1;
```

Les historiques calculés des mailles sélectionnées sont écrits dans le fichier « historiq.prn » habituel.

- Bilans massiques

Les différents termes du bilan sont affichés en unité de masse (choisie par l'utilisateur) uniquement pour le transport de concentration.

Les termes du bilan relatifs aux échanges avec cinétique sont les suivants :

Masse :   Échanges avec la phase immobile  
          Stockage dans la Phase immobile  
          Dégradation dans la Phase immobile

L'historique du bilan des flux massiques est écrit dans le fichier « histomas.prn » classique.

- Champs des états calculés

À n'importe quel pas de temps, il est possible de sauvegarder les « Grilles » le champ de concentration calculée : champ « CONCENTR » ou « CONCEN\_IMMOB ».

Les grilles des champs calculés sélectionnés sont sauvegardés, en format texte (ASCII), ou en binaire, dans le fichier « chasim.out ». En outre, si le domaine est monodimensionnel, les valeurs apparaissent en format libre dans le fichier séquentiel « chasimsq.prn » (et dans le fichier « chasimsq.out »).

- État du modèle en fin de calcul

Si, dans le paragraphe « sauvegardes et contrôles » du fichier des paramètres, on a choisi l'option : « sauvegarde de l'état de fin de calcul », MARTHE sauvegarde en fin de calcul tous les fichiers modifiés. Il sauvegarde en particulier le champ de concentration en eau mobile « CONCENTR » et le champ de concentration en eau liée « CONCEN\_IMMOB ». Il est ainsi possible de poursuivre ultérieurement les calculs si nécessaire.

## 12.5 Calibration automatique des paramètres

Si on dispose d'observations de concentration dans l'eau mobile (champ « CONCENTR ») et de concentration dans l'eau immobile (champ « CONCEN\_IMMOB »), il est possible d'identifier par calibration automatique des paramètres de modélisation du transport.

Les paramètres de transport pouvant être déterminés par calibration automatique sont les suivants :


DIFFUS_MOLEC	= Diffusion moléculaire
DISPER_LONGI	= Dispersivité longitudinale
DISPER_TRANSV	= Dispersivité transversale
RETAR_CONC	= Coefficient de retard
DEGRA_CONCEN	= Temps de ½ dégradation
RHO_KD	= Coefficient de partage volumique
PORO_FIX	= Teneur en eau liée (en Zone Non Saturée). [Déconseillé]
POROSI_IMMOB	= Teneur en eau immobile équivalente avec cinétique (à concentration CONCEN_IMMOB)
CINET_ECH_KD	= Cinétique de ½ échanges entre eau liée et eau immobile.

Il est possible, de calibrer également simultanément des paramètres hydrodynamiques (perméabilité, coefficient d'emmagasinement, facteur d'infiltration, etc.).

La calibration des paramètres peut s'effectuer sur des observations de :

- 1 ou 2 champs de concentration en eau mobile (CONCENTR) ;
- Des historiques de concentration en eau mobile (CONCENTR) et / ou de concentration en eau immobile (CONCEN\_IMMOB).

## 12.6 Description des paramètres relatifs au transport avec double porosité

Le fichier des « Paramètres Généraux » est créé ou modifié par le module de « Gestion des données non maillées » (module « Paramart »), accessible par le bouton  de la barre d'outils du bas du cadre de WinMarthe.

### 12.6.1 Paragraphe : Unités utilisateur des données

*** Unités des données	***
→ Ann = Unité de Temps (des Pas de modèle) (sec, min, heu, jou, déca, moi, ann)	
→ 0 = Unité de Concentration en kg/m <sup>3</sup>	
→ % = Unité de Porosité = Teneur en eau en [-] ['%' si en %]	
→ G = Unité de Masse en kg	

On décrit ici uniquement les données nécessaires à la fonction double porosité du transport de masse.

#### ○ Unité de porosité et de teneur en eau

C'est le facteur par lequel il faut multiplier la teneur en eau (mobile et fixe) « SATURAT », « POROSI\_IMMOB », la porosité « POROSITE » et le coefficient « RHO\_KD » volumique pour obtenir des données en m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>. Par exemple, si la porosité, le RhoKD, etc. sont donnés en %, on utilisera le caractère « % », ou bien le facteur numérique 0.01.

**Attention** : Bien noter que le coefficient de partage volumique RhoKD, lui aussi, est donné en unité de porosité. Par exemple si l'unité est le %, RhoKD devra être donné en %, la valeur adimensionnelle devra donc être multipliée par 100.

#### ○ Unité de temps

Le temps de ½ échange entre la concentration dans la porosité mobile et la concentration dans la porosité immobile est exprimé en unité utilisateur de temps.

### 12.6.2 Paragraphe : Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité

Rien de particulier dans ce paragraphe du fichier des « Paramètres Généraux ».

Méthode de résolution des calculs de transport : La méthode RW n'est pas disponible pour la prise en compte de la double porosité avec cinétique d'échange.

### 12.6.3 Paragraphe : Concentration et trajectoires

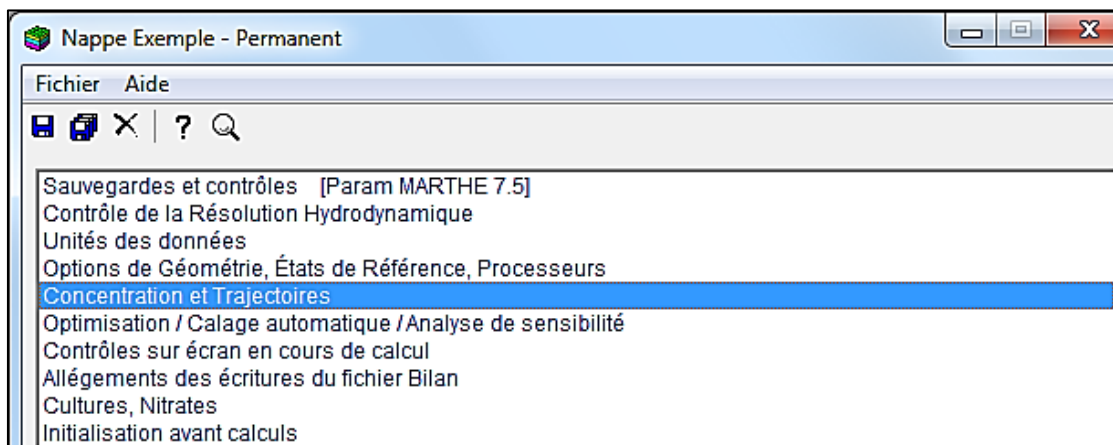


Figure 35 – Fichier des paramètres généraux : Paragraphe « concentration et trajectoires »

```

*** Concentration et Trajectoires ***
→ 1 = Calcul de la Concentration
Transit = Régime du Transport de Concentration [0=Transit. ; 1=Permanent]
0 = Coefficient de Retard (sauf si calcul en ZNS)
0 = Temps de 1/2 Dégradation de la concentration (en unité de temps)
→ 1 = Calculs avec Cinétique d'échange entre Conc_Mobile & Conc_Immobile

```

- **Calculs avec cinétique d'échange entre concentration mobile & concentration fixe**

On précise ici si on désire faire un calcul prenant en compte les échanges de masse avec cinétique entre la concentration « en phase mobile » et la concentration « en phase liée » :

- 0 = Pas de prise en compte des échanges.
- 1 = Prise en compte des échanges avec cinétique.

- **Régime du transport de concentration**

Le calcul de transport peut être réalisé en régime transitoire ou en régime permanent. Si le calcul est réalisé en régime permanent, la cinétique d'échanges ne peut pas être prise en compte. Il faut alors utiliser un coefficient de retard ou un coefficient de partage volumique  $\rho_{KD}$ .

- **Coefficient de retard**

Le coefficient de retard n'est pas pris en compte lors des calculs avec double porosité avec cinétique (sauf pour le calcul des trajectoires).

- **Temps de ½ dégradation**

On considère que la masse (dont résulte la concentration) se dégrade exponentiellement avec un temps de ½ dégradation  $t_d$ . Au bout de ce temps  $t_d$ , la moitié de la masse est dégradée (ou précipitée ...). On admet que la dégradation s'effectue avec la même constante de temps dans la phase mobile et la phase immobile.

La masse dégradée (mobile ou fixe) disparaît du domaine. Par exemple le temps de ½ dégradation du tritium (c'est-à-dire la « période » du tritium) est de 12.3 ans. Par défaut, ce paramètre est égal à zéro. Le temps de ½ dégradation est exprimé en unités utilisateur de temps.

Ce paramètre peut également être spatialisé. Il est ainsi possible de fixer des valeurs différentes dans chaque maille ou groupe de mailles.

## 12.7 Mise en œuvre pratique du transfert de masse à double porosité

Définition des paramètres spécifiques à la prise en compte de la double porosité avec échanges.

- **À définir dans le fichier des « Paramètres Généraux »**

Dans le paragraphe « Concentration et trajectoires » :

- Sélectionner : 1 = Calculs [avec Cinétique d'échange](#) entre Conc\_Mobile & Conc\_Fixe.

- **À définir dans les mailles du domaine modélisé**

- a) Définir le champ de la porosité immobile équivalente (POROSI\_IMMOB).
- b) Définir le champ de la cinétique (CINET\_ECH\_KD) de demi-échange entre la concentration dans la porosité mobile (la teneur en eau) et la porosité immobile.
- c) Définir le champ de la concentration initiale (CONCEN\_IMMOB) dans porosité immobile.
- o **À définir éventuellement**
  - a) Les dates auxquelles on sauvegardera le champ de concentration calculée dans la phase immobile.
  - b) Les mailles pour lesquelles on sauvegardera les historiques de concentration calculée dans la phase immobile.

Des exemples d'applications de transport avec double porosité sont décrits dans le chapitre des [applications de la double porosité](#).



## 13 TRANSFERT THERMIQUE

Les chapitres suivants présentent la fonctionnalité de transfert thermique et de prise en compte des effets de la température.

Plusieurs cas de validation et [d'application de calcul de transfert thermique](#) sont présentés à la fin de ce rapport.



## 14 Transfert thermique et prise en compte des effets de la température

Les calculs de transfert thermique permettent de répondre à plusieurs classes de problèmes :

- Le stockage de chaleur ;
- L'exploitation de ressources thermiques ;
- L'évaluation de potentiel géothermique ;
- Le dimensionnement de doublets géothermiques.

Ces calculs permettent également de prendre en compte les effets de la température, de manière couplée ou pas, sur les propriétés suivantes :

- La viscosité de l'eau ;
- La densité de l'eau ;
- Les réactions chimiques.

L'objet des chapitres suivants est la description des calculs de transfert thermique et des effets de la prise en compte température pour les modélisations en régime permanent ou transitoire, en zone saturée ou non-saturée, en 3D, en 2D, en 1D, en coupe ou en symétrie cylindrique.

Les transferts thermiques concernent les aquifères et aussi les réseaux de rivières et de drains.

Plusieurs cas de validation et [d'application de calcul de transfert thermique](#) sont présentés à la fin de ce rapport.



## 14.1 Notations pour le calcul de transfert thermique

- $V$  = Volume élémentaire de référence
- $\omega$  = Porosité volumique [-]
- $\theta$  = Teneur en eau volumique ; (en milieu saturé :  $\theta = \omega$ ) [-]
- $dx, dy, dz$  = Dimensions du volume de référence [L]
- $Vol = Volume = dx \cdot dy \cdot dz$  [L<sup>3</sup>]
- $T$  = Température [°C ou °K]
- $\lambda_W$  = Conductivité thermique de l'eau ( $\lambda_W = 0.6$  W/m/K) [W/m/K]
- $\lambda_M$  = Conductivité thermique du minéral de la matrice poreuse [W/m/K]
- $\alpha_L, \alpha_T$  = Dispersivité thermique longitudinale et transversale [L]
- $\rho C_W$  = Capacité thermique volumique de l'eau ( $\rho C_W = 4.185 \cdot 10^6$ ) [J/m<sup>3</sup>/K]
- $\rho C_M$  = Capacité thermique volumique du minéral de la matrice poreuse [J/m<sup>3</sup>/K]
- $u_x, u_y, u_z$  = Vitesses réelles (ou vitesse de pore) dans les 3 directions [L.T<sup>-1</sup>]

## 14.2 Phénomènes mis en jeu lors du calcul de transfert thermique

Le calcul de transfert thermique (transport de chaleur) fait intervenir les phénomènes suivants :

- Le transfert par convection (ou « advection »).
- Le transfert par conduction thermique.

Pour expliciter ces différents phénomènes on considère le volume de référence  $V$  ainsi qu'un volume voisin  $V_V$ . Tous les paramètres de ce volume  $V_V$  ( $\omega, \theta, dx, dy, dz, T_V, \lambda_M, \alpha_L, \alpha_T, \rho C_M$ ) peuvent être différents de ceux du volume de référence  $V$ .

En supposant que ce volume voisin  $V_V$  est situé par exemple à l'est du volume de référence  $V$ , donc dans la direction  $ox$ , on peut définir :

- $A$  = Surface d'échange = pondération des surfaces en vis-à-vis.  
 $A = dy \cdot dz$  si les dimensions des 2 volumes sont identiques.
- $L$  = Distance entre les centres des 2 volumes.  
 $L = 0.5 \cdot (dx_1 + dx_2)$
- $Q$  = Débit d'échange d'eau.  
(positif si le débit entre dans le volume de référence, négatif s'il en sort) [L<sup>3</sup>T<sup>-1</sup>]

Toutes les méthodes de transport de masse du code de calcul MARTHE peuvent être utilisées pour le transfert thermique :

- Méthode TVD
- Méthode DF
- Méthode MOC

Dans un souci de clarté on explicite les différents termes en 1D, avec le schéma de calcul le plus simple : la méthode DF de transport par différences finies, avec le schéma « donor cell ».

### 14.2.1 Le transfert par convection (ou « advection »)

Le flux de chaleur  $Q_A$ , (dont l'unité du système international est le Watt), apporté par convection, c'est-à-dire par la chaleur apportée ou perdue par le flux d'eau s'écrit :

- $Q_A = Q \cdot \rho C_W \cdot T_V$  si  $Q > 0$ , c'est-à-dire si le débit vient de  $V_V$  vers  $V$ .
- $Q_A = Q \cdot \rho C_W \cdot T$  si  $Q < 0$ , c'est-à-dire si le débit sort de  $V$  vers  $V_V$ .

soit la notation :  $Q_A = Q \cdot \rho C_W \cdot T_{V\epsilon}$  [1]

Avec :  $T_{V\epsilon} = T_V$  si  $Q > 0$   
 $T_{V\epsilon} = T$  si  $Q < 0$

### 14.2.2 Le transfert par conduction thermique

Le transfert par conduction thermique résulte du gradient de température. C'est la loi de Fourier (1822). Elle stipule que la densité de flux de chaleur est proportionnelle au gradient de température, soit :

$$q_e = -\lambda \cdot \text{Grad}(T) = -\lambda \cdot \frac{dT}{dx}$$

Avec :

$q_e$  = Densité de flux de chaleur (W/m<sup>2</sup>)  
 $\lambda$  = Conductivité thermique (W/m/K = Watt par mètre et par degré)

La conduction thermique de l'eau et de la matrice poreuse sont différentes. La conductivité  $\lambda_A$  de l'aquifère est une pondération de ces deux conductivités.

Dans MARTHE, on considère classiquement que les pores se comportent comme des tubes, orientés dans le sens de l'écoulement, à l'intérieur de la matrice. Les conductivités  $\lambda_M$  de la matrice et  $\lambda_W$  des pores saturés sont donc en parallèle et s'ajoutent proportionnellement à leurs volumes relatifs :  $\lambda_W$  s'applique à la teneur en eau  $\theta$  (on néglige la conductivité de l'air) et  $\lambda_M$  s'applique à la matrice c'est-à-dire au volume relatif  $(1 - \omega)$ . On en déduit :

$$\lambda_A = \theta \cdot \lambda_W + (1 - \omega) \cdot \lambda_M$$
 [2]

La conductivité thermique  $\lambda_A$  de l'aquifère au repos est donc une moyenne pondérée entre la conductivité thermique du minéral de la matrice poreuse (de l'ordre de 1 à 5 W/m/K) et la conductivité thermique de l'eau (0.598 W/m/K).

La conductivité thermique de l'aquifère au repos  $\lambda_A$  est augmentée par le coefficient de dispersion thermique dû à l'hétérogénéité du champ de vitesse : on obtient ainsi un tenseur de conductivité thermique  $\lambda_{AG}$  qui est la « conductivité globale équivalente » de l'aquifère.

Pour simplifier la rédaction, en considérant une vitesse réelle de module  $u$  uniforme, on peut écrire :

$$\lambda_L = \lambda_A + \alpha_L \cdot \rho C_W \cdot u$$
 (Composante longitudinale) [3]

$$\lambda_T = \lambda_A + \alpha_T \cdot \rho C_W \cdot u$$
 (Composante transversale) [4]

On remarque que, par cohérence avec la formulation utilisée pour le transport de masse, dans cette formulation la dispersivité thermique est multipliée par la vitesse de pore (ou vitesse de filtration)  $u$ , et non pas par la vitesse de Darcy.

Attention : On voit parfois dans la littérature, une autre formulation, avec la vitesse de Darcy au lieu de la vitesse de pore, mais la dispersivité thermique est alors définie différemment.

Pour calculer le flux de chaleur  $Q_C$ , échangé par conduction thermique il est nécessaire de connaître les composantes de la conductivité thermique  $\lambda_{AG}$  « moyenne » entre le volume  $V_V$  et le volume  $V$ .

On obtient ces composantes « moyennes » de la conductivité thermique par la moyenne harmonique des conductivités de chacun des 2 volumes, pondérées par les  $dy \cdot dz / dx$ . Ce calcul est identique à la pondération des perméabilités de 2 mailles adjacentes.

Soit une maille voisine située à la distance  $L$  et à température  $T_L$  : en considérant uniquement la composante longitudinale, dans un but de simplification de la rédaction, le flux de chaleur  $Q_C$ , provenant de cette maille à travers la surface d'échange  $A$  s'écrit :

$$Q_C = \lambda_{AG} \cdot A \cdot (T_V - T) / L \quad [5]$$

### 14.2.3 Terme source

Dans le volume de référence  $V$ , on peut introduire un flux de chaleur  $Q_I$ . Ce flux est positif s'il est injecté, ou négatif s'il est prélevé. On note  $q_e$  ce flux de chaleur par unité de volume d'aquifère.

### 14.2.4 Terme de stockage

En régime permanent de transport le terme de stockage est égal à 0.

En régime de transport transitoire, le flux de stockage de chaleur  $Q_S$ , est la variation de quantité de chaleur divisée par la durée  $dt$  d'un pas de temps de calcul.

$$Q_s = \frac{E - E_p}{dt}$$

$$Q_s = \frac{(\rho C_A \cdot T - \rho C_{AP} \cdot T_p) \cdot Vol}{dt} \quad [6]$$

Avec :

$T_p$  = Température au début du pas de temps.

$\rho C_A = \theta \cdot \rho C_W + (1 - \omega) \cdot \rho C_M$   
= Capacité thermique volumique de l'aquifère en fin de pas de temps

$\rho C_{AP} = \theta_p \cdot \rho C_W + (1 - \omega) \cdot \rho C_M$   
= Capacité thermique volumique de l'aquifère en début de pas de temps

$\theta_p$  = Teneur en eau volumique au début du pas de temps

- $E$  = Quantité de chaleur dans le volume de référence à la fin du pas de temps  
(C'est l'énergie thermique)  
 $E_p$  = Quantité de chaleur dans le volume de référence au début du pas de temps

Si la teneur en eau ne varie pas au cours du pas de temps, la capacité thermique volumique de l'aquifère  $\rho C_A$  ne varie pas, et on obtient l'expression plus simple.

$$Q_s = \rho C_A \cdot (T - T_p) \cdot Vol/dt \quad [7]$$

#### 14.2.5 Équation de conservation de la chaleur

L'équation de conservation de la chaleur s'écrit :

Flux entrant par Advection + Flux entrant par Conduction + Flux Injecté = Flux de variation de la quantité de chaleur :

$$Q_A + Q_C + Q_I = Q_S \quad [8]$$

Soit en faisant la somme des composantes des 6 directions  $V$  (Nord, Est, Sud, Ouest, Haut et Bas), et en utilisant le terme de stockage de l'équation [7] :

$$\Sigma_V [Q \cdot \rho C_W \cdot T_{V\epsilon}] + \Sigma_V \left[ \lambda_{AG} \cdot A \cdot \frac{(T_V - T)}{dx} \right] + [Q_I] = \rho C_A \cdot Vol \cdot \frac{(T - T_p)}{dt} \quad [9]$$

Plus formellement, en divisant par la section  $A$  et par  $dx$ , et en faisant apparaître la vitesse de Darcy  $q = Q / A$ , l'équation générale de conservation de la chaleur s'écrit :

$$\text{div}[\lambda_{AG} \cdot \text{Grad}(T)] - \text{div}(\rho C_W \cdot q \cdot T) + q_e = \rho C_A \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \quad [10]$$

Soit en 1D dans la direction  $ox$  :

$$\frac{\partial^2 (\lambda_{AG} \cdot T)}{\partial x^2} - \frac{\partial (\rho C_W \cdot q \cdot T)}{\partial x} + q_e = \frac{\partial (\rho C_A \cdot T)}{\partial t} \quad [11]$$

Soit plus simplement dans le cas de coefficients uniformes :

$$\lambda_{AG} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \rho C_W \cdot q \cdot \frac{\partial T}{\partial x} + q_e = \rho C_A \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \quad [12]$$

#### 14.2.6 Résolution de l'équation de conservation de la chaleur

Le code MARTHE commence par effectuer un calcul d'hydraulique pour déterminer le champ de teneur en eau  $\theta$ , les vitesses de Darcy  $q$ , les vitesses réelles  $u$  et les débits d'échanges.

L'équation [9] représente alors un système algébrique linéaire non symétrique dont les seules inconnues sont les températures  $T$  dans toutes les mailles. Le terme de gauche, comme pour le transport de masse, correspond à une matrice creuse faisant intervenir 19 diagonales en 3D. Ce système est facile à résoudre par une méthode de gradients conjugués non symétriques, par exemple la méthode Orthomin.

Si le calcul hydrodynamique dépend du champ de température, par exemple si la viscosité et/ou la densité du fluide dépendent de la température, il faudra à chaque pas de temps



résoudre itérativement l'équation de l'hydrodynamique (avec la viscosité et la densité actualisées) puis résoudre l'équation du transfert thermique, (avec les vitesses et débits actualisés). Ce calcul de couplage itératif est nécessaire uniquement si les interactions sont fortes, c'est-à-dire s'il y a de fortes variations de température.

#### 14.2.7 Prise en compte des épontes thermiques

Les épontes thermiques sont des zones dans lesquelles on considère que les écoulements de fluide sont négligeables (par exemple dans de la roche saine non aquifère). Dans le code MARTHE il n'y a pas de traitement particulier des épontes. Il suffit de donner une très faible perméabilité à ces zones. D'un point de vue numérique, on peut également imposer la charge, à une valeur arbitraire, dans ces zones, pour éviter de la calculer et éviter ainsi des éventuelles difficultés numériques si on choisit une perméabilité vraiment très faible.

On verra cependant plus bas qu'il est possible d'utiliser une solution analytique approchée, la solution de Vinsome and Westerveld (1980), dans les épontes thermiques ce qui permet de réduire la dimension du domaine et d'accélérer significativement les calculs.

#### 14.2.8 Comparaison avec l'équation du transfert de masse

L'équation du transfert de masse s'écrit, en notant  $D$  le coefficient de diffusion et  $C$  la concentration :

$$\omega \cdot D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - q \cdot \frac{\partial C}{\partial x} + q_m = \omega \cdot \frac{\partial C}{\partial t} \quad [13]$$

Soit en divisant par  $\rho C_A$  l'équation [12] du transfert thermique et par  $\omega$  l'équation [13] du transfert de masse :

$$\frac{\lambda_{AG}}{\rho C_A} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{\rho C_W}{\rho C_A} \cdot q \cdot \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{q_e}{\rho C_A} = \frac{\partial T}{\partial t} \quad [14]$$

$$D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{q}{\omega} \cdot \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{q_m}{\omega} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad [15]$$

L'équation thermique [14] est identique à l'équation du transfert de masse [15] si on pose :

$$D_{th} = \frac{\lambda_{AG}}{\rho C_A} = \text{Diffusivité thermique équivalente} \quad [16]$$

$$\omega_{th} = \frac{\rho C_A}{\rho C_W} = \text{Porosité équivalente} \quad [17]$$

On peut également définir la vitesse thermique équivalente :

$$u_{th} = \frac{q}{\omega_{th}}$$

$$u_{th} = \frac{\rho C_W}{\rho C_A} \cdot q = \frac{\rho C_W}{\rho C_A} \cdot \omega_{vrai} \cdot u = \text{Vitesse thermique} \quad [18]$$

On peut également définir un débit massique équivalent  $Q_{\text{masse\_th}}$  :

$$\frac{q_{\text{masse\_th}}}{\omega_{\text{th}}} = \frac{q_{\text{chaleur}}}{\rho C_A} \quad \text{avec} \quad \omega_{\text{th}} = \frac{\rho C_A}{\rho C_W}$$

$$Q_{\text{masse\_th}} = \frac{Q_{\text{chaleur}}}{\rho C_W} \quad [19]$$

On peut également définir le coefficient de retard thermique équivalent  $R_{\text{th}}$  :

$$R_{\text{th}} = \frac{u_{\text{vrai}}}{u_{\text{th}}}$$

$$R_{\text{th}} = \frac{\rho C_A}{\rho C_W} \cdot \frac{1}{\omega_{\text{vrai}}} = \frac{\omega_{\text{th}}}{\omega_{\text{vrai}}} = \text{Retard thermique équivalent} \quad [20]$$

On peut également définir un nombre de Péclet numérique  $Pe$  et un nombre de Courant numérique  $Cr$  :

$$Pe = \frac{u_{\text{th}} \cdot dx}{D_{\text{th}}} \Rightarrow Pe = \frac{\rho C_W}{\lambda_{AG}} \cdot q \cdot dx = \frac{\rho C_W}{\lambda_{AG}} \cdot \omega_{\text{vrai}} \cdot u \cdot dx \quad [21]$$

$$Cr = \frac{u_{\text{th}} \cdot dt}{dx} \Rightarrow Cr = \frac{\rho C_W}{\rho C_A} \cdot \frac{U \cdot dt}{dx} \quad [22]$$

Compte tenu que le nombre adimensionnel qui apparaît en 1D pour le phénomène de conduction est :

$$z = \frac{x}{\sqrt{4D_{\text{th}} \cdot t}} \quad [23]$$

On déduit le temps caractéristique  $t_D$ , ou réciproquement la distance caractéristique  $x_D$  correspondant à l'inertie relative à la seule conduction :

$$t_D = \frac{x^2}{4D_{\text{th}}} \quad [24]$$

$$x_D = \sqrt{4D_{\text{th}} \cdot t} \quad [25]$$

#### 14.2.9 Comparaison avec l'équation de l'hydrodynamique (quand la conduction est prépondérante, c'est-à-dire quand la vitesse est négligeable)

En notant  $K$  la perméabilité à l'eau et  $S_s$  le coefficient d'emmagasinement spécifique, l'équation de l'hydrodynamique, permettant de calculer le champ de charge hydraulique  $H$ , et le champ de débit de fluide s'écrit :

$$K \cdot \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} = S_s \frac{\partial H}{\partial t} \quad [26]$$

En comparant avec l'équation [12] du transfert thermique, dans laquelle on fixe  $q = 0$ , on identifie immédiatement :

$$K_{\text{th}} = \lambda_{AG} \quad [27]$$

$$(S_s)_{th} = \rho C_A \quad [28]$$

$$Q_{th} = Q_{chaleur} \quad [29]$$

En conduction pure, quand la vitesse est négligeable, il est donc possible d'utiliser les solutions de l'hydrodynamique, par exemple la solution de Theis pour décrire l'injection d'un flux de chaleur dans un puits.

#### 14.2.10 Résumé des notations complémentaires pour le calcul de transfert thermique

- $V$  = Volume du volume élémentaire de référence. [L<sup>3</sup>]
- $V_V$  = Volume d'un volume élémentaire voisin. [L<sup>3</sup>]
- $A$  = Surface d'échange entre les volumes  $V$  et  $V_V$ . [L<sup>2</sup>]
- $L$  = Distance entre les centres des 2 volumes. [L]
- $Q$  = Débit d'échange ( $> 0$  si entrant dans le volume de référence). [L<sup>3</sup>T<sup>-1</sup>]
- $q$  = Vitesse de Darcy =  $Q / A$  [LT<sup>-1</sup>]
- $Q_A$  = Flux de chaleur apporté par convection (advection). [W]
- $Q_C$  = Flux de chaleur apporté par conduction. [W]
- $Q_I$  = Flux de chaleur injectée. [W]
- $Q_S$  = Flux de chaleur stockée. [W]
- $\lambda_A$  = Conductivité thermique de l'aquifère au repos. [W/m/K]
- $\lambda_{AG}$  = Conductivité thermique globale (équivalente) l'aquifère. [W/m/K]
- $\rho C_A$  = Capacité thermique de l'aquifère. [J/m<sup>3</sup>/K]
- $\rho C_{AP}$  = Capacité thermique de l'aquifère en début de pas de temps. [J/m<sup>3</sup>/K]
- $dt$  = Durée d'un pas de temps. [T]
- $\theta_p$  = Teneur en eau volumique au début du pas de temps. [-]
- $T_p$  = Température au début du pas de temps. [°C ou °K]
- $C$  = Concentration. [ML<sup>-3</sup>]
- $D$  = Coefficient de diffusion de masse [L<sup>2</sup>T<sup>-1</sup>]
- $Pe$  = Nombre de Péclet. [-]
- $Cr$  = Nombre de Courant. [-]
- $\omega_{th}$  = Porosité thermique (équivalente). [-]
- $D_{th}$  = Coefficient de diffusion thermique. [L<sup>2</sup>T<sup>-1</sup>]
- $u_{th}$  = Vitesse thermique. [LT<sup>-1</sup>]
- $R_{th}$  = Retard thermique. [-]
- $t_D$  = Temps caractéristique pour la conduction. [T]
- $x_D$  = Distance caractéristique pour la conduction. [L]
- $Q_{masse\_th}$  = Débit massique équivalent au débit de chaleur. [MT<sup>-1</sup>]



## 15 Modélisation du transfert thermique avec le code de calcul MARTHE

La [liste des champs et des fichiers](#) de MARTHE pouvant être utilisés pour le transfert de chaleur est donnée Figure 43.

### 15.1 Équivalence des champs et paramètres entre transport de masse et transfert thermique

Pour faciliter la modélisation du transfert thermique aux utilisateurs qui connaissent la modélisation du transport de masse, on présente Figure 36 les équivalences entre les champs et paramètres du transfert thermique et ceux du transport de masse.

Transport de masse	Transfert thermique	Unité MARTHE
Concentration	Température	°C
Concentration extérieure	Température extérieure	°C
Imposer la concentration => Concentration extérieure = 9999	Imposer la température => Température extérieure = 9999	[-]
Concentration de la recharge	Température de la recharge	°C
Concentration sortante	Température sortante	°C
Flux de masse (kg/s)	Flux de chaleur) (Flux d'énergie thermique)	Joule par unité de temps
Dirac de masse (kg)	Dirac de quantité de chaleur (Énergie thermique)	Joule
Perméabilité	Conductivité thermique	W/m/K
Coefficient d'emmagasinement	Capacité thermique (équivalence approximative)	
Asservir la Température	Asservir la Concentration	
<< Pas d'équivalence >>	Épontes thermiques	

Figure 36 – Équivalence des champs et paramètres entre transport de masse et transfert thermique.

Température :	C'est la température du fluide, c'est-à-dire de l'eau. Elle est exprimée degrés Celsius (°C).
Température extérieure :	C'est la température d'un éventuel apport d'eau dans l'aquifère, soit par injection artificielle, soit par des limites à potentiel imposé.
Température de la recharge :	C'est la température de la recharge de l'aquifère : dans MARTHE, elle concerne uniquement la recharge ou l'infiltration par les pluies et ne s'applique pas aux flux

d'irrigation.
---------------

## 15.2 Les conditions aux limites pour les calculs de transfert thermique

Les conditions aux limites pour les calculs de transfert thermique sont indépendantes des conditions aux limites pour les calculs du champ de charge hydraulique.

Il y a deux types de conditions aux limites, et on peut de plus introduire des termes source dans n'importe quelle maille du domaine.

### 15.2.1 Température imposée

Il est possible d'imposer la température dans n'importe quelle maille du domaine. L'imposition d'une température dans une maille revient à introduire le flux de chaleur (qui sera calculé par MARTHE) nécessaire au maintien de cette température compte tenu de la température des mailles voisines. Pour imposer la température dans une maille, il suffit, après avoir défini la température dans cette maille, de définir une « température extérieure » égale à la valeur code : 9999.

Remarque : Cette démarche est analogue à celle utilisée par le code de calcul MARTHE pour imposer une charge hydraulique en fixant un « débit extérieur » égal à la valeur code : 9999.

### 15.2.2 Limite étanche en température

Une telle condition à la limite correspond à une limite à travers laquelle il ne peut y avoir aucun échange thermique. Par exemple, en bordure d'un aquifère limité par un milieu imperméable ou sur les parois latérales d'un tube de forage. Une telle limite est automatique dans le code de calcul MARTHE (c'est la limite par défaut).

### 15.2.3 Épentes thermiques simulées par la solution analytique de Vinsome

Dans le cas d'épentes thermiques homogènes de très grandes épaisseurs, le code de calcul MARTHE permet d'utiliser la méthode de Vinsome et Westerveld (1980) pour effectuer les calculs beaucoup plus rapidement. Cette méthode utilise une solution analytique approchée dans les épentes thermiques, en supposant une épaisseur infinie. L'hypothèse consiste en particulier à supposer que les échanges entre une épente thermique et l'aquifère en contact, se font de manière prépondérante perpendiculairement à l'aquifère. La méthode analytique fait intervenir une seule couche d'épente thermique de chaque côté de l'aquifère et évite ainsi une discrétisation fine de ces épentes.

Il est ainsi possible de réduire considérablement le nombre de mailles (le nombre de couches) pour simuler les épentes thermiques, quasiment sans perte de précision. Les calculs nécessitent donc beaucoup moins de mémoire et sont beaucoup plus rapides.

Remarque 1 : Cette solution est moins précise si les épentes thermiques sont cylindriques.

Remarque 2 : Dans MARTHE, il faut définir un « profil d'utilisation avancée » pour accéder à cette fonctionnalité.

L'utilisation de cette fonctionnalité d'éponte thermique analytique se fait de la manière suivante :

- On choisit la fonctionnalité par un paramètre du fichier des « Paramètres généraux » au paragraphe « [Température, effets thermiques](#) » : paramètre « [solution analytique \(Vinsome\)](#) ».
- Il suffit généralement d'avoir une seule couche d'éponte thermiques au-dessus de l'aquifère et une seule couche d'éponte thermique en dessous de l'aquifère. Si le domaine est symétrique, on peut simuler uniquement  $\frac{1}{2}$  espace, il suffit alors d'une seule couche d'épontes.
- Dans toutes les mailles d'une couche d'éponte (thermique) => Il faut donner la valeur « 1 » au champ d'« Indice d'Éponte thermique » (objet « IND\_EPONTE »). On affectera facilement la valeur « 1 », lors de l'initialisation en fin du fichier des paramètres généraux, au moyen d'une modification de l'objet « IND\_EPONTE » par « COUCHE » (Figure 37 et Figure 38).

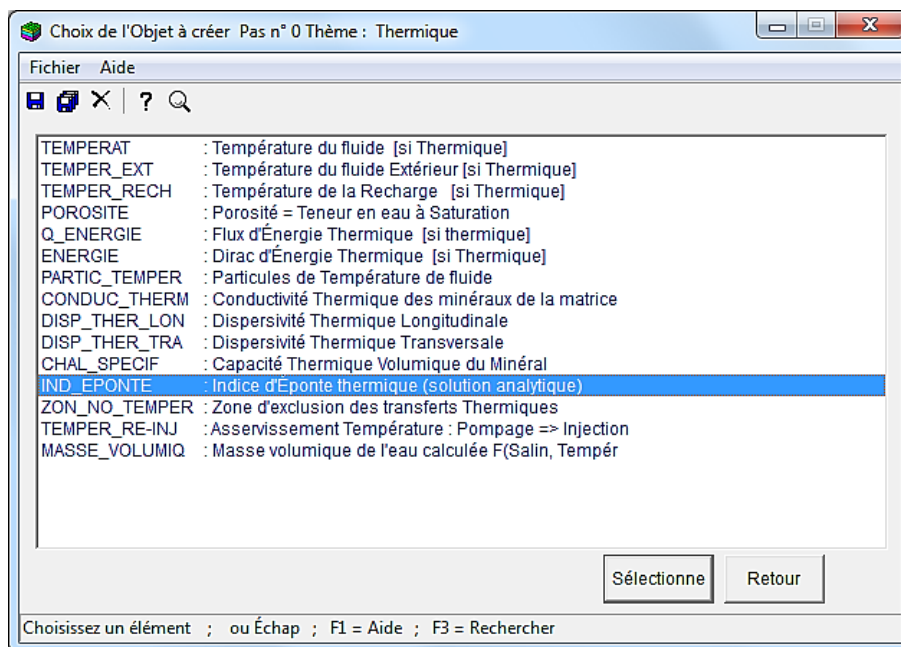


Figure 37 – Affectation d'un indice d'éponte thermique (lors de l'initialisation).

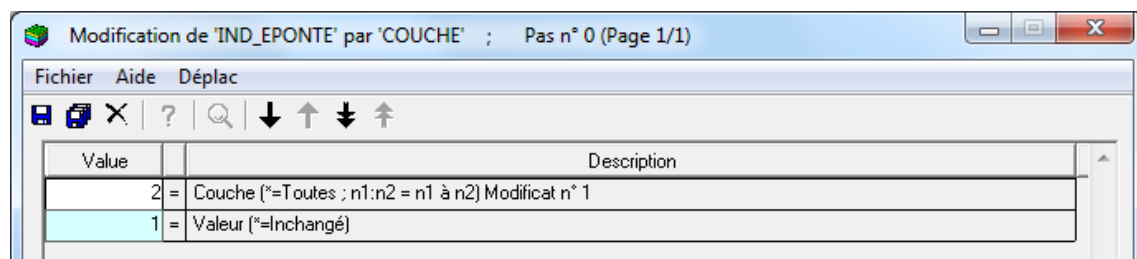


Figure 38 – Définition d'un « indice d'éponte thermique analytique » dans la couche n°2.

Un exemple d'utilisation de cette fonctionnalité est présenté dans le chapitre des [applications de transfert thermique](#) et dans le « [Didacticiel de MARTHE v7.5](#) », rapport [BRGM/RP-64997-FR](#) (Thiéry, 2015a).

## 15.3 Termes source

### 15.3.1 Flux de chaleur

En toute maille du domaine, il est possible d'imposer un flux de chaleur : champ « Q\_ENERGIE », d'extension de fichier [.qener].

Dans MARTHE, ce flux de chaleur est exprimé en Joule par unité utilisateur de temps.

Attention : Ce flux n'est pas donné en Watt.

Il est également possible, au moyen d'un paramètre du fichier des « paramètres généraux », de choisir d'exprimer le flux de chaleur : par mètre carré de surface (horizontale) de maille, donc en  $\text{Joule/m}^2/\text{unité utilisateur de temps}$ .

Ce flux de chaleur, comme la plupart des champs de MARTHE, peut être défini au choix :

- par grille ;
- par couche ;
- par zone géométrique ;
- par zone d'infiltration ;
- par zone d'irrigation ;
- par maille.

Remarque 1 :

Il n'est pas possible d'imposer un flux de chaleur dans une maille dont on a imposé la température : ce serait une contradiction.

Remarque 2 :

Avec les méthodes de transport TVD et DF, il est possible d'appliquer un flux de chaleur négatif qui correspond à un prélèvement de chaleur, par une pompe à chaleur par exemple, par une réaction endothermique, ou bien par injection d'eau à température négative. Ceci n'est pas possible directement avec les méthodes de transport à particules (MOC et RW).

### 15.3.2 Ajout instantanée d'une quantité de chaleur : (Dirac)

En n'importe quelle maille du domaine, il est possible d'introduire un apport instantané d'une quantité de chaleur, sous forme d'un « Dirac » : champ « ENERGIE » d'extension de fichier [.energ].

Dans MARTHE, cette quantité de chaleur apportée (ou prélevée) est exprimée en Joule.

Il est cependant possible, au moyen d'un paramètre du fichier des « paramètres généraux » de choisir d'exprimer les ajouts de quantité de chaleur : par mètre carré de surface (horizontale) de maille.

Cet apport de quantité de chaleur peut être défini par grille, par zone, par couche ou par maille.

Comme pour les flux de chaleur, il n'est pas possible d'imposer un apport instantané d'une quantité de chaleur dans une maille à température imposée.



Dans les calculs de transfert par la méthode TVD ou DF le débit d'injection de chaleur peut être négatif, alors qu'il doit être positif dans les calculs par une méthode à particules (MOC).

Dans les méthodes de transfert à particules, méthode MOC ou RW, un ajout instantané d'une quantité de chaleur correspond à l'ajout instantané, en début de pas de temps, du nombre de particules correspondant à la quantité de chaleur ajoutée. Ceci est indépendant de la durée du pas de temps. Dans les méthodes TVD et DF, un apport correspond à un débit de chaleur réparti sur la durée du pas de calcul.

**Remarque :** Dans le code de calcul MARTHE, tous les champs définis à un moment donné restent actifs jusqu'à ce qu'on les désactive. L'ajout instantané d'une quantité de chaleur (Dirac) est une exception à cette règle puisque c'est un champ discontinu. Si on apporte une quantité de chaleur en début de calcul, ou à une date donnée, cet apport sera pris en compte uniquement pour ce pas de temps.

### 15.3.3 Température extérieure

En toute maille du domaine on peut définir la température du fluide extérieur, appelée « température extérieure ». Elle exprimée en °C.

C'est la température à laquelle se trouve l'eau qui rentre dans le domaine (cette température extérieure, comme tous les champs de MARTHE, est par défaut égale à 0).

Cette eau peut rentrer :

- Par un débit injecté (dans un forage par exemple) ;
- Par un débit entrant dans une maille à charge hydraulique imposée (maille à potentiel hydrodynamique imposé).

Si une maille ne reçoit aucun débit fluide de l'extérieur, ou bien si elle est soumise à un débit sortant (pompage, exportation par une limite), la température extérieure n'est pas utilisée.

Il convient de remarquer qu'un débit entrant dans une maille à une température extérieure fixée ne correspond pas à une température imposée dans la maille (sauf en régime permanent et en l'absence de conduction et de dispersion).

L'intérêt de ce type de terme source est d'être physique et d'éviter d'imposer une température ou un flux de chaleur si on ne sait pas *a priori* si le débit échangé avec l'extérieur sera entrant ou sortant. Le sens du débit d'échange n'est en effet pas toujours évident, par exemple en zone non saturée ou bien à proximité de la mer ou encore en régime hydrodynamique transitoire.

La température extérieure (champ TEMPER\_EXT, d'extension de fichier [.temex]) peut, comme les autres champs du code de calcul MARTHE, être définie par grille, par couche, par zone ou par maille. Une température extérieure égale à 9999 est un code permettant d'imposer la température de la maille à sa valeur définie en début de pas de temps.

### 15.3.4 Asservissement de la température d'injection

Quand on injecte par un puits d'injection de l'eau dans une maille du domaine, la température d'injection peut être asservie à la température d'un point de pompage (puits de production). En effet dans le cas d'une pompe à chaleur par exemple, la température de l'eau réinjectée est égale à la température de l'eau pompée diminuée d'une constante. La température des puits de production peut évoluer au cours du calcul, elle n'est donc pas connue a priori.

Une fonctionnalité de MARTHE permet de prendre en compte ce phénomène.

Un exemple est présenté dans cette notice, dans le chapitre des [applications de transfert thermique](#).

**Remarque :** Cette fonctionnalité est opérationnelle uniquement lors des calculs de transfert thermique en régime transitoire.

Un « asservissement » de température est défini par :


- Un « point cible » correspondant à un puits d'injection, qui devrait a priori avoir un débit d'injection (donc positif) au moins à certains pas de temps.
- Un « point source » correspondant généralement à un point de pompage (mais pour la modélisation ce n'est pas obligatoire : il peut ne pas y avoir de débit pompé).
- Une différence de température « Injection moins Production » c'est-à-dire « cible moins source » qui peut être  $> 0$  si on rejette de l'eau à une température supérieure (climatisation) ou bien  $< 0$  si on rejette de l'eau à une température inférieure (chauffage). La différence peut également être égale à 0.

Les caractéristiques de cette fonctionnalité d'asservissement de température sont les suivantes :

- On peut définir un grand nombre d'asservissements, c'est-à-dire de couples puits de production – puits d'injection (500 asservissements au maximum dans la version courante).
- Il est possible d'avoir plusieurs puits d'injection asservis à un même puits de production.
- Le point cible peut être identique au point source : par exemple dans le cas de doublets avec pompage et injections alternés selon la saison, ou bien dans le cas d'un puits unique avec injection et pompage alternés.
- L'asservissement peut être modifié au cours du temps, c'est-à-dire qu'à partir d'une certaine date on peut modifier la différence de température. On peut également modifier le puits de production associé. On peut même supprimer l'asservissement : en définissant des coordonnées hors domaine pour le puits de production (colonne n°0, ligne n°0 par exemple).

À chaque pas de temps de modèle, la température de l'eau réinjectée « TEMPERAT\_EXT » sera automatiquement égale à la température « TEMPERAT » calculée à la fin du pas de temps précédent au puits de production (« source ») associé, augmenté de la « différence de température ». S'il y a un débit injecté au puits d'injection, l'eau sera injectée à cette température TEMPERAT\_EXT.

$$\text{TEMPERAT\_EXT\_injection} = \text{TEMPERAT\_production\_associée} + \text{Diff\_Température}$$

Pour définir un asservissement de température, on procède de la manière suivante : On appuie sur l'icône , pour arriver au menu des paramètres non maillés. On sélectionne alors « Asservissement Température pompage => injection ». (Figure 39).

On voit alors apparaître un tableur pour définir les paramètres de l'asservissement (Figure 40).

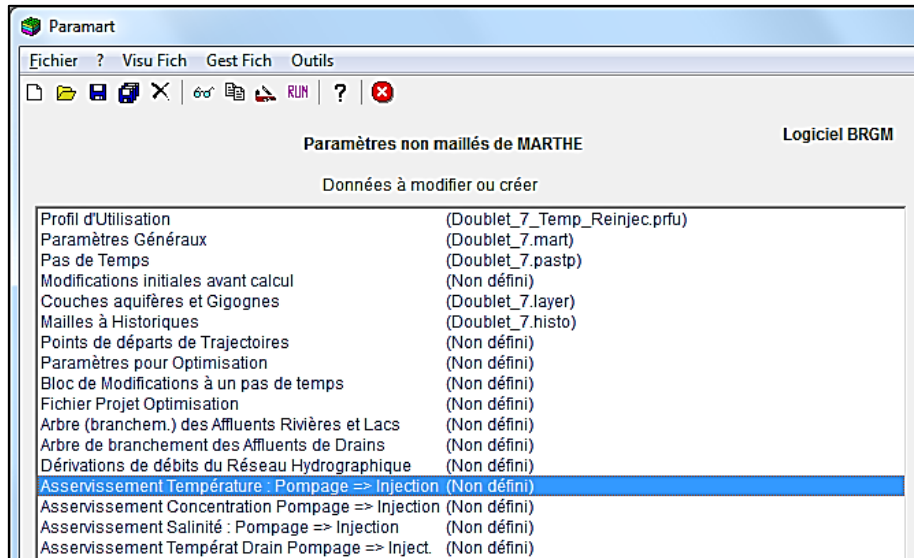


Figure 39 – Création ou modification d'un fichier d'asservissements de température.

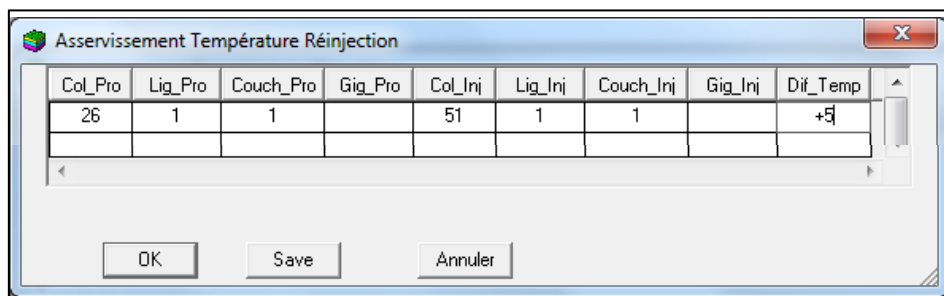


Figure 40 – Définition des paramètres de l'asservissement de température.

Dans l'exemple de la Figure 40 : le point de pompage (production) est situé dans la maille de coordonnées (Colonne = 26, Ligne = 1, Couche = 1) et le puits d'injection est situé dans la maille de coordonnées (Colonne = 51, Ligne = 1, Couche = 1). L'eau est injectée à une température 5°C plus chaude que celle de la maille du point de pompage.

Le tableur génère un petit fichier d'extension [.t\_reinj] définissant les paramètres des différents asservissements.

Un exemple de fichier d'asservissement généré pour 2 asservissements est présenté Figure 41.

```

Doublet_7 1/4 Injected Temperature connected to Production wells
26      1      1      0 = Production : Col, Lign, Couch, Gig
51      1      1      0 = Injection  : Col, Lign, Couch, Gig
+5 = Diff Température Injection - Production
25      1      1      0 = Production : Col, Lign, Couch, Gig
77      1      1      0 = Injection  : Col, Lign, Couch, Gig
+12.5 = Diff Température Injection - Production
*** Fin du fichier Asservissement Températ. Injection ***
    
```

Figure 41 – Exemple de fichier d'asservissement de température (2 asservissements).

La première ligne du fichier est un libellé descriptif ignoré par MARTHE, puis chaque asservissement est défini par 3 lignes :

- Ligne n°1 : colonne, ligne, (couche), (gigogne) de la maille contenant le puits de production associé.
- Ligne n°2 : colonne, ligne, (couche), (gigogne) de la maille contenant le puits de réinjection asservi.
- Ligne n°3 : Différence de débit = Injection - Production

Le nom de ce fichier d'asservissements apparaît dans le fichier projet de MARTHE [.rma], cependant pour voir apparaître ce nom dans les préprocesseurs, il faut dans le « profil d'utilisation » avoir choisi l'option « Utilisation avancée » (ou bien n'avoir pas défini de profil d'utilisation).

### Modification d'asservissements de température :

Si à un certain pas de temps, par exemple au pas de temps n°60, on veut introduire de nouveaux asservissements, ou modifier des asservissements existants, il suffit de créer un nouveau fichier d'asservissement, par exemple de nom « Asserv\_apres\_60\_mois.t\_reinj ». Si on a créé ce fichier avec le tableur intégré : il ne faut pas l'affecter au fichier projet [.rma], donc ne pas « sauvegarder le fichier projet ». En effet si on sauvegardait le fichier projet, ce nouveau fichier d'asservissement remplacerait le précédent dès le pas de temps n°0. Au pas de temps de modèle choisi, on définit alors le nom du fichier d'asservissements par l'objet « TEMPER\_RE-INJ » = « Asservissement Température » (Figure 42).

Le nouveau fichier d'asservissement remplace l'éventuel fichier déjà défini. Les éventuels asservissements existants existant préalablement sont annulés avant prise en compte du nouveau fichier.

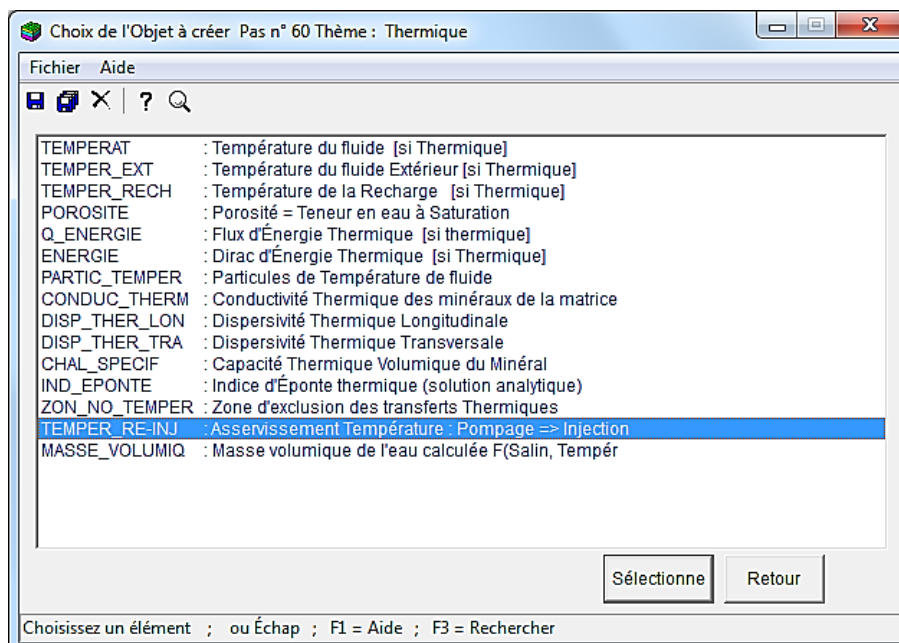


Figure 42 – Introduction d'un nouveau fichier d'asservissement de température au pas de temps n°60.

### 15.3.5 Température de la recharge

C'est la température de l'infiltration (ou de la recharge) dans les zones où elle est positive. Cette température ne s'applique qu'à l'infiltration. Elle ne s'applique pas à l'excès d'irrigation. En cas de besoin, il faudrait donc définir l'excès d'irrigation comme une recharge.

La température de la recharge (champ CONCEN\_RECH) est exprimée en °C. Elle peut être définie uniquement par zone d'infiltration. Elle ne peut pas être définie par maille. Il n'y a pas de fichier grille de température de la recharge.

#### Remarque 1 :

Il est possible de définir simultanément dans une même maille :

- un flux de chaleur ;
- une injection instantanée d'une quantité de chaleur ;
- une température du fluide extérieure ;
- une température de l'infiltration.

#### Remarque 2 :

En notant « Surf » la surface horizontale de la maille, « dt » la durée du pas de temps, « QI » le débit injecté dans une maille, « Infiltr » l'infiltration. On a les équivalences suivantes (sans tenir compte des unités) :

$$Q\_ENERGIE = QI . TEMPER\_EXT$$

$$QI . TEMPER\_EXT = Infiltr . Surf . CONCEN\_RECH$$

$$Q\_ENERGIE . dt = ENERGIE$$

## 15.4 Initialisation des champs

On définit en début de calcul une température initiale avec, en particulier, les mailles à température imposée. La température, exprimée en °C, est un champ, de nom « TEMPERAT » et d'extension de fichier [.tempe], qui peut éventuellement être changée en cours de calcul. Si le transport se fait par la méthode TVD ou DF, la température peut être négative. Si le transport se fait par particules (MOC ou RW), la température doit être positive ou nulle puisque le nombre de particules dans une maille (qui est obtenu en divisant la quantité de chaleur dans la maille par la quantité de chaleur portée par une particule) doit être positif.

## 15.5 Maillage

### 15.5.1 Liaisons étanches

Les liaisons étanches entre mailles utilisées lors des calculs hydrodynamiques (calcul du champ de charge hydraulique ou du champ de pression hydraulique) sont prises en compte dans les calculs de transport : il n'y a pas de conduction thermique, ni de convection, ni de dispersion entre deux mailles séparées par une liaison étanche.

### 15.5.2 Maillages contenant des sous-maillages gigognes

Les méthodes de transport DF, MOC et RW peuvent être utilisées avec des maillages gigognes. En revanche, la méthode TVD ne peut pas être utilisée avec des maillages gigognes.

### 15.6 Sous-pas de temps de calculs en ZNS

Les calculs hydrodynamiques en Zone Non Saturée (ZNS) font intervenir des pas de temps de calcul, avec un pas de temps minimal et un pas de temps maximal. Ces pas de temps de calcul variables ne sont pas uniquement internes au calcul du champ de charge hydraulique. Ils s'appliquent également au calcul du transport de masse et aux calculs de transfert thermique.

### 15.7 Les fichiers de données supplémentaires pour les calculs de transfert thermique

Les fichiers ou champs supplémentaires pouvant être utilisés pour les calculs de transfert thermique sont listés dans la Figure 43.

<u>Aquifère</u> :		
Porosité = Teneur en Eau à Saturation	:	POROSITE
Température du fluide (dans la nappe)	:	TEMPERAT
Température du fluide Extérieur	:	TEMPER_EXT
Température dans la Recharge [Ce n'est pas un fichier spatialisé]	:	TEMPER_RECH
Flux de chaleur	:	Q_ENERGIE
Dirac de quantité de Chaleur	:	ENERGIE
Conductivité Thermique des Grains de la matrice	:	CONDOC_THERM
Capacité thermique Volumique du Minéral	:	CHAL_SPECIF
Dispersivité Thermique Longitudinale spatialisée	:	DISP_THER_LON
Dispersivité Thermique Transversale spatialisée	:	DISP_THER_TRA
Asservissement Température : Pompage => Injection	:	TEMPER_RE-INJ
<u>Rivières</u> :		
Température dans la Rivière	:	TEMPER_RIVI
Température Extérieure de Rivière	:	TEMP_EXT_RIVI
Flux de Chaleur dans la Rivière	:	Q_ENERG_RIVI
Dirac de quantité de Chaleur dans la Rivière	:	ENERG_RIVI
<u>Drains</u> :		
Température de Drain/Conduit	:	TEMPER_DRAIN
Température Extérieure de Drain/Conduit	:	TEMP_EXT_DRAI
Flux de Chaleur de Drain/Conduit	:	Q_ENERG_DRAI
Dirac de quantité de Chaleur de Drain/Conduit	:	ENERG_DRAIN
Asservissement Température Drain : Pompage => Injection :		
Porosité des Drains_Conduits si calculs en « Zone Non Saturée »	:	POROSI_DRAIN
<u>Autres</u>		
Index d'exclusion du transfert thermique	:	ZON_NO_TEMPER
Particules de quantité de Chaleur pour Température	:	PARTIC_TEMPER

Figure 43 – Liste des fichiers (et des champs) relatifs au transfert thermique.

## 15.8 Sauvegarde des résultats de calcul

### 15.8.1 Champs calculés

À n'importe quel pas de temps, il est possible de sauvegarder le champ de température calculée sous forme de « grilles Marthe ». La méthode de sélection est identique à celle qui est utilisée pour sauvegarder des champs lors des calculs d'hydrodynamique :

Sélectionner l'objet : TEMPERAT (par exemple).  
Puis sélectionner l'action : EDITION

Les grilles Marthe sélectionnées sont sauvegardées, en clair ou en binaire, dans le fichier « chasim.out ». En outre, si le domaine est monodimensionnel, les valeurs apparaissent en format libre dans le fichier séquentiel « chasimsq.prn », importable directement dans Excel® (ou un tableur équivalent), et également dans le fichier « chasimsq.out ».

Les champs de résultats qui peuvent être sauvegardés sont les suivants :

- TEMPERAT = Température du fluide (en °C)
- Q\_ENERGIE = Flux de Chaleur.  
C'est le flux de chaleur calculé dans les mailles à température imposée ou aux points d'injection.
- ECH\_CHAL\_FACE = Flux de chaleur échangé par chaque face des mailles.
- VAR\_TEMPERAT = Différence de température par rapport à la température initiale : (accessible en sélectionnant le champ « TEMPERAT »).
- MASSE\_VOLUMIQ = Masse volumique du fluide, en kg/m<sup>3</sup> (fonction de la température et de la salinité).
- QENERG\_RESID = Flux de chaleur résiduel, pour contrôler la convergence.

Également, dans les modélisations avec réseau hydrographique (rivières) :

- TEMPER\_RIVI = Température dans les tronçons de Rivière (en °C).
- Q\_ENERG\_RIVI = Flux de Chaleur à l'aval des tronçons de Rivière.
- Flux de Chaleur échangé Nappe->Rivière dans les tronçons  
Positif quand le flux va de la nappe vers la rivière.

Également, dans les modélisations avec réseau de drains-conduits.

- TEMPER\_DRAIN = Température dans les Drain-Conduits (en °C).
- Q\_ENERG\_DRAI = Flux de Chaleur à l'aval des tronçons de Drains-Conduits.
- Flux de Chaleur échangé Nappe->Drain dans les tronçons  
Positif quand le flux va de la nappe vers le drain-conduit.

Les flux de chaleur sont tous exprimés en Joule par unité utilisateur de temps.

### 15.8.2 Champ du flux de chaleur calculé

#### **Champ du flux de chaleur calculé dans chaque maille.**

C'est le flux de chaleur échangé avec l'extérieur du domaine : Q\_ENERGIE.

Le flux de chaleur est exprimé en Joule par unité utilisateur de temps. Il est sauvegardé dans le fichier « debsim.out ». Une valeur positive indique un flux de chaleur entrant ; une valeur

négative indique un flux de chaleur sortant. Le flux de chaleur apparaît uniquement pour les mailles suivantes :

- Mailles avec injection ou prélèvement de chaleur ;
- Mailles à température imposée ;
- Mailles limites du domaine à charge hydraulique imposée.

### ***Flux de chaleur échangés par les faces de chaque maille***


Les flux de chaleur échangés par les 4 ou 6 faces de la maille, ainsi que les termes source, sont sauvegardés dans un fichier séquentiel de nom « flux\_mass.out ».

Les flux de chaleur échangés sont exprimés en Joule par unité utilisateur de temps. Le terme source comprend les injections ou prélèvements de chaleur.

La sauvegarde des flux de chaleur échangés par face est possible uniquement avec les méthodes de transport faisant intervenir des différences finies (TVD, DF ou MOC). Avec la méthode MOC, le bilan correspond uniquement à la phase dispersion par différences finies.

### **15.8.3 Mailles à historiques**

Il est possible de sélectionner certaines mailles du domaine modélisé, pour lesquelles on souhaite sauvegarder l'évolution des valeurs de température (champ « Températ ») ou de température dans le débit sortant (champ « Tempéra\_Sort »). Comme pour les historiques de charge hydraulique, de débit ou de teneur en eau.

La sélection des mailles et des champs est réalisée par le module de « Gestion des données non maillées », accessible par le bouton  de la barre d'outils du bas du cadre de WinMarthe. On choisit alors la ligne « Mailles à Historiques ».

Un fichier des mailles à historiques, d'extension [.histo] est alors créé. Il contient la définition des champs et des mailles choisies.


Les historiques calculés des mailles sélectionnées sont sauvegardés dans les fichiers « historiq.prn » et « historiq.out » habituels.

On peut sauvegarder des historiques de :

• Température calculée	: Champ : Températ
• Température dans le débit sortant	: Champ : Tempéra_Sort
• Température dans un tronçon de rivière	: Champ : Tempér_Rivi
• Température dans un tronçon de drain	: Champ : Tempér_Drain
• Flux de chaleur (nappe)	: Champ : Flux_Energie
• Flux de chaleur dans un tronçon de drain	: Champ : Q_Énerg_Drain
• Flux de chaleur Nappe => Drain	: Champ : QNrj_Napp_Dra
• Flux de chaleur dans un tronçon de rivière	: Champ : Q_Énerg_River
• Flux de chaleur Nappe => Drain	: Champ : QNrj_Napp_Riv



## 16 Description détaillée des paramètres généraux relatifs aux calculs de transfert thermique

Le fichier des « Paramètres Généraux » est créé ou modifié par le module de « Gestion des données non maillées » (module « Paramart »), accessible par le bouton  de la barre d'outils du bas du cadre de WinMarthe. On choisit alors la ligne « Paramètres Généraux » (Figure 44).

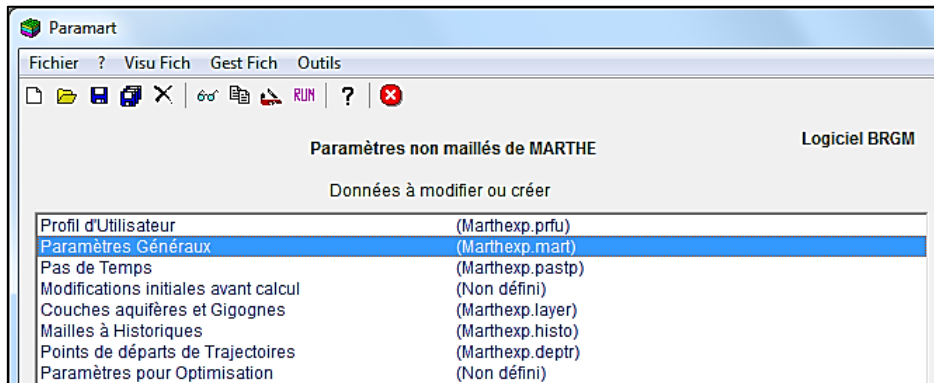


Figure 44 – Sélection du fichier des « Paramètres Généraux ».

Le fichier des « Paramètres Généraux », d'extension [.mart], est organisé en paragraphes, chacun étant relatif à des fonctionnalités différentes. On décrit ici uniquement les paragraphes en relation avec les calculs de transfert thermique (transfert de chaleur) :

- Unités des données
- Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité
- [Température, effets thermiques](#)

### 16.1 Paragraphe « Unités des données »

```

*** Unités des données                                     ***
% = Unité de Porosité = Teneur en eau en [-] ['%' si en %]
  = Type de Débit Massique et de Chaleur lu : [Déf=par maille ; 'm2'=par m2]
  
```

On décrit ici uniquement les données spécifiquement nécessaires au calcul de transfert thermique.

#### 16.1.1 Unité de porosité et de teneur en eau

C'est le facteur par lequel il faut multiplier la teneur en eau pour obtenir des données en  $\text{m}^3/\text{m}^3$ . Par exemple, si la teneur en eau est donnée en %, le facteur sera égal à 0.01. (On peut également utiliser le caractère « % »).

### 16.1.2 Type de Débit massique et de Chaleur en entrée

Type de Débit Massique et de Chaleur (et de Dirac) donnés en entrée :

Valeur par défaut : 0 => Données par maille.

- 0 = Les flux de chaleur et de masse (et les Diracs) sont donnés :  
par maille et par tronçon de Rivière ou de Drain.  
C'est la méthode par défaut.
- « m2 » ou « -1 » = Les flux de chaleur et de masse (et les Diracs) sont donnés :
  - Par m<sup>2</sup> de surface (perpendiculaire à la pesanteur)
  - Et par mètre de longueur de Rivière ou de Drain.

### 16.2 Paragraphe « Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité »

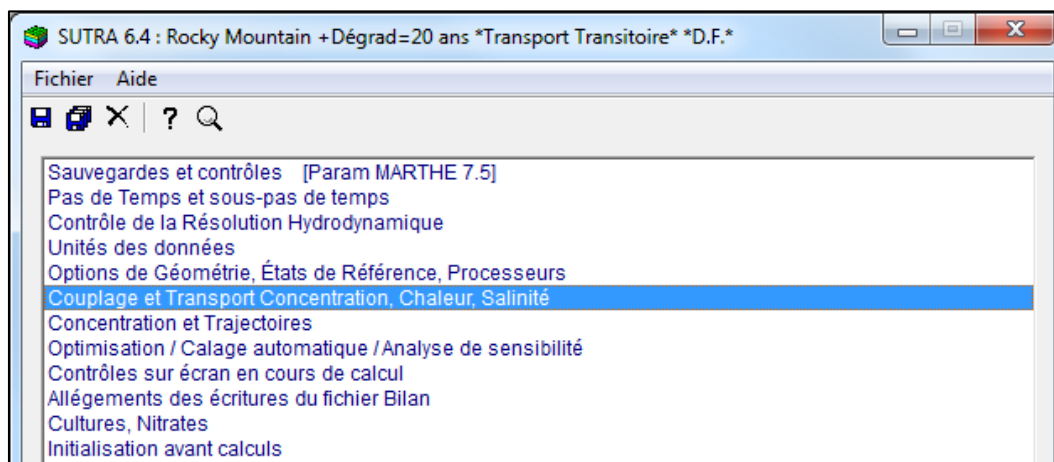


Figure 45 – Fichier des paramètres généraux : Paragraphe « Couplage et transport ».

```

*** Couplage et Transport : Concentration, Chaleur, Salinité ***
  0 = Nombre maximal d'itérations pour le *Couplage* Densité/Pression
  0 = Coefficient de Relaxation pour Couplage Densité/Pression [Déf=1]
  0 = Nombre maximal d'itérations *Transport* Salinité/Chaleur/Concentration
    [Déf=20]
  TVD = Méthode de Transport [0=Diff_Finies ; 1=Random_Walk ; 2=MOC ; 3=TVD]
1e-9 = Diffusion moléculaire (m2/s) [* = Spatialisée]
  10 = Dispersivité Longitudinale (m) [* = Spatialisée]
   2 = Dispersivité Transversale (m) [* = Spatialisée]
   0 = Transport Permanent préliminaire avant régime transitoire [Déf=0]
   0 = Sauvegarde des positions des particules en fin de calcul (-1=Binaire)
   0 = Lecture d'un fichier de Position Initiales des Particules
   0 = Nombre de sous-pas de temps pour les Particules R.W. [Déf=1]
   0 = Méthode de réflexion des particules R.W. (0=Non ; 1=Schéma Ito)
   0 = Écriture des bilans cumulés de masse et/ou de Chaleur (0=Oui ; -1=Non)
   0 = Solveur pour calculs de Transport : 1=Orthomin ; 2=Autre [Déf=1]
   0 = Omission des Termes Diagonaux en Diff. Finies (0=Calcul Complet ; 1=Omission)
   0 = Concentration et/ou Température Non limitées par les mini/maxi
    [Déf=Limitées 1=Non Limitées]
   0 = Nombre maximal d'itérations pour une sorption de schéma Langmuir/Freundlich
    [Déf=20]
   0 = Coefficient de Relaxation pour un calcul avec sorption Langmuir/Freundlich
    [Déf=1]
   0 = Schéma TVD complet [0=Allégé = standard (rapide) ; 1=Schéma complet]
   0 = Rapport Dispersivité Transversale Verticale / Dispersiv. Transv. Horizontale

```

### 16.2.1 Nombre maximal d'itérations pour le couplage

Valeur par défaut : 0 => Pas de couplage.

Ce paramètre est utilisé uniquement en cas de couplage avec prise en compte des variations de la densité, en fonction de la température et/ou de la salinité, ou de la viscosité, en fonction de la température.

### 16.2.2 Coefficient de relaxation pour le couplage

Valeur par défaut : 0 => Pas de sous-relaxation pour le couplage.

Ce paramètre est lui aussi utilisé uniquement en cas de couplage. Si le couplage entre le calcul de l'hydrodynamique et le calcul de transfert thermique présente des oscillations : fixer ce coefficient de (sous) relaxation à une valeur inférieure à 1 permettra une convergence plus régulière.

### 16.2.3 Nombre maximal d'itérations pour le transport

C'est le nombre maximal d'itérations utilisé pour les calculs de transport quand le transport est calculé :

- par la méthode TVD ;
- ou la méthode des différences finies (DF) ;
- ou par la méthode des caractéristiques (MOC).

Pour choisir ce nombre maximal d'itérations, on peut se baser *a priori* sur la règle suivante :

- Régime permanent  
Résolution matricielle (méthode Orthomin) : 10 à 50 itérations.
- Régime transitoire

Le nombre d'itérations peut être plus petit. Il est d'autant plus petit que les pas de temps de calcul sont petits.

#### 16.2.4 Méthode de résolution des calculs de transport

- « DF » ou « 0 » = Transport par la méthode des différences finies DF.
  - « RW » ou « 1 » = Transport par la méthode des particules Random Walk RW.
  - « MOC » ou « 2 » = Transport par la méthode des caractéristiques MOC.
  - « TVD » ou « 3 » = Transport par la méthode TVD (à limiteur de flux).
- La méthode la plus précise est la méthode TVD, ou bien la méthode des caractéristiques MOC.
- La méthode la plus rapide est la méthode des Différences Finies, qui a cependant l'inconvénient, si la dispersion réelle est faible, d'introduire de la [dispersion numérique](#).

#### Restrictions :

- Seule la méthode DF est bien adaptée à un calcul de transport directement en régime permanent.
- La méthode TVD n'est pas opérationnelle avec les maillages gigognes.

#### 16.2.5 Dispersivité longitudinale pour le transport de masse

C'est le coefficient, généralement noté  $\alpha_L$ , qui permet de calculer la dispersion mécanique  $D_L$  (appelée aussi « dispersion cinématique »).

$$D_L = D_o + \alpha_L \cdot u \quad (\text{dans le sens de la vitesse})$$

Avec :

$u$  = vitesse réelle (ou « vitesse de filtration » ou encore « vitesse de pore »).

En l'absence de données de terrain, pour modéliser un transport sur une distance  $L$ , on peut prendre en première approximation :  $\alpha_L \approx L / 10$

(Par exemple :  $\alpha_L = 10$  cm pour une colonne de 1 m, ou bien  $\alpha_L = 100$  m pour une pollution sur 1 km d'extension).

La dispersivité longitudinale est donnée en mètres, indépendamment de l'unité de coordonnée des mailles.

#### 16.2.6 Dispersivité transversale pour le transport de masse

C'est le coefficient, noté  $\alpha_T$ , qui permet de calculer la dispersion mécanique  $D_T$  dans la direction perpendiculaire à la vitesse. En l'absence de données de terrain, on admet l'ordre de grandeur suivant :

$$\alpha_T \approx [0.05 \alpha_L \text{ à } 0.2 \alpha_L]$$

La dispersivité transversale est également donnée en mètres (elle n'est pas utilisée dans le cas d'un écoulement en 1D).

#### 16.2.7 Transport permanent préliminaire avant transitoire

Valeur par défaut : 0 => Pas de transport permanent préliminaire.

Exceptionnellement, quand le transport est en régime transitoire, il peut être intéressant de faire un calcul de transport en régime permanent avant de débiter le régime transitoire. On peut ainsi obtenir un état initial en équilibre (avant d'introduire des modifications). Dans le cas, assez exceptionnel, où l'on veut utiliser cette option, il faut donner la valeur 1 à ce paramètre.

### 16.2.8 Sauvegarde des positions des particules en fin de calcul

Cette option est possible uniquement si on utilise une méthode de transport à particules (méthode MOC ou RW). Si, dans le paragraphe « Sauvegardes et contrôles » du fichier des paramètres, on a choisi l'option : « Sauvegarde de l'état de fin de calcul », il est possible de conserver également la position des particules en fin de calcul.

Ce choix est fait par cet index :

- 0 = Pas de sauvegarde des particules
- 1 = Sauvegarde des positions des particules en format texte
- -1 = Sauvegarde en binaire.

Soit « nom\_fin » le nom générique pour les données de l'état de fin de calcul. Les particules seront sauvegardées dans les fichiers :

- nom\_fin.partc : pour les particules de masse de concentration.
- nom\_fin.parts : pour les particules de masse de salinité.
- nom\_fin.partt : pour les particules de quantité de chaleur.

Indépendamment de la sauvegarde dans l'état de fin de calcul, il est possible également de sauvegarder, à chaque pas de temps, la position des particules. Les coordonnées seront alors sauvegardées dans le fichier de nom « partic.out ». (Les positions des trois types de particules seront à la suite les unes des autres dans ce même fichier).

Si on a sauvegardé la position des particules (en fichier texte, ASCII, ou en binaire), il est possible de reprendre les résultats d'un calcul pour le poursuivre comme si on ne s'était pas arrêté. Si la position des particules est sauvegardée en clair, en format « texte », le fichier peut être utilisé également pour représenter graphiquement le nuage de particules. Si les calculs sont en 2D, les particules peuvent être directement visualisées par le logiciel « Shalimar » du BRGM ou bien par tout autre logiciel de dessin classique.

(Il n'y a pas de particules si les calculs de transport se font par la méthode TVD ou par la méthode DF).

### 16.2.9 Lecture d'un fichier de particules initiales

C'est l'opération inverse de la précédente : si on avait sauvegardé les positions des particules (MOC ou RW) en fin de calcul, il est possible de relire les particules pour enchaîner un calcul sans aucune perte de précision. Le code de calcul MARTHE détecte automatiquement si le fichier est un fichier « texte » ou bien un fichier binaire.

### 16.2.10 Nombre de sous-pas pour les particules ou les trajectoires

Valeur par défaut : 0 => Pas de sous-pas pour les particules et les trajectoires.

Dans le cas d'un calcul par particules par la méthode RW, les calculs seront plus précis, surtout en cas de milieu hétérogène ou à proximité de singularités, si les pas de temps de déplacement

sont plus petits. Dans le cas de calcul de trajectoires, on obtiendra des points intermédiaires, mais les points d'intersection avec les limites des mailles seront identiques. Dans le cas d'un calcul la méthode MOC, les résultats sont très peu modifiés puisque, pour chaque pas de temps de calcul, la dispersion n'est effectuée qu'après le déplacement des particules, pendant tous les « sous-pas de temps de particules ».

Dans tous les cas, on choisit un nombre de « sous-pas de temps de particules ou de trajectoires » en donnant la valeur :

- 0 = Il n'y aura pas de sous-pas de temps.
- n = n sous-pas pour le déplacement des particules ou le dessin des trajectoires.

Il convient de remarquer que l'utilisation de sous-pas de temps associée à des particules peut allonger le temps d'exécution des calculs.

### 16.2.11 Méthode de réflexion des particules

Valeur par défaut : 0 => Schéma standard.

En cas de calcul par la méthode Random Walk (RW) dans un milieu très hétérogène, cette option peut permettre - dans certains cas - une réduction des problèmes d'accumulation de particules dans des zones peu dispersives. On choisit cette option de la manière suivante :

- 0 = Schéma standard (*Conseillé*).
- 1 = Schéma avec correction par prise en compte des termes de « Ito ».

Il convient de remarquer que cette option peut allonger significativement les calculs et que la correction n'est pas forcément totale surtout si les pas de temps de calcul sont grands. Il est alors conseillé d'utiliser la méthode MOC (ou TVD).

### 16.2.12 Écriture dans le fichier « bilandeb.txt » des bilans cumulés de Masse et/ou de Chaleur (0=Oui ; -1=Non)

Valeur par défaut : 0 => Affichage.

Cette option permet d'évaluer le cumul des différents termes du bilan de chaleur :

- 0 ou 1 = Affichage (au prix d'un léger ralentissement des calculs).
- -1 = Pas d'affichage.

Les différents termes du bilan sont affichés en Joules.

Les termes du bilan sont les suivants :

Quantité de chaleur :

- Entrant par les limites du domaine
- Sortant par les limites du domaine
- Entrant dans les mailles à température imposée
- Sortant par les mailles à température imposée
- Sortant par les mailles à débordement (ou suintement)
- Entrant par infiltration et irrigation
- Entrant dans les mailles internes (injection de chaleur)
- Sortant dans les mailles internes (prélèvement de chaleur)
- Stockée dans le système.

Le code de calcul affiche également l'écart du bilan cumulé.

### 16.2.13 Résolution matricielle des calculs de transport

Valeur par défaut : 0 => Résolution par la méthode Orthomin.

Deux méthodes de résolution des calculs de transport sont possibles dans les méthodes de transport utilisant des différences finies (méthodes TVD, DF ou MOC) :

- 1 = Résolution directe par gradients conjugués par la méthode Orthomin.

Cette méthode Orthomin utilise une adaptation du module Orthofem qui nous a été transmis par Carl A. Mendoza, du Waterloo Center for Groundwater Research de l'Université de Waterloo (Canada).

C'est la méthode de calcul par défaut.

- 2 = Résolution itérative, maille par maille (*Obsolète*)

La méthode Orthomin est la plus rapide. Les deux méthodes de calcul sont itératives et font intervenir un [nombre maximal d'itérations](#) : le processus itératif s'arrête éventuellement avant ce nombre d'itérations maximal si la variation moyenne de température ou de concentration entre deux itérations successives est inférieure à un seuil défini par l'utilisateur dans le paragraphe « Concentration et trajectoires » (ou dans le paragraphe « Salinité, densité » ou « Température, effets thermiques », suivant le cas).

Remarque : Ce paramètre n'est pas utilisé lors d'un calcul avec la méthode RW (*méthode déconseillée*).

### 16.2.14 Omission des termes diagonaux en différences finies

Valeur par défaut : 0 => Pas d'omission.

Si les vitesses sont parallèles à l'un des axes du maillage, il est possible de faire un calcul plus rapide et nécessitant moins de mémoire. Dans le cas d'un écoulement avec une vitesse sensiblement parallèle à un axe du maillage, on obtiendra rapidement une solution approchée qui sera peu éloignée de la solution exacte.

Pour faire un calcul omettant les termes diagonaux (parfaitement exact si les vitesses sont parallèles à l'une des directions du maillage), il suffit de donner la valeur « 1 » à ce paramètre.

### 16.3 Paragraphe « Température , effets Thermiques »

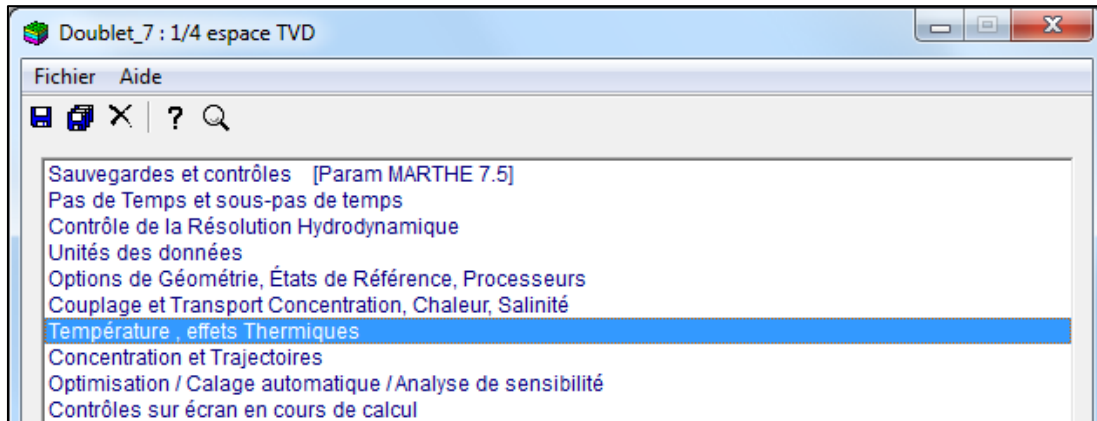


Figure 46 – Fichier des paramètres généraux : Paragraphe « Température et effets thermiques ».

```

*** Température , effets Thermiques ***
  0 = Prise en compte des effets de la Température
  0 = Loi de Densité de l'eau = F(Température)
      (0=Non ; 1=Schoeller ; 3=Linéaire ; 4=Schlumb_VDB)
  0 = Loi de Viscosité de l'eau = F(Température)
      (0=Non ; 1=Exponentielle ; 2=Racine_Carrée)
  0 = Joules portés par chaque particule (si transport par particules)
  5e-4 = Variation moyenne de Température entre 2 itérations pour convergence
  Transit = Régime du Transfert Thermique [0=Transitoire ; 1=Permanent]
  2.5 = Conductivité Thermique du minéral (W/m/deg)
      [Déf=0 => 1.5] [* => Spatialisée]
  10 = Dispersivité Thermique Longitudinale (m)
      (-1=idem que transport de Masse) [* => Spatialisée]
  0 = Dispersivité Thermique Transversale (m)
      (-1=idem que transport de Masse) [* => Spatialisée]
  0 = Capacité thermique Massique de l'Eau (J/kg/deg) [Déf=0 => 4185]
  * = Capacité thermique Volumique du Minéral (J/m3/deg)
      [Déf=0 => 2e6] [* => Spatialisée]
  0 = Nombre maximum possible de particules de température
      (méthode MOC ou R.W.) [Déf=0 => 60000]
  0 = Durée <=> Permanent si transport MOC ou R.W. en Permanent [Déf=0]
  0 = Coefficient de Retard [utilisation non standard] [-] [Déf=0]
  0 = Temps de 1/2 Dégradation [utilisation non standard] [Déf=0]
  0 = Conductivité Thermique de l'Eau (W/m/deg) [Déf=0 => 0.6]
  1 = Calcul du champ de Température (Transfert thermique) [0=Non ; 1=Oui]
  0 = Dérivée de la loi Densité = F(Température) si loi Linéaire [Déf=0]
  0 = Masse Volumique de l'eau à température = 0° si loi linéaire [Déf=1000]
  0 = Température de référence [Viscosité, Gaz, Chimie, Dégradat.] [Déf=20°C]
  0 = Température correspondant à 0 particule [si particules] [Déf=0]
      = Épontes thermiques simulées par une solution analytiq. (Vinsome) [1=Oui]
  
```

#### 16.3.1 Prise en compte des effets de la température

On précise ici si on désire prendre en compte des effets de la température du fluide :

- 0 = Pas de prise en compte des effets de la température du fluide



- 1 = Prise en compte des effets de la température du fluide.

Attention : La « Prise en compte » de la température n'implique pas le calcul de la température (Calcul de transfert thermique).

⇒ Voir le paramètre pour sélectionner le [calcul de « Transfert thermique »](#).

### 16.3.2 Loi de densité de l'eau = Fonction(Température)

Loi : Densité de l'eau en fonction de la température :

Valeur par défaut : 0 => Densité indépendante de la température.

- 0 = Pas de dépendance.
- 1 = « Schoell » = Loi de Schoeller (jusqu'à 102 °C).
- 3 = « Lineaire » = Loi linéaire. (à partir de la [dérivée d Densité / d Température](#))
- 4 = « Schlum » = Loi de Schlumberger-VDB : Densité = F(Température , Salinité) (Vandenbeusch, 1976)

Quand la Température et la Salinité sont toutes les 2 prises en compte :

- L'effet de la Température est d'abord pris en compte (défaut 1000 kg/m<sup>3</sup>),
- Puis l'effet de la Salinité (jusqu'à plus de 250 kg/m<sup>3</sup>) est appliqué comme un terme correctif.

La loi « Schlumberger-VDB » calcule directement : Densité = F(Température , Salinité) indépendamment de la loi de « Densité= F(Salinité) » du paragraphe « Salinité, Densité ».

Remarque : Si on sélectionne une loi de « densité en fonction de la température », Il y aura automatiquement la prise en compte des effets densitaires, même si on n'avait pas sélectionné cette option dans le paragraphe « Salinité, densité ».

La Figure 47 montre, pour différentes salinité, la variation de la masse volumique du fluide en fonction de la température. On voit que la masse volumique (donc également la densité) diminue d'environ 4 % entre 0 °C et 100 °C.

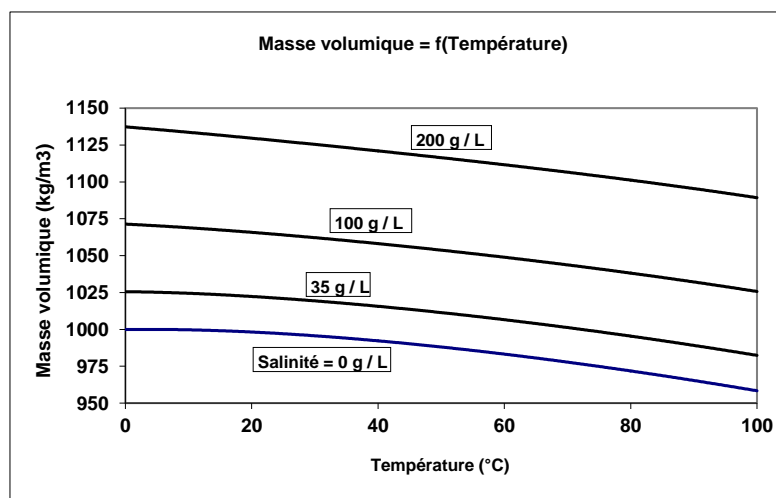


Figure 47 – Variation de la masse volumique de l'eau en fonction de la température  
Calcul pour différentes salinités (NaCl).

### 16.3.3 Loi de viscosité de l'eau = F(Température)

Loi : Viscosité dynamique de l'eau «  $\mu$  » en fonction de la température :

- 0 = Pas de dépendance,
- 1 = « Exponen » = Loi Exponentielle,

$$\mu = 2.394 \cdot 10^{-5} \cdot 10^{\frac{248.37}{\text{Tempér} + 133.15}}$$

- 2 = « Racine » = Loi Racine carrée

$$\mu = 0.497 \cdot (\text{Tempér} + 42.5)^{-1.5}$$

La température est en °C et la viscosité dynamique «  $\mu$  » en Pa.s  $\Leftrightarrow$  kg/m.s.

Les deux lois, Exponentielle ou racine carrée, donnent des valeurs identiques sur la plage de 0°C à 100°C. (Les 2 courbes de la Figure 48 sont pratiquement superposées). On remarque que la viscosité de l'eau pure à 0°C est environ 6 fois plus forte que celle de l'eau à 100°C.

Remarque : Dans cette version de MARTHE, la variation de la viscosité en fonction de la salinité n'est pas prise en compte, mais cette variation est faible, sauf pour les fluides très denses (Figure 49). Cette figure montre que de l'eau de mer (35 g de NaCl par litre) a une viscosité cinématique augmenté de seulement 5 % par rapport à de l'eau douce.

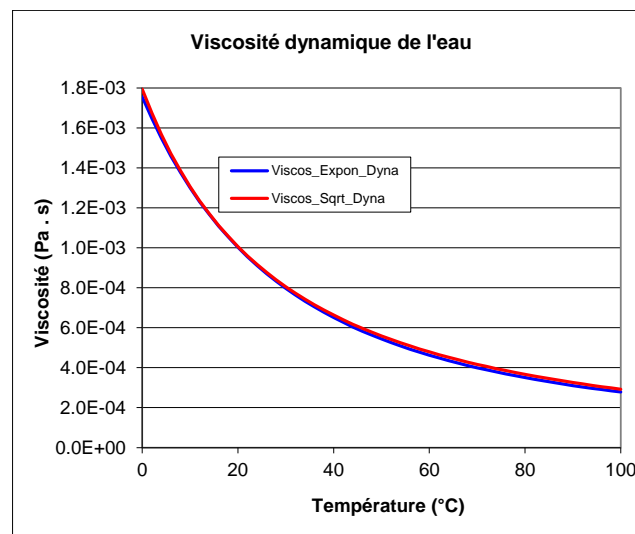


Figure 48 – Variation de la viscosité dynamique de l'eau douce en fonction de la température. Loi exponentielle et loi racine carrée (quasiment superposées).

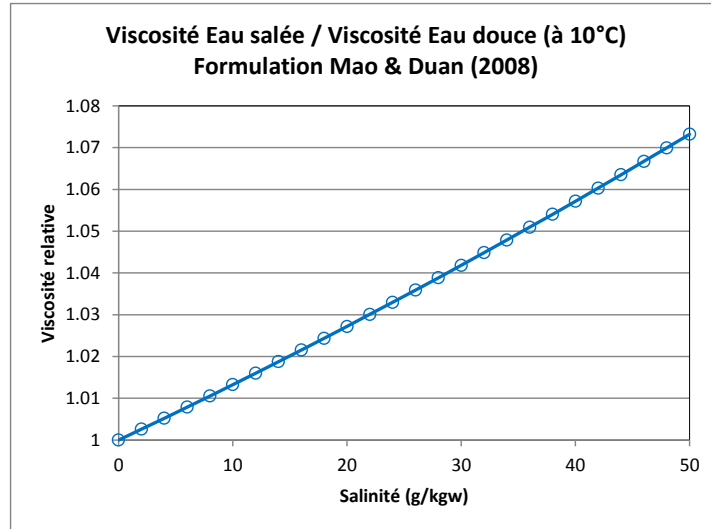


Figure 49 – Variation de la viscosité dynamique de l'eau en fonction de la salinité (NaCl).  
En ordonnée : Rapport de la viscosité du fluide à la viscosité de l'eau douce à la même température.  
En abscisse : Concentration en NaCl en g / kg d'eau, soit sensiblement en g /L.  
Cet effet n'est pas pris en compte dans cette version de MARTHE.

#### 16.3.4 Joules portés par chaque particule

Pour les méthodes de transfert à particules (MOC ou RW), on donne ici la quantité de chaleur portée par une particule (toutes les particules porteront la même quantité de chaleur). Cette quantité de chaleur est donnée en Joules.

Lors de l'initialisation : dans chaque maille, le nombre initial de particules sera donc obtenu en divisant la quantité de chaleur dans la maille par la quantité de chaleur portée par chaque particule.

Ce paramètre n'est pas utilisé avec les méthodes de transport sans particules : TVD ou DF.

#### 16.3.5 Variation moyenne de température entre 2 itérations pour convergence

C'est le critère de convergence pour les calculs de température par méthode itérative (TVD, Différences Finies ou MOC).

Valeur par défaut : 0 =>  $10^{-8}$  °C.

Quand la variation moyenne de température (en valeur absolue) entre deux itérations successives est inférieure à ce seuil, la convergence est jugée acceptable et le calcul de transfert thermique se termine même si le nombre maximal d'itérations n'est pas atteint.  
Avec le solveur Orthomin : Le critère d'arrêt est sur la variation maximale de température.

Cette variation moyenne est exprimée en degrés (°C ou °K). Un ordre de grandeur est d'environ  $10^{-6}$  °C.

Remarque : Ce paramètre n'est pas utilisé lors des calculs par la méthode RW.

### 16.3.6 Régime des calculs de transfert thermique

Le calcul de transfert thermique peut être réalisé en régime permanent (champ de température équilibré) ou bien en régime transitoire (calcul de l'évolution du champ de température). On choisit le régime par ce paramètre :

Valeur par défaut : 0 => Régime transitoire.

- « Transit » ou « 0 » = Régime transitoire pour le calcul de transfert thermique.
- « Perman » ou « 1 » = Régime permanent pour le calcul de transfert thermique.

### 16.3.7 Conductivité thermique du minéral (W/m/deg)

Il s'agit ici de la conductivité thermique du minéral (c'est-à-dire des « grains » de la matrice poreuse) et non pas de la conductivité thermique du terrain.

Valeur par défaut : 0 => 1.5 W/m/°K.

Si on donne la valeur « \* » => Le fichier spatialisé de conductivité thermique est utilisé. Le nom du fichier spatialisé doit alors être donné dans le fichier projet.

La Figure 53 donne des [ordres de grandeurs de conductivité thermique](#) de différents matériaux.

### 16.3.8 Dispersivité thermique longitudinale

La dispersivité longitudinale thermique est exprimée en mètres :

- Valeur « -1 » => La dispersivité thermique longitudinale aura la même valeur que celle définie pour le transport de masse.
- Valeur « \* » => Le fichier spatialisé de dispersivité thermique longitudinale est utilisé. Le nom du fichier spatialisé doit alors être donné dans le fichier projet.

### 16.3.9 Dispersivité thermique transversale

La dispersivité transversale thermique est exprimée en mètres :

- Valeur « -1 » => La dispersivité thermique transversale aura la même valeur que celle définie pour le transport de masse.
- Valeur « \* » => Le fichier spatialisé de dispersivité thermique transversale est utilisé. Le nom du fichier spatialisé doit alors être donné dans le fichier projet.

### 16.3.10 Capacité thermique massique de l'eau (J/kg/deg)

C'est la capacité thermique massique de l'eau. Elle est exprimée en J/kg/°K, c'est-à-dire en J/kg/deg.

Valeur par défaut : 0 => 4185 J/kg/°K.

### 16.3.11 Capacité thermique volumique du minéral (J/m<sup>3</sup>/deg)

Attention : Il s'agit bien d'une capacité thermique volumique.

Valeur par défaut : 0 =>  $2 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3/\text{°K}$ .

Si on donne la valeur « \* » => Le fichier spatialisé de capacité thermique volumique du minéral est utilisé.

Le nom du fichier spatialisé doit alors être donné dans le fichier projet.

La Figure 54 donne des [ordres de grandeurs de capacité thermique volumique](#) de différents matériaux.

### **16.3.12 Nombre maximal possible de particules de température**

Valeur par défaut : 0 => 60 000 particules au maximum.

Dans le cas d'un transport faisant intervenir des particules (MOC ou RW), on donne ici le nombre maximal de particules qui pourront être utilisées au cours des calculs. C'est le quota maximal de particules alloué pour la température (un autre quota peut être alloué pour le transport de la concentration ou de la salinité).

Suivant la mémoire de l'ordinateur et la complexité du problème traité, il peut être nécessaire d'utiliser plusieurs centaines de milliers de particules.

### **16.3.13 Durée équivalente au permanent si transport permanent par particules**

Ce paramètre s'applique uniquement si on calcule en régime permanent le champ de température par une méthode faisant intervenir des particules (MOC ou RW).

On donne alors ici une durée, en unité utilisateur de temps, suffisamment longue pour que le champ de température se stabilise.

Ce paramètre ne s'applique pas : si le transport est en régime transitoire, ou bien s'il est réalisé avec la méthode TVD ou la méthode DF.

Remarque : Les méthodes de transfert à particules ne sont pas très adaptées aux calculs en régime permanent.

### **16.3.14 Coefficient de retard**

En utilisation normale : sans objet pour les calculs de transfert thermique.

Ce paramètre a été introduit par analogie avec le transfert de masse. Dans les utilisations classiques, il ne doit pas être utilisé.

### **16.3.15 Temps de ½ dégradation**

En utilisation normale : sans objet pour les calculs de transfert thermique.

Ce paramètre a été introduit par analogie avec le transfert de masse. Dans les utilisations classiques, il ne doit pas être utilisé.

Ce temps de ½ dégradation pourrait éventuellement être utilisé, dans certains cas spéciaux, pour simuler un refroidissement ...

Il est exprimé en unité utilisateur de temps.

### 16.3.16 Conductivité thermique de l'eau (W/m/degé)

Valeur par défaut : 0 => 0.6 W/m/°K.

### 16.3.17 Calcul du champ de température (calcul de transfert thermique)

Valeur par défaut : 0 => Pas de calcul de transfert thermique.

- 0 = Pas de calcul de transfert thermique => La température est imposée
- 1 = Calculs de transfert thermique, donc calcul du champ de température.

Le choix du « Calcul de transfert thermique » implique automatiquement la « Prise en compte des effets de la température du fluide »

### 16.3.18 Dérivée de la loi de Densité = Fonction(Température) si loi linéaire

Dérivée de la loi de la masse volumique en fonction de la température du fluide.

Valeur par défaut : 0.

Ce paramètre est utilisé uniquement si on a sélectionné :

- « Prise en compte de la densité »
- et Loi linéaire de la densité de l'eau en fonction de la température du fluide.

On aura alors la relation :

$$\rho_w = \rho_{w0} + \text{Dérivée} \times \text{Température}$$

Avec :  $\rho_w$  = Masse volumique du fluide (kg/m<sup>3</sup>)

$\rho_{w0}$  = Masse volumique du fluide à 0°C (kg/m<sup>3</sup>)

### 16.3.19 Masse volumique de l'eau à température = 0° [si loi linéaire]

Masse volumique de référence à 0°C.

Valeur par défaut : 0 => 1000 kg/m<sup>3</sup>.

Ce paramètre est utilisé uniquement si on a sélectionné :

- « Prise en compte de la densité »
- et Loi linéaire de la densité de l'eau en fonction de la température.

On aura alors la relation :

$$\rho_w = \rho_{w0} + \text{Dérivée} \times \text{Température}$$

Avec :  $\rho_w$  = Masse volumique du fluide (kg/m<sup>3</sup>)

$\rho_{w0}$  = Masse volumique du fluide à 0°C (kg/m<sup>3</sup>)

### 16.3.20 Température de référence [pour : Viscosité, Gaz, Géochimie, Dégradation]

Valeur par défaut : 0 => 20°C.

Cette température est exprimée en °C.

Pour fixer 0 °C mettre par exemple 10<sup>-5</sup> °C !

### 16.3.21 Température correspondant à 0 particule

Valeur par défaut : 0°C.

Avec les méthodes de transfert à particules (MOC ou RW) il est possible de définir un seuil de température correspondant à zéro particule. Par exemple, si la température est toujours comprise entre 45 et 55 °C, on pourra définir un seuil de 40 °C. MARTHE générera alors des particules uniquement pour la différence de température par rapport à 40, d'où une diminution du nombre de particules permettant des calculs plus rapides.

Attention : dans cette version de MARTHE, cette possibilité n'est pas toujours opérationnelle.

### 16.3.22 Épentes thermiques simulées par la solution analytique de Vinsome

Valeur par défaut : 0 => Non.

Cette option permet de simuler les épentes thermiques par une solution analytique approchée (solution de Vinsome and Westerveld, 1980). Il est ainsi possible de réduire considérablement le nombre de mailles (le nombre de couches) pour simuler les épentes thermiques, quasiment sans perte de précision.

- « 0 » = Calcul classique.
- « Analyt » ou « Vinsome » ou « 1 » = Utilise la solution analytique.

Si on choisit d'utiliser cette solution analytique :

- Il suffit généralement d'avoir une seule couche d'épente thermique au-dessus de l'aquifère et une seule couche d'épente thermique en dessous de l'aquifère. Si le domaine est symétrique, on peut simuler uniquement ½ espace, il suffit alors d'une seule couche d'épentes.
- Dans toutes les mailles d'une couche d'épente (thermique) => Il faut alors donner la valeur « 1 » au champ d'« Indice d'Épente thermique ».
- Cette solution est moins précise si les épentes thermiques sont cylindriques.

Un exemple d'application est présenté dans le chapitre : [applications de transfert thermique](#).

## 16.4 Exemples de fichiers de « Paramètres Généraux » pour des calculs de transfert thermique

À titre d'illustration, les Figure 50 à Figure 52 présentent les paragraphes « Couplage et Transport » et « [Température, effets thermiques](#) » pour 3 exemples d'application :

- Transport en régime permanent par la méthode DF (Figure 50) ;
- Transport en régime transitoire par la méthode TVD (Figure 51) ;
- Transport en régime transitoire par la méthode MOC (Figure 52).

```

Transfert thermique Permanent par la méthode Différences Finies
*** Couplage et Transport : Concentration, Chaleur, Salinité ***
    DF = Schéma de Transport [0=Diff_Finies ; 1=Random_Walk ; 2=MOC ; 3=TVD]

*** Température , effets Thermiques ***
    1e-5 = Variation moyenne de Température entre 2 itérations pour convergence
    Perman = Régime du Transfert Thermique [0=Transitoire ; 1=Permanent]
    2.5 = Conductivité Thermique du minéral (W/m/deg) [Déf=0 => 1.5]
    100 = Dispersivité Thermique Longitudinale (m) (-1=idem que transport de Masse)
    20 = Dispersivité Thermique Transversale (m) (-1=idem que transport de Masse)
    0 = Chaleur Spécifique Massique de l'Eau (J/kg/deg) [Déf=0 => 4185]
    2.3e6 = Chaleur Spécifique Volumique du Minéral (J/m3/deg) [Déf=0 => 2e6]
    1 = Calcul du champ de Température (Transfert thermique) [0=Non ; 1=Oui]
    
```

Figure 50 – Fichier des paramètres : Transfert thermique permanent, méthode des différences finies.

```

Transfert thermique Transitoire par la méthode TVD
*** Couplage et Transport : Concentration, Chaleur, Salinité ***
    TVD = Schéma de Transport [0=Diff_Finies ; 1=Random_Walk ; 2=MOC ; 3=TVD]

*** Température , effets Thermiques ***
    1e-5 = Variation moyenne de Température entre 2 itérations pour convergence
    Transit = Régime du Transfert Thermique [0=Transitoire ; 1=Permanent]
    1.8 = Conductivité Thermique du minéral (W/m/deg) [Déf=0 => 1.5]
    100 = Dispersivité Thermique Longitudinale (m) (-1=idem que transport de Masse)
    20 = Dispersivité Thermique Transversale (m) (-1=idem que transport de Masse)
    0 = Chaleur Spécifique Massique de l'Eau (J/kg/deg) [Déf=0 => 4185]
    2.2e6 = Chaleur Spécifique Volumique du Minéral (J/m3/deg) [Déf=0 => 2e6]
    1 = Calcul du champ de Température (Transfert thermique) [0=Non ; 1=Oui]
    
```

Figure 51 – Fichier des paramètres : Transfert thermique transitoire par la méthode TVD.

```

Transfert thermique Transitoire par la méthode MOC
*** Couplage et Transport : Concentration, Chaleur, Salinité ***
    MOC = Schéma de Transport [0=Diff_Finies ; 1=Random_Walk ; 2=MOC ; 3=TVD]

*** Température , effets Thermiques ***
    2e9 = Joules portés par chaque particule (si transport par particules)
    1e-5 = Variation moyenne de Température entre 2 itérations pour convergence
    Transit = Régime du Transfert Thermique [0=Transitoire ; 1=Permanent]
    1.8 = Conductivité Thermique du minéral (W/m/deg) [Déf=0 => 1.5]
    100 = Dispersivité Thermique Longitudinale (m) (-1=idem que transport de Masse)
    20 = Dispersivité Thermique Transversale (m) (-1=idem que transport de Masse)
    0 = Chaleur Spécifique Massique de l'Eau (J/kg/deg) [Déf=0 => 4185]
    2.2e6 = Chaleur Spécifique Volumique du Minéral (J/m3/deg) [Déf=0 => 2e6]
    550000 = Nombre maximum possible de particules de température [Déf=0 => 60000]
    1 = Calcul du champ de Température (Transfert thermique) [0=Non ; 1=Oui]
    
```

Figure 52 – Fichier des paramètres : Transfert thermique transitoire par la méthode MOC.



# 17 Mise en œuvre rapide pour des calculs de transfert thermique

On présente ci-dessous 2 cas types d'utilisation :

- Uniquement prise en compte de la température, sans calcul de transfert thermique.
- Calcul de transfert thermique : Calcul du champ de température.

## 17.1 Uniquement prise en compte de la température, sans calcul de transfert thermique

Si on désire uniquement utiliser un champ de température défini en entrée pour prendre en compte son effet sur :

- La viscosité de l'eau, donc la perméabilité ;
- La densité de l'eau, donc sur le calcul de la charge hydraulique et du débit.

Dans le paragraphe « [Température, effets Thermiques](#) » du fichier des « Paramètres Généraux », sélectionner :

- La [prise en compte des effets de la température](#) :  
`1` = Prise en compte des effets de la Température  
 et éventuellement :
- La [loi de densité en fonction de la température](#), par exemple :  
`Schoell` = Loi Densité eau = F(Températ.) (0=Non 1=Schoeller ...)  
*ou bien une autre loi (« Linéaire » ou « Schlum »)*
- La [loi de viscosité en fonction de la température](#), par exemple :  
`Exponen` = Loi de Viscosité eau = F(Température) (0=Non ; 1=Exponen etc.)  
*ou bien une autre loi (« Racine »)*
- Les paramètres de la loi de densité si c'est une loi linéaire, par exemple :  
`valeur` = Dérivée Densité/Températ. [si loi Densité(Températ.) linéaire]  
`1000` = Masse Volumique de l'eau à température = 0° [si loi linéaire]
- La [température de référence pour la viscosité](#), les gaz, la géochimie, etc.  
`25` = Température de référence [viscosité, Gaz, Chimie, Dégradation]

## 17.2 Calcul de transfert thermique (Calcul du champ de température)

### 17.2.1 Paramètres à définir quel que soit le schéma de transport

**a) Dans le paragraphe « Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité » du fichier des paramètres :**

- Choisir le schéma de transport (TVD, Différences Finies, MOC, ou Random Walk) ;

Et éventuellement s'il y a couplage par prise en compte de l'influence de la température sur la densité et/ou la viscosité :

- Donner le nombre maximal d'itérations de couplage et le coefficient de sous-relaxation de couplage :  
10 = Nombre maximal d'itérations pour le \*Couplage\* Densité/Pression  
0.7 = Coefficient de Relaxation pour Couplage Densité/Pression [Def=1]

**b) Dans le paragraphe « Température, effets thermiques » du fichier des « Paramètres Généraux », sélectionner :**

- Le calcul du champ de température :  
1 = Calcul du champ de Température (Transferts thermiques)
- Le régime du transfert thermique : Permanent ou Transitoire. Par exemple :  
Transit = Régime du Transfert Thermique [0=Transitoire 1=Permanent]
- La dispersivité thermique longitudinale et transversale. Par exemple :  
100 = Dispersivité Longitudinale Thermique (m) [\* = Spatialisée]  
20 = Dispersivité Transversale Thermique (m) [\* = Spatialisée]
- Les paramètres thermiques. Par exemple :  
2.5 = Conductivité Thermique du minéral (W/m/deg) [\* = Spatialisée]  
\* = Chaleur Spécifique Volumiq. Minéral (J/m3/deg) [\*=Spatialisée]  
*Éventuellement* :  
Analyt = Épentes thermiques simulées par solution analytique (Vinsome)

Et éventuellement choisir :

- La loi de densité en fonction de la température, par exemple :  
Schoell = Loi Densité eau = F(Températ.) (0=Non 1=Schoeller ...)  
ou bien une autre loi (« Linéaire » ou « Schlum »)
- La loi de viscosité en fonction de la température, par exemple :  
Exponen = Loi de Viscosité eau = F(Température) (0=Non ; 1=Exponen etc.)  
ou bien une autre loi (« Racine »)
- Les paramètres de la loi de densité si c'est une loi linéaire, par exemple :  
valeur = Dérivée Densité/Températ. [si loi Densité(Températ.) linéaire]  
1000 = Masse Volumique de l'eau à température = 0° [si loi linéaire]
- La température de référence pour la viscosité, les gaz, la géochimie, etc., par exemple :  
25 = Température de référence [viscosité, Gaz, Chimie, Dégradation]

## 17.2.2 Paramètres à définir ensuite selon la méthode de transport choisie

**a) Méthode de transport TVD, DF ou MOC : paragraphe « Couplage et transport »**

- Nombre maximal d'itérations pour la résolution du transport ;
- Variation moyenne de température entre deux itérations pour convergence (défaut =  $10^{-8}$ ).

**b) Méthode de transport à particules (méthode MOC ou RW) :**  
**Paragraphe « Température, effets thermiques »**

- [Joules portés par chaque particule](#) ;
- Nombre maximal possible de particules de température.

### 17.2.3 Initialisation des champs

Il suffit alors :

- D'initialiser la température dans certaines mailles (TEMPERAT / MAILLE)
- De définir la température extérieure en certaines limites (TEMPER\_EXT / MAILLE)
- D'introduire éventuellement des flux de chaleur (Q\_ENERGIE),
- Ou des injections instantanées de quantité de chaleur (ENERGIE).


Toutes ces valeurs peuvent être définies avant calcul, ou bien au cours du calcul, à n'importe quel pas de temps de modèle.

### 17.2.4 Demande de sauvegardes

Pour sauvegarder les résultats désirés, il suffit de demander, aux pas de temps souhaités, la sauvegarde :

- Des « grilles Marthe » de température « TEMPERAT / EDITION »
- Des bilans de flux de chaleur « Q\_ENERGIE / EDITION »
- Ou bien des positions des particules « PARTIC\_TEMPER / EDITION »

Des historiques de température « Températ » ou de température dans le débit sortant « Tempéra\_Sort » peuvent être sélectionnés

La sélection des mailles et des champs est réalisée par le module de « Gestion des données non maillées », accessible par le bouton  de la barre d'outils du bas du cadre de WinMarthe. On choisit alors la ligne « Mailles à Historiques ».

Un fichier des mailles à historiques, d'extension [.histo] est alors créé. Il contient la définition des champs et des mailles choisies.

Des exemples d'application de calcul transfert thermique sont décrits dans le chapitre des [applications de transfert thermique](#).



## 18 Valeurs de conductivité thermique et de capacité thermique.

Matériau	Conductivité thermique en W/m/K (à 20°C)
Eau	0.6
Air	0.026
Argile (sèche à humide)	0.15 à 1.8
Argile (saturée d'eau)	0.6 à 2.5
Amiante	0.168
Ardoise (perpendiculaire)	1.4 (à 95°C)
Asphalte	0.75
Basalte	2
Béton	0.92
Brique	0.84
Calcaire	1.3
Craie	0.92
Granite	2.2
Grès	1.3
Houille	0.26
Quartz	7 à 12
Sable sec	0.15 à 0.25
Sable humide	0.25 à 2
Sable saturé	2 à 4
Terre (sèche)	0.75 à 1.5

Figure 53 – Ordre de grandeur de conductivité thermique.

(Source Wikipédia : [http://fr.wikipedia.org/wiki/Conductivité\\_thermique](http://fr.wikipedia.org/wiki/Conductivité_thermique) et [http://www.engineeringtoolbox.com/thermal-conductivity-d\\_429.html](http://www.engineeringtoolbox.com/thermal-conductivity-d_429.html))

Matériau	Capacité thermique volumique (en $10^6$ J/m <sup>3</sup> /K)
Eau	4.185
Argile (sèche)	2.1
Argile (humide)	2.3
Granite	2.1
Grès	2.3
Sable sec	1.9
Sable humide	1.9
Sel	2.0

Figure 54 – Ordre de grandeur de capacité thermique volumique.

(Source : G de Marsily : Quantitative Hydrogeology – Hydrology for Engineers. Academic Press London)



## 19 Solutions analytiques de transfert thermique

On note  $T_d$  la température adimensionnelle :

$$T_d = \frac{T - T_A}{T_I - T_A}$$

Avec :  $T_A$  = Température initiale de l'aquifère  
 $T_I$  = Température de l'eau injectée.

### 19.1 Solution analytique de Avdonin (1964)

Cette solution est relative à une injection continue à température constante dans un écoulement radial, à diffusion thermique uniforme (donc sans dispersivité thermique).

La solution en fonction du temps  $t$  et de la distance  $r$  s'écrit :

$$T_d = 1 - \Gamma\left(\frac{Q}{4\pi \cdot b \cdot \omega_{th} \cdot D_{th}}, \frac{r^2}{4 \cdot D_{th} \cdot t}\right) \quad [30]$$

$\Gamma(a,b)$  étant la fonction « Gamma incomplète »

### 19.2 Solution analytique de Coat et Smith (1964)

Cette solution est relative à une injection continue de masse ou de chaleur dans un écoulement 1D uniforme dans un milieu semi-infini.

La solution en fonction du temps  $t$  et de l'abscisse  $x$  s'écrit :

$$T_d = 0.5 \left[ \operatorname{erfc}\left(\frac{x - u_{th} \cdot t}{\sqrt{4 \cdot D_{th} \cdot t}}\right) + \exp\left(\frac{u_{th} \cdot x}{D_{th}}\right) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x + u_{th} \cdot t}{\sqrt{4 \cdot D_{th} \cdot t}}\right) \right] \quad [31]$$

$\operatorname{erfc}()$  étant la fonction « erreur complémentaire »

Ou encore, en variables adimensionnelles :

$$T_d = 0.5 \left[ \operatorname{erfc}\left(\frac{1 - C_r}{\sqrt{4 \cdot C_r / P_e}}\right) + \exp(P_e) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{1 + C_r}{\sqrt{4 \cdot C_r / P_e}}\right) \right] \quad [32]$$

En notant ici :

$$C_r = \frac{u_{th} \cdot t}{x} \quad \text{et} \quad P_e = \frac{u_{th} \cdot x}{D_{th}}$$

### 19.3 Solution analytique pour une colonne infinie recevant un flux de chaleur à une extrémité - régime transitoire

Dans ce cas monodimensionnel, on prend comme condition initiale  $T_0 = 0$  et on introduit à l'origine une injection instantanée d'un Dirac de chaleur  $P = \delta(t)\delta(x)$ , on obtient alors :

$$T(x, t) = \frac{e^{-\frac{x^2}{4Dt}}}{\sqrt{4\pi Dt}}$$

La quantité de chaleur  $E$  (c'est-à-dire l'énergie thermique) à tout instant  $t$  est obtenue par l'intégrale sur l'abscisse  $x$  :

$$E(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho C \cdot T \cdot dx$$

$$E(t) = \rho C \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{x^2}{4Dt}}}{\sqrt{4\pi Dt}} \cdot dx$$

soit :  $E = \rho C$

Si on injecte un flux  $2F$  (en Joules/s) dans le milieu infini, c'est-à-dire un flux  $F$  sur chacune des 2 parois, c'est équivalent à injecter un Dirac de quantité de chaleur :  $E = 2.F.dt$  tous les  $dt$  durées de temps. On aura donc, par intégration sur le temps  $t$ , la température  $T$  :

$$T(x, t) = \int_0^t \frac{2F}{\rho C} \cdot \frac{e^{-\frac{x^2}{4D\tau}}}{\sqrt{4\pi D\tau}} \cdot d\tau$$

Ou bien, puisque  $\frac{1}{\rho C} = \frac{D}{\lambda}$   $\lambda$  étant la conductivité thermique :

$$T(x, t) = \frac{2F \cdot D}{\lambda} \int_0^t \frac{e^{-\frac{x^2}{4D\tau}}}{\sqrt{4\pi D\tau}} \cdot d\tau = \frac{2F \cdot D}{\lambda \cdot \sqrt{4\pi D}} \int_0^t \frac{e^{-\frac{x^2}{4D\tau}}}{\sqrt{\tau}} \cdot d\tau$$

On fait le changement de variable :  $y = \frac{x}{\sqrt{4D\tau}}$  d'où :

$$\frac{T(x, t)}{\frac{2F \cdot D}{\lambda \cdot \sqrt{4\pi D}}} = -2 \frac{x}{\sqrt{4D}} \int_{\infty}^{\frac{x}{\sqrt{4D\tau}}} y^{-2} \cdot e^{-y^2} \cdot dy$$

En intégrant par parties on obtient alors l'expression intégrée suivante :

$$T(x, t) = \frac{F}{\lambda} \cdot \frac{x}{\sqrt{\pi}} \cdot \left[ \frac{\sqrt{4D \cdot t}}{x} \cdot e^{-\frac{x^2}{4Dt}} - \sqrt{\pi} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4D \cdot t}}\right) \right]$$



Soient les variables adimensionnelles suivantes :

$$x_{ad} = \frac{x}{\sqrt{4Dt}} \quad \text{Abscisse adimensionnelle.}$$

$$t_{ad} = \frac{\sqrt{4Dt}}{x} \quad \text{Temps adimensionnel.}$$

$$T_{ad}(x, t) = \frac{T(x, t)}{\frac{2F}{\lambda} \cdot x} \quad \text{Température adimensionnelle ... qui dépend de } x.$$

On peut écrire l'expression sous la forme suivante :

$$T_{ad}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \left[ \sqrt{t_{ad}} \cdot e^{-\frac{1}{t_{ad}}} - \sqrt{\pi} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{1}{\sqrt{t_{ad}}}\right) \right] \quad \text{en fonction du temps.}$$

$$T_{ad}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \left[ \frac{1}{x_{ad}} \cdot e^{-x_{ad}^2} - \sqrt{\pi} \cdot \operatorname{erfc}(x_{ad}) \right] \quad \text{en fonction de l'abscisse.}$$

Remarque :

Une autre expression de la température est :

$$T(x, t) = \frac{F}{\lambda} \cdot \sqrt{4D \cdot t} \cdot \operatorname{ierfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4D \cdot t}}\right)$$

Avec :

$$\operatorname{ierfc}(u) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-u^2} - u \cdot [1 - \operatorname{erf}(u)]$$

Remarque : On a les propriétés :

$$\int_0^u \operatorname{erfc}(z) \cdot dz = \frac{1}{\sqrt{\pi}} - \operatorname{ierfc}(u)$$

Et :

$$\operatorname{ierfc}(u) = \int_u^\infty \operatorname{erfc}(z) \cdot dz$$

Notations :

x = Abscisse

t = Temps

\tau = Variable muette d'intégration

y = Variable d'intégration

\lambda = Conductivité thermique

\rho C = Capacité thermique volumique

D = Diffusivité thermique = \lambda / \rho C

T(x, t) = Température

E = Quantité de chaleur (énergie thermique)

F = Flux de chaleur, en W/m<sup>2</sup>, sur la paroi d'un milieu semi-infini.

Le flux dans un milieu infini est donc égal à 2F

\operatorname{erfc}(u) = Fonction erreur complémentaire : \operatorname{erfc}(u) = 1 - \operatorname{erf}(u)

$$\operatorname{erf}(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-t^2} \cdot dt$$

## 20 TRANSPORT DE SALINITÉ, EFFETS DENSITAIRES

Dans un certain nombre de systèmes naturels la densité d'un fluide incompressible peut présenter des variations spatiales ou temporelles. Dans les aquifères profonds ou à proximité de la mer, l'eau contenue dans les aquifères contient parfois du sel qui induit des variations spatiales de sa densité. Les gradients géothermiques ou les stockages de chaleur ou de matières dégageant de la chaleur induisent par ailleurs des variations de température qui provoquent des variations de densité de l'eau.

Cette fonctionnalité de transport de salinité avec prise en compte des effets densitaires est décrite dans les chapitres suivants.

Le transport de salinité est simulé en régime permanent ou transitoire, en zone saturée ou non-saturée, en 3D, en 2D, en 1D, en coupe ou en symétrie cylindrique.

Le transport de salinité concerne les aquifères et aussi les réseaux de rivières et de drains.

Plusieurs cas de validation et d'[application de transport de salinité avec effets densitaires](#) sont présentés à la fin de ce rapport.



## 21 Notations pour les calculs avec effets densitaires

Notations	Unité SI	Relation
H : charge hydraulique	m	$H = z + h / d$
x, y : distances	m	
z : altitude (> 0 vers le haut)	m	
g : accélération de la pesanteur	$m/s^2$	
k : perméabilité intrinsèque	$m^2$	
$\mu$ : viscosité dynamique de l'eau	$kg/m \cdot s$ ( $Pa \cdot s$ )	
$\rho$ : masse volumique de l'eau	$kg/m^3$	
$\rho_0$ : masse volumique de l'eau douce	$kg/m^3$	
p : pression	$N/m^2$	
h : pression en mètres d'eau douce (hors pression atmosphérique)	m	$h = p / \rho_0 g$
K : perméabilité à l'eau	$m/s$	$K = \rho_0 g \cdot k / \mu$
V : vitesse (de Darcy)	$m/s$	
Q : débit	$m^3/s$	
T : transmissivité	$m^2/s$	$T = K \cdot b$

b : hauteur mouillée	m	
t : temps	s	
$S_S$ : coefficient d'emmagasinement spécifique	$m^{-1}$	
$S_L$ : coefficient d'emmagasinement libre	m/m	
C : salinité	$kg/m^3$	
$H_d$ : charge hydraulique équivalente en eau douce	m	$H_d = z + h$
$\omega$ : porosité cinématique	$m^3/m^3$	
d : densité relative	[-]	$d = \rho / \rho_0$
HH : « niveau pseudo piézométrique »	m	$HH = d \cdot H$ $= d \cdot z + h$

<b>Champ</b>	<b>Définition</b>	<b>Extension du fichier</b>
SALINITE	Salinité	salini
SALIN_EXT	Salinité extérieure	salect
SALINIT_SORT	Salinité dans un débit sortant	-
SALIN_RECH	Salinité dans les apports pluviométriques	-
MASS_SALIN	Apport de « masse dense » (Dirac)	msali
QMASS_SALIN	Flux massique de salinité	qmas_s
DIFFUS_MOLEC	Diffusion moléculaire	dimol
DISPER_LONGI	Dispersion Longitudinale	alfal
DISPER_TRANSV	Dispersion Transversale	alfat
MASSE_VOLUMIQ	Masse volumique calculée	-

Par rapport aux champs se rapportant au transport de masse classique, on a la correspondance suivante :

<b>Champ</b>	<b>Unité</b>	<b>Transport de masse classique</b>
SALINITE	Unité de salinité	CONCENTR
SALIN_EXT	Unité de salinité	CONCEN_EXT
SALINIT_SORT	Unité de salinité	CONCEN_SORT
SALIN_RECH	Unité de salinité	CONCEN_RECH
MASS_SALIN	Unité de masse	MASS_CONCEN
QMASS_SALIN	Unité de masse / Unité de temps	QMASS_CONC

## 22 Définition des grandeurs utilisées dans MARTHE pour les calculs de salinité

La [liste des champs et des fichiers](#) de MARTHE pouvant être utilisés pour le transport de salinité est donnée Figure 59

### 22.1 Masse volumique

C'est la masse de fluide par unité de volume de fluide ( $\text{kg/m}^3$ ). Elle est notée  $\rho$ .

### 22.2 Salinité

Le code de calcul MARTHE permet le transport de solutés à faible concentration selon l'hypothèse du traceur. Dans MARTHE la concentration est désignée par le champ « CONCENTR », d'extension de fichier [.conce]. Il est possible d'utiliser également un autre type de concentration, appelée ici « salinité ». C'est la concentration volumique de soluté (sel) responsable de la variation de masse volumique du fluide. Dans MARTHE la salinité correspond au champ « SALINITE », d'extension de fichier [.salini].

La salinité est exprimée par défaut en  $\text{kg}$  de soluté par  $\text{m}^3$  de fluide mais dans MARTHE il est possible de définir une unité utilisateur de salinité. MARTHE permet de prendre en compte simultanément un champ de « concentration » (CONCENTR), pour un problème de transfert de pollution, et un champ de « salinité » (SALINITE), du par exemple à la proximité de la mer (autre soluté, autres conditions aux limites).

- La salinité de l'eau pure est égale à 0.
- La salinité de l'eau de mer est voisine de  $35 \text{ kg/m}^3$  de NaCl dans l'Atlantique, et de l'ordre de  $10 \text{ kg/m}^3$  dans la mer Baltique.

Il est possible également d'utiliser comme salinité la concentration en un ion au lieu de la concentration en soluté. On pourra par exemple, dans le cas d'une eau salée, utiliser la concentration en  $\text{Cl}^-$  au lieu de la concentration en NaCl. Il faudra alors en tenir compte pour le calcul de la masse volumique du fluide.

### 22.3 Densité relative

C'est le rapport  $d$  de la masse volumique  $\rho$  du fluide à la masse volumique  $\rho_0$  de l'eau (douce) pure à une température de référence (souvent  $15^\circ\text{C}$ ) :  $d = \rho / \rho_0$  (sans dimension).

Compte tenu de la masse atomique du NaCl qui est égale à  $58.45 \text{ g}$  et du volume du sel (NaCl) dissout qui est de l'ordre de  $16.3 \text{ cm}^3/\text{mole}$ , on obtient généralement les valeurs suivantes dans l'eau de mer (Océan Atlantique) :

- Salinité =  $35 \text{ kg/m}^3$
- Masse volumique de l'eau de mer =  $1\,025 \text{ kg/m}^3$
- Densité relative = 1.025

En effet considérons un volume de 1 m<sup>3</sup> d'eau pure (de masse 1000 kg). On lui ajoute 35 kg de sel NaCl (solide) soit 35000/58.45 moles. Le volume occupé par le sel NaCl en solution ajouté est égal à environ 16.3 cm<sup>3</sup>/mole, d'où un volume total de (1 + 35000/58.45 x 16.3 10<sup>-6</sup>) m<sup>3</sup>, soit 1.0098 m<sup>3</sup>. On a donc au total une masse de solution de 1035 kg dans un volume de 1.0098 m<sup>3</sup>, d'où une masse volumique égale à 1035/1.0098 = 1025 kg/m<sup>3</sup>.

## 22.4 Pression

Dans le code MARTHE, pour les calculs densitaires : au lieu de la pression **p**, dont l'unité légale est le Pascal, (1 Pa = N/m<sup>2</sup>), on utilise toujours la pression hydraulique **h** exprimée en hauteur d'eau douce équivalente, à température de référence. C'est le champ « PRESSION », d'extension de fichier [.press]. On utilise donc la relation :

$$h = \frac{p}{\rho_0 \cdot g}$$

Avec :

- h = Pression en hauteur d'eau douce, hors pression atmosphérique (m)
- p = Pression réelle (Pa)
- ρ<sub>0</sub> = Masse volumique de l'eau douce à la température de référence  
= 1000 kg/m<sup>3</sup>
- g = Accélération de la pesanteur  
= 9.81 m/s<sup>2</sup> (à Paris)

On a alors la relation numérique (en unités du système international) :

$$h = 1.019 \cdot 10^{-4} \cdot p$$

Dans MARTHE, par souci de concision, on utilise dans le mot « pression » pour désigner « pression hydraulique, en hauteur d'eau douce ».

L'unité utilisateur de pression est l'unité utilisateur de charge hydraulique (qui est aussi celle de l'altitude).

## 22.5 Charge hydraulique d'eau douce

C'est la hauteur **H<sub>d</sub>** de l'eau dans la colonne d'eau douce qui équilibre la pression mesurée à l'altitude **z**. C'est le niveau de l'eau douce qu'on observerait dans un piézomètre ponctuel crépiné à l'altitude **z** et rempli artificiellement par de l'eau douce :

$$H_d = h + z$$

Avec :

- H<sub>d</sub> = Charge hydraulique d'eau douce (m)
- h = Pression en hauteur d'eau douce (m)
- z = Altitude (orientée vers le haut) du point de mesure (m)

L'unité utilisateur de charge d'eau douce est l'unité utilisateur de charge hydraulique.



Cette charge d'eau douce  $H_d$  est parfois appelée « niveau pseudo-potentiométrique » mais il vaut mieux éviter ce terme qui peut prêter à confusion. Sur option, la charge d'eau douce, qui est la pression hydraulique corrigée de l'altitude, pourra être utilisée dans les calculs au lieu de la pression.

## 22.6 Charge hydraulique réelle (charge d'eau salée)

Soit un point situé à l'altitude  $z$ , ayant une pression  $h$  et une masse volumique  $\rho$ .

La charge hydraulique réelle  $H$  est la hauteur du fluide dense dans la colonne de fluide, de masse volumique  $\rho$ , qui équilibre la pression  $h$  :

$$H = z + p/\rho \cdot g$$

Soit en remplaçant «  $p$  » par «  $\rho_0 \cdot g \cdot h$  » :

$$H = z + h \cdot \rho_0/\rho = z + h/d$$

C'est le niveau de l'eau qu'on observerait dans un piézomètre ponctuel crépiné à l'altitude  $z$ , qui se remplirait naturellement avec l'eau de la nappe à cette altitude.

C'est cette charge hydraulique, qui est utilisée dans les calculs pour vérifier, dans chaque maille si la nappe est dénoyée, ou libre, ou déborde. En effet, si la maille n'est pas saturée d'eau, sa hauteur d'eau (saline) est bien égale à sa charge hydraulique réelle. Cette charge hydraulique réelle est parfois appelée « niveau piézométrique ».

Dans MARTHE, le terme « charge » désigne toujours la charge hydraulique réelle (champ « CHARGE »).

## 22.7 Salinité extérieure

C'est la salinité ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ) d'un éventuel fluide entrant dans l'aquifère soit par injection artificielle, soit par des limites à potentiel imposé : champ SALIN\_EXT d'extension de fichier [.salex]. Il est ainsi possible de simuler une injection d'un fluide plus dense que l'eau pure (eau salée) ou moins dense (eau chaude par exemple).

## 22.8 Salinité de la recharge

C'est la salinité ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ) de la recharge de l'aquifère par les précipitations atmosphériques (champ « SALIN\_RECH »). Dans MARTHE, elle concerne uniquement la recharge par les précipitations. Elle ne s'applique pas aux flux d'excès d'irrigation.



## 23 Principes des calculs de transport de salinité

Les lois de l'hydrodynamique appliquées à un fluide incompressible consistent à écrire 2 lois de conservation :

- La conservation du débit de fluide (de densité variable) ;
- La conservation de la masse de soluté (équation du transport par Convection Dispersion).

Le calcul est donc réalisé en 2 étapes successives :

- ① Dans un premier temps on suppose qu'on connaît en chaque point une première estimation de la salinité, et donc de la masse volumique du fluide. MARTHE calcule alors le champ de charge hydraulique qui en résulte. À partir du gradient de charge en tous point il détermine le champ de la vitesse d'écoulement.
- ② À partir de ce champ de vitesse MARTHE résout l'équation de Convection-Dispersion pour obtenir une estimation améliorée du champ de salinité.

Et on itère sur les étapes ① et ②.

### 23.1 Calcul du champ de charge hydraulique

On suppose qu'à ce stade on connaît le champ de la masse volumique  $\rho$  du fluide, donc sa densité, et on calcule le champ de la charge hydraulique qui en résulte. Le fluide étant considéré comme incompressible, on écrit l'équation de conservation du débit.

#### 23.1.1 Équation de conservation du débit de fluide

L'équation de conservation du débit s'écrit :

$$\sum_{i=1}^6 Q_i + Q_{\text{ext}} = \frac{\text{Volume stocké}}{dt}$$

Équation (1)

Avec :  $i$  = Une des 6 directions Nord, Sud, Est, Ouest, Haut et Bas  
 $Q_i$  = Débit provenant de la direction  $i$   
 $Q_{\text{ext}}$  = Débit extérieur, positif s'il est injecté, négatif s'il est prélevé.

#### 23.1.2 Discrétisation

MARTHE utilise un schéma à volumes finis, avec des mailles parallélépipédiques, qui se ramène dans les cas les plus simples à un schéma à différences finies. Dans un tel schéma chaque maille est caractérisée par une valeur des paramètres suivants :

- $k$ ,  $p$ ,  $\rho$ ,  $\mu$  constants dans toute la maille.

$k$  = Perméabilité intrinsèque.

$p$  = Pression réelle du fluide.

$\rho$  = Masse volumique du fluide.

$\mu$  = Viscosité dynamique du fluide (Pa.s  $\Leftrightarrow$  kg/m/s).

- $x, y, z$  coordonnées du centre de la maille.
- $V_N, V_S, V_E, V_W, V_H, V_B$  : 6 vitesses de Darcy à travers chacune des 6 faces de la maille.

Les vitesses de Darcy sont en fait les débits d'échange par unité de surface d'échange.

### 23.1.3 Échanges entre 2 mailles adjacentes

La vitesse de Darcy  $\mathbf{V}$  dérive du gradient de pression  $\mathbf{p}$ . Elle est donnée par la loi de Darcy qui s'écrit, en omettant les flèches sur les vecteurs :

$$\mathbf{V} = -\frac{k}{\mu} [\text{Grad } p + \rho \cdot \mathbf{g} \cdot \text{Grad } z] \quad (2)$$

C'est une expression vectorielle qui s'applique à chacune des 6 directions.

En utilisant la relation  $k = K \cdot \mu / \rho_0 \cdot g$  qui relie la perméabilité intrinsèque  $\mathbf{k}$  à la perméabilité à l'eau douce  $\mathbf{K}$  (appelée aussi conductivité hydraulique à l'eau douce), la loi de Darcy s'écrit :

$$\mathbf{V} = -\frac{K}{\rho_0 \cdot g} [\text{Grad } p + \rho \cdot \mathbf{g} \cdot \text{Grad } z] \quad (3)$$

En faisant intervenir la pression hydraulique  $\mathbf{h}$ , qui est la hauteur d'eau douce équivalente, et la densité relative  $\mathbf{d}$ , on obtient la relation :

$$\mathbf{V} = -K \cdot [\text{Grad } h + \mathbf{d} \cdot \text{Grad } z] \quad (4)$$

Soient 2 mailles adjacentes : la maille de calcul (indice  $\mathbf{c}$ ) et la maille voisine (indice  $\mathbf{v}$ ). La vitesse de Darcy  $\mathbf{V}_{vc}$  et le débit  $\mathbf{Q}_{vc}$  échangé de la maille  $\mathbf{v}$  vers la maille  $\mathbf{c}$  s'écrivent :

$$V_v = -K_{vc} \cdot [(h_v - h_c) + d_{vc} \cdot (z_v - z_c)] / dx_{vc} \quad (5)$$

$$Q_{vc} = T_{vc} \cdot [h_v - h_c + d_{vc} \cdot (z_v - z_c)] \quad (6)$$

Avec :

$K_{vc}$  = Perméabilité d'échange entre les 2 mailles.

$T_{vc}$  = Coefficient d'échange entre les 2 mailles.

$d_{vc}$  = Densité relative moyenne entre des mailles.

$dx_c$  = Largeur de la maille de calcul.

$dx_v$  = Largeur de la maille voisine.

$dx_{vc}$  = Distance entre les centres des mailles =  $(dx_v + dx_c) / 2$ .

### **Coefficient d'échange pour le calcul du débit échangé entre 2 mailles**

Dans MARTHE, plusieurs choix de pondération sont possibles pour le calcul du coefficient d'échange  $T_{vc}$  entre les 2 mailles : une pondération harmonique, une pondération géométrique ou une pondération amont. La pondération *harmonique* est la pondération logique, mais elle peut poser des problèmes numériques dans les calculs en ZNS. Par exemple : soit une maille voisine située à l'ouest de la maille de calcul. En choisissant une pondération *harmonique* et en prenant en compte les épaisseurs mouillées  $dz_v$  et  $dz_c$  dans chacune des mailles, et la largeur  $dy_c$  commune aux 2 mailles, on obtient la transmissivité équivalente  $T_{equiv}$  entre les 2 mailles par la relation classique :

$$\frac{dx_v}{K_v \cdot dz_v} + \frac{dx_c}{K_c \cdot dz_c} = \frac{dx_v + dx_c}{T_{equiv}} = \frac{2 dx_{vc}}{T_{equiv}}$$

Le coefficient d'échange  $T_{vc} = T_{equiv} \cdot dy_c / dx_{vc}$  est alors donné par :

$$T_{vc} = 2 \cdot dy_c \cdot (K_c \cdot K_v \cdot dz_c \cdot dz_v) / (K_c \cdot dx_v \cdot dz_c + K_v \cdot dx_c \cdot dz_v) \quad (7)$$

### **Densité moyenne pour le calcul du débit échangé entre 2 mailles**

On peut montrer facilement que, pour respecter un équilibre hydrostatique sur la verticale, la densité relative  $d_{vc}$  à prendre en compte pour les échanges est la moyenne arithmétique pondérée des 2 densités voisines  $d_v$  et  $d_c$  :

$$d_{vc} = (d_v \cdot dx_v + d_c \cdot dx_c) / (dx_v + dx_c).$$

#### **23.1.4 Terme de stockage**

Il faut donc relier la variation de volume stocké à la variation de pression  $h$ . Soit **Vol** le volume d'eau dans une maille et **Surf** l'aire horizontale de la maille.

En nappe captive on a :

$$\frac{d(\text{Vol})}{\text{Vol}} = S_s \cdot dh$$

Avec :  $S_s$  = Coefficient d'emménagement spécifique ( $m^{-1}$ )

$dh$  = Variation de pression hydraulique au cours du temps.

En nappe libre, on a :

$$\frac{d(\text{Vol})}{\text{Surf}} = S_L \cdot dH$$

Avec :  $H$  = Hauteur d'eau réelle dans la maille (charge hydraulique réelle) (m)

$S_L$  = Coefficient d'emménagement en nappe libre (-)

Si l'état de la nappe change au cours du pas de temps, on a une relation mixte qui dépend de  $S_s$ ,  $S_L$ ,  $H$ ,  $h$  et de la cote du toit de la nappe.

### 23.1.5 Mise en équation

En utilisant l'expression (6) et l'équation (1) de conservation du débit de fluide s'écrit :

$$\sum_i^6 T_i \cdot (h_i - h_c) + Q_{\text{ext}} + \sum_i^6 T_i \cdot d_i \cdot (z_i - z_c) = d(\text{Vol}) / dt \quad (8)$$

Avec :  $d(\text{Vol}) / dt = dx \cdot dy \cdot dz \cdot S_S \cdot (h_c - h_p) / dt$ , en nappe captive

$dx, dy, dz$  = Dimensions de la maille

$h_p$  = Pression hydraulique au début du pas de temps

$dt$  = Durée du pas de temps

$i$  = Indice de la valeur pondérée dans la direction  $i$ .

On obtient ainsi l'équation :

$$\underbrace{\sum_i A_i \cdot h_i - A_c \cdot h_c}_{\text{équation classique en pression}} = -B - E - \underbrace{F}_{\text{terme complémentaire}} \quad (9)$$

Avec :  $F = \sum T_i \cdot d_i \cdot (z_i - z_c)$  et  $E = S \cdot dx \cdot dy \cdot h_p / dt$

$A_i, A_c$  et  $B$  étant des constantes.

Avec :  $S = S_S \cdot dz$  si la nappe reste captive pendant le pas de temps  $dt$   
 $= S_L / d_p$  si la nappe reste libre  
 $= f(S_S, S_L, dz, d_p)$  si la nappe change d'état pendant  $dt$

### 23.1.6 Initialisation de la Charge hydraulique et de la Pression hydraulique

Les fichiers de données du code de calcul définissent les champs de :

- Salinité initiale ;
- Charge hydraulique initiale ;
- Pression hydraulique initiale.

La salinité définit la densité du fluide. Après avoir défini cette densité, il est redondant de fixer à la fois le champ de charge initiale **et** le champ de pression initiale, ces deux champs risquant de ne pas être cohérents entre eux.

Un paramètre de MARTHE permet de décider si le champ initial à retenir est la charge hydraulique initiale **ou** la pression hydraulique initiale. Le deuxième champ (pression si on a retenu la charge, ou charge si on a retenu la pression) est alors calculée par la relation :

$$H = z + h / d \quad \text{ou} \quad h = (H - z) \cdot d$$

La charge hydraulique et la pression hydraulique sont alors au pair (compte tenu de la densité).

Quel que soit le mode de résolution, le « potentiel » correspondant (charge hydraulique, ou pression) est imposé dans les mailles à « potentiel imposé » et les résultats obtenus ne dépendent pas de ce choix. Il est conseillé, à chaque fois que c'est possible de choisir une initialisation en charge hydraulique, plutôt qu'en pression hydraulique.

### 23.1.7 Résolution du système d'équations

#### a) Résolution en pression hydraulique

Ce système d'équations, écrit en pression hydraulique, se résout facilement par la méthode des gradients conjugués. Ce système est cependant mal conditionné. En conséquence sa résolution peut poser quelques problèmes numériques, surtout dans une implémentation en simple précision. En effet dans un schéma d'écoulement classique la charge hydraulique est souvent quasi constante sur la verticale. La pression hydraulique en revanche croît linéairement avec la profondeur. Par exemple si on a une variation de 1 m de charge sur 1 000 mètres d'épaisseur d'aquifère - ce qui est réaliste - une erreur relative de  $10^{-4}$  sur la pression du fond, soit une erreur de  $10^{-1}$  mètre, induit une erreur de charge de  $10^{-1}$  mètre. Cette erreur qui représente 10 % de la différence de charge hydraulique n'est pas acceptable. Il vaut mieux alors réaliser les calculs en charge hydraulique réelle ou bien en charge hydraulique d'eau douce.

#### b) Résolution en charge hydraulique (réelle)

Étant donné que MARTHE est un code de calcul général qui permet de simuler une nappe libre éventuellement localement dénoyée, il faut être en mesure de connaître le niveau réel de l'eau dans chaque maille.

Dans chaque maille la charge hydraulique (réelle) **H** est donnée par :

$$H = z + p/\rho \cdot g \quad (10)$$

C'est la hauteur du fluide de densité  $\rho$  (et non  $\rho_0$ ) dans la maille.

On a donc :

$$H = z + h \cdot \rho_0/\rho$$

C'est-à-dire :

$$H = z + h/d \quad (11)$$

L'équation (6) donnant le débit échangé entre 2 mailles s'écrit :

$$Q_{vc} = T_{vc} \cdot [h_v - h_c + d_{vc} \cdot (z_v - z_c)]$$

En remplaçant  $h_v$  et  $h_c$  par leur expression en fonction de **H**, on en déduit :

$$Q_{vc} = T_{vc} \cdot [(d_v \cdot H_v - d_v \cdot z_v) - (d_c \cdot H_c - d_c \cdot z_c) + d_{vc} \cdot (z_v - z_c)]$$

$$Q_{vc} = T_{vc} \cdot [d_v \cdot H_v - d_c \cdot H_c + d_c \cdot z_c - d_v \cdot z_v + d_{vc} \cdot (z_v - z_c)]$$

On définit alors la nouvelle variable **HH** (qui est parfois appelée « niveau pseudo-piézométrique ») :

$$HH = d \cdot H \text{ (c'est-à-dire, en fait : } h + d \cdot z \text{)} \quad (12)$$

Et on obtient :

$$Q_{vc} = T_{vc} \cdot [HH_v - HH_c + f_{vc}] \quad (13)$$

Avec :

$$f_{vc} = [d_c \cdot z_c - d_v \cdot z_v + d_{vc} \cdot (z_v - z_c)] \quad (14)$$

La variable **HH** a bien la « dimension » d'une charge hydraulique. Comme toute « charge hydraulique » elle dépend généralement peu de l'altitude **z** dans les schémas d'écoulement classiques à prédominance horizontale.

L'équation de conservation du débit s'écrit alors :

$$\sum_i T_i \cdot HH_i - \left( \sum T_i \right) \cdot HH_c = -Q_{ext} - \sum_i T_i \cdot f_i - E \quad (15)$$

Soit :

$$\sum_i A_i \cdot HH_i - A_c \cdot HH_c = -B - F - E$$

Cette équation se résout immédiatement et exactement par la méthode des gradients conjugués. On obtient alors **HH**, d'où MARTHE déduit la charge hydraulique **H** :

$$H = HH / d \quad \text{(la densité « d » étant connue)}$$

**H** permet alors de tester l'état de saturation ou de dénoyage dans chaque maille. La seule légère difficulté pratique survient si la densité **d** n'est pas connue mais doit être calculée par le logiciel. En effet les conditions aux limites de l'équation (15) conduisent à imposer **d · H** et non **H**. Il faut donc réactualiser **d · H** à chaque nouvelle estimation de **d**.

### **c) Résolution en charge d'eau douce**

La charge d'eau douce **H<sub>d</sub>** est définie par :

$$H_d = h + z$$

L'équation (6), donnant le débit échangé entre 2 mailles, écrite en **H<sub>d</sub>**, devient :

$$\begin{aligned} Q_{vc} &= T_{vc} [(H_{dv} - z_v) - (H_{dc} - z_c) + d_{vc} (z_v - z_c)] \\ Q_{vc} &= T_{vc} [H_{dv} - H_{dc} + f_{vc}] \end{aligned} \quad (16)$$



Avec :

$$f_{VC} = (d_{VC} - 1) \cdot (z_V - z_C) \quad (17)$$

L'équation de conservation du débit s'écrit alors :

$$\sum_i T_i \cdot H_{d_i} - (\sum T_i) \cdot H_{d_c} = -Q_{ext} - \sum_i T_i \cdot f_i - E \quad (18)$$

Soit :

$$\sum_i T_i \cdot H_{d_i} - A_c \cdot H_{d_c} = -B - F - E$$

Le système d'équations se résout immédiatement par la méthode des gradients conjugués. La résolution est identique à la résolution en pression hydraulique, mais chaque équation est centrée par rapport à  $\mathbf{z}$ . Le système est donc beaucoup mieux conditionné. Les conditions aux limites se déduisent immédiatement des conditions aux limites en pression. Il suffit d'ajouter l'altitude à une pression hydraulique imposée pour obtenir la charge d'eau douce imposée.

Après résolution, on obtient le champ de charge d'eau douce  $\mathbf{H}_d$ , que MARTHE transforme en champ de charge hydraulique réelle  $\mathbf{H}$  par la relation :

$$H = H_d / d + z \cdot (1 - 1 / d)$$

MARTHE utilise alors ce champ de charge  $\mathbf{H}$  pour contrôler les dénoyages et les débordements.

C'est ce schéma de résolution qui est conseillé. Il peut toujours être utilisé, sauf dans le cas d'un système présentant en certaines mailles la condition limite suivante :

« Charge hydraulique réelle imposée », mais « salinité non imposée ».

#### **d) Choix du mode de résolution**

Quel que soit le mode de résolution choisi, les résultats sont du même ordre mais les résultats obtenus par un calcul en charge hydraulique réelle, ou en charge d'eau douce, sont plus précis. En particulier, le bilan des débits échangés est amélioré. Il y a cependant quelques différences d'interprétation.

- **Potentiels imposés**

Selon le mode de résolution, le « potentiel » correspondant (charge, charge d'eau douce, pression) est imposé dans les mailles à potentiel imposé. Nous employons ici le terme de « potentiel » pour désigner la charge, la charge d'eau douce ou la pression, bien qu'il ne s'agisse pas à proprement parler d'un potentiel d'où dériveraient les vitesses. En fait les mailles à « potentiel imposé » désignent les mailles dans lesquelles une charge hydraulique ou une pression hydraulique est imposée.

- **Zone équipotentielle (déconseillé)**

Si on définit des zones équipotentielles (*déconseillé*), le schéma de résolution impose un potentiel constant (non spécifié) dans chacune de ces zones.

Si les calculs sont réalisés en charge hydraulique réelle, la charge hydraulique, donc le niveau de l'eau, sera uniforme dans chaque zone (par exemple, le niveau de l'eau dans un drain, une cavité).

Si la résolution est en charge hydraulique d'eau douce, c'est la charge hydraulique d'eau douce qui sera uniforme (la pression sera uniforme uniquement si la zone équipotentielle est à altitude constante).

Si les calculs sont réalisés en pression hydraulique, la pression hydraulique sera uniforme dans chaque zone (par exemple, la pression atmosphérique dans une galerie ou une cavité).

## 23.2 Conservation de la masse de soluté (transport)

### 23.2.1 Mise en équation

On admet une relation entre la masse volumique  $\rho$  du fluide, sa concentration (salinité)  $C$  en un soluté (par exemple du sel NaCl) et sa température TEMPER :

$$\rho = f(C, \text{TEMPER})$$

Ou bien :

$$d = f(C, \text{TEMPER}) / \rho_0$$

Par exemple, à température constante, on pourra choisir une relation linéaire :

$$\rho = \rho_0 + a \cdot C$$

Le calcul du champ de masse volumique (ou de densité) est obtenu par l'équation de conservation de la masse du soluté. Cette équation de conservation de la masse correspond au transport par Convection et Dispersion de la salinité  $C$ .

L'équation de conservation de la masse du soluté (équation du transport) s'écrit :

$$\frac{\partial(\omega \cdot C)}{\partial t} = \frac{\partial^2(D \cdot \omega \cdot C)}{\partial x^2} - \frac{\partial(V \cdot C)}{\partial x} + Q_M \quad (19)$$

Avec :

D	= Coefficient de dispersion	(m <sup>2</sup> /s)
V	= Vitesse de Darcy	(m/s)
Q <sub>M</sub>	= Flux massique injecté (terme source)	(kg/s/m <sup>3</sup> )
ω	= Porosité cinématique	(m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> )

### 23.2.2 Discrétisation et résolution

C'est un problème de transport absolument analogue au transport de masse classique du code de calcul MARTHE. Un couplage itératif entre le calcul du champ de charge et le calcul du champ de salinité est cependant nécessaire puisque : la salinité dépend du transport, qui dépend du champ de vitesse, qui dépend de la densité, qui dépend ... de la salinité.

## 23.3 Conditions aux limites et termes sources

### 23.3.1 Équation du transport

Les conditions aux limites sont absolument identiques à celles du transport de masse classique dans le MARTHE décrites en début de ce rapport :

- **Salinité imposée**

Pour imposer la salinité dans une maille : On fixe dans cette maille le champ « SALINITE » à la salinité souhaitée et on indique que cette valeur est imposée en fixant dans cette maille le champ « SALIN\_EXT » à la valeur 9999.

- **Salinité extérieure**

C'est la salinité provenant de l'extérieur (champ SALIN\_EXT, d'extension de fichier [.salext]). C'est la salinité du fluide qui rentre dans la maille. Si le fluide entre (débit > 0), il entre avec cette salinité. S'il le fluide sort (débit < 0), cette salinité n'est pas prise en compte. Cette condition limite correspond par exemple à un aquifère bordé par la mer ou par un lac (bien mélangé). Le champ SALIN\_EXT correspond au champ CONCEN\_EXT (« concentration extérieure ») du transport de masse classique.

- **Salinité de l'infiltration (par les précipitations)**

C'est la salinité dans le flux d'infiltration (ou de recharge) dans les zones où de flux est positif, c'est-à-dire entrant. Ce champ, noté SALIN\_RECH, correspond au champ CONCEN\_RECH (« concentration dans la recharge ») du transport de masse classique.

- **Flux massique imposé**

Champ QMASS\_SALIN, d'extension de fichier [.qmas\_s]. Ce champ correspond au champ QMASS\_CONC du transport de masse classique. Le flux massique est exprimé en masse par unité de temps [M.T<sup>-1</sup>]. Dans le code MARTHE il est donné par défaut en unité utilisateur de masse par unité utilisateur de temps. Il est cependant possible, par une option dans le paragraphe « Unités des données », de donner ce flux massique en unité de masse par unité de temps et par mètre carré de « surface de maille perpendiculaire à la pesanteur ».

- **Injection instantanée de masse dense (Dirac)**

C'est un apport instantané de masse dense (sous forme d'un Dirac) : champ MASS\_SALIN d'extension de fichier [.msali]. Ce champ correspond au champ MASS\_CONCEN du transport de masse classique. Dans le code MARTHE cette injection de masse est donnée en unité utilisateur de masse. Il est cependant possible, par une option dans le paragraphe « Unités des données », de donner cet apport de masse en unité de masse par mètre carré de « surface de maille perpendiculaire à la pesanteur ».

### 23.3.2 Équation hydrodynamique (Charge hydraulique ou Pression hydraulique)

Les conditions aux limites sont identiques à celles du calcul classique de la charge hydraulique.

- **Potentiel imposé**

Selon le type de résolution, il est possible d'imposer :

- La charge hydraulique, ou bien,

- La pression hydraulique

Il convient de remarquer que si la salinité (donc la densité) est imposée dans une maille, il est équivalent d'y imposer une charge ou une pression. Si la salinité (donc la densité) est calculée et résulte du champ de charge hydraulique (ou de pression hydraulique), l'imposition d'une nouvelle charge produit une pression qui dépend de la densité. Réciproquement, l'imposition d'une pression produit une charge (réelle) qui dépend de la densité.

- **Débit nul**

C'est une limite étanche classique. (Limite étanche en débit de fluide).

- **Débit imposé**

C'est un terme source classique (pompage ou injection de fluide). Il s'agit bien de débit volumique ( $m^3/s$ ).

## 23.4 Régime transitoire

MARTHE permet de calculer le champ de charge (ou de pression) en régime permanent ou en régime transitoire. Il permet également de calculer le champ de salinité en régime permanent ou en régime transitoire. Dans le cas général, en régime transitoire, on aura un calcul d'hydrodynamique en transitoire et un calcul de transport en transitoire. Cependant pour les nappes captives on pourra parfois se contenter de calculer l'hydrodynamique en permanent compte tenu des faibles coefficients d'emmagasinement captifs.

## 23.5 Couplage hydraulique et transport

### 23.5.1 Relation entre la salinité et la densité

La densité du fluide est calculée à partir de la salinité **C** suivant une relation linéaire ou non :

$$\rho = \text{fonction}(C, T)$$

Avec :

**C** = Salinité = concentration en soluté en  $kg/m^3$  (kg de soluté par  $m^3$  de solution),

$\rho$  = Masse volumique du fluide en  $kg/m^3$ ,

**T** = Température locale du fluide.

Parmi les lois classiques, on admet généralement pour l'eau salée à température **T** constante :

- une loi linéaire en fonction de la salinité :

$$\rho = 1000 + a \cdot C$$

Avec :

- **a** = 0.70 environ, si « **C** » est exprimé en  $kg/m^3$  de NaCl (Figure 56).
- **a** = 1.15 environ, si « **C** » est exprimé en  $kg/m^3$  d'ion Cl<sup>-</sup>.
- **a** est négatif pour un fluide plus léger que l'eau

- On peut aussi utiliser la relation Schlumberger (décrite par Vandenbeusch, 1976 révisée), valable jusqu'à une concentration maximale en NaCl dépassant  $250 \text{ kg/m}^3$  :

$$\rho = 1000 \cdot [1 + C / (a \cdot C + b)]$$

Avec :

$$a = 0.5677$$

$$b = 1341.3$$

Pour d'autres solutés que le sel, on pourrait avoir des lois du même type mais avec d'autres coefficients.

En cas de prise en compte des effets de la température, d'autres lois de type  $\rho = f(C, T)$ , sont disponibles : voir les Figure 55 à Figure 58.

Remarque : Dans cette version de MARTHE, la variation de la viscosité en fonction de la salinité n'est pas prise en compte, mais cette variation est faible, sauf pour les fluides très denses (Figure 49). Cette figure montre que de l'eau de mer (25 g de NaCl par litre) a une viscosité cinématique augmenté de seulement 3.5 % par rapport à de l'eau douce.

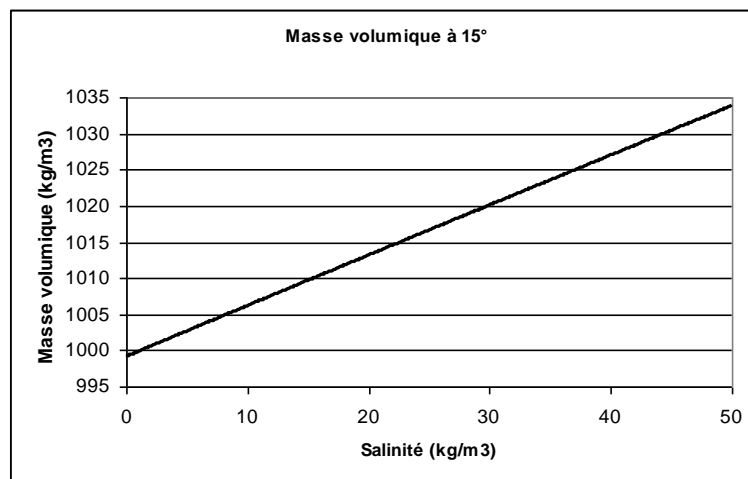


Figure 55 – Masse volumique d'une solution saline à 15 °C en fonction de la salinité (Concentration volumique en sel NaCl).

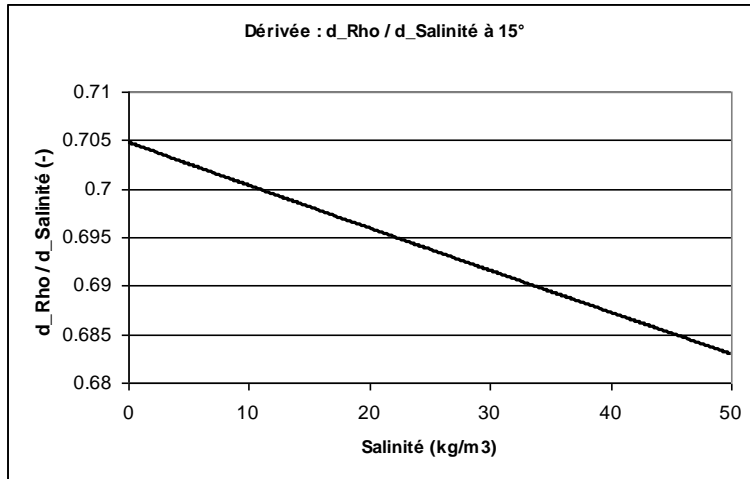


Figure 56 – Dérivée de la masse volumique par rapport à la salinité (concentration en NaCl).

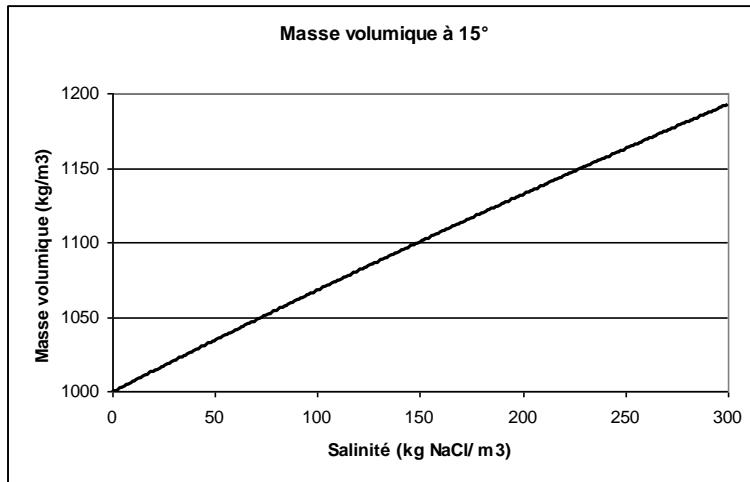


Figure 57 – Masse volumique à 15 °C d'une solution saline fortement concentrée en fonction de la salinité (NaCl).

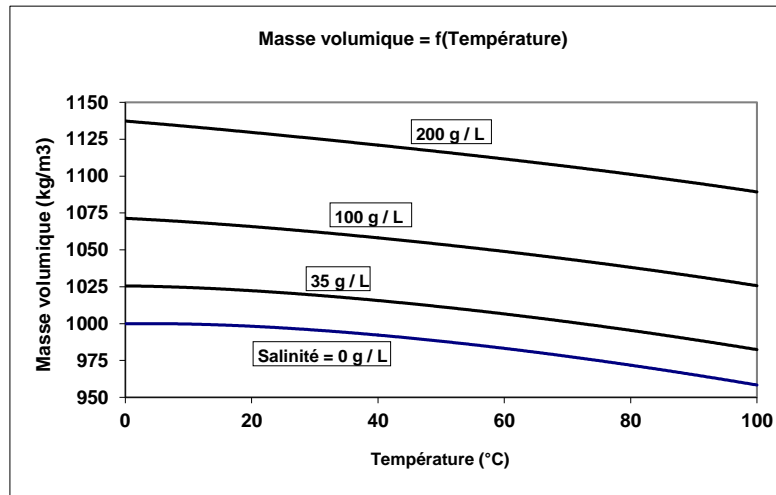


Figure 58 – Variation de la masse volumique en fonction de la température (salinité 0, 35, 100 et 200 kg/m<sup>3</sup> de NaCl).

### 23.5.2 Nécessité du couplage

La salinité - d'où la masse volumique et la densité - est calculée par l'équation du transfert de masse. Cette équation (19) fait intervenir les débits d'échanges  $Q_i$  entre mailles. Or ces débits d'échanges sont calculés par la loi de Darcy, donnée par la relation (2), qui dépend elle-même des densités. Pour tenir compte de ce couplage MARTHE utilise une méthode itérative, la méthode de Picard :

- On part d'un champ initial de salinité (donc de densité) ;
- On calcule le champ de la charge (ou de la pression).

En utilisant l'équation de conservation du débit (conservation du volume, donc de la masse de fluide), qui utilise la loi de Darcy : on obtient le champ du débit d'échange, en fonction de ce champ de densité ;

- On calcule le champ de la salinité, par l'équation de conservation de la masse de soluté (équation du transport de masse) ;
- On calcule le nouveau champ de densité à partir du champ de salinité.

On boucle alors sur les actions b), c) et d).

Dans le cas d'une méthode de transport faisant intervenir des particules (Méthode des caractéristiques MOC), MARTHE utilise une seule itération de couplage, puisque qu'après déplacement, les positions des particules ne peuvent être reculées. Il faut donc a priori utiliser des pas de temps plus petits avec la méthode MOC.

### 23.5.3 Stabilisation du couplage par sous-relaxation

Le couplage itératif peut être instable ou oscillant, surtout en régime permanent, puisqu'une faible variation de densité peut entraîner de grandes variations de gradient de charge, qui vont entraîner à leur tour de grandes variations de débit, donc de plus grandes variations de densité. On introduit donc un coefficient de sous-relaxation, donc de ralentissement,  $R_c$  qui s'applique au calcul de la salinité (donc indirectement au calcul de la densité).

La sous-relaxation utilise la relation suivante :

$$C_k = C_{k-1} + R_C \cdot (C - C_{k-1})$$

- Avec :
- $C_{k-1}$  = Salinité à l'itération précédente **k-1**
  - $C$  = Nouvelle salinité calculée par l'équation du transport de masse
  - $C_k$  = Salinité actualisée à l'itération **k**
  - $R_C$  = Coefficient de relaxation sur le couplage (< 1).

Les calculs sont d'autant plus stabilisés (et ralentis) que  $R_C$  est petit : si  $R_C = 1$ , il n'y a aucune stabilisation ; si  $R_C = 0$ , la densité n'est plus actualisée. Le nombre d'itérations de couplage devra naturellement être augmenté si on utilise un coefficient  $R_C$  très inférieur à 1. Le nombre d'itérations de couplage devra au moins être égal à **Nc** défini par la relation :

$$Nc = -1.7 / \text{Log}_{10}(1 - R_C)$$

Ceci conduit aux valeurs suivantes du nombre minimal d'itérations :

Coefficient de relaxation	0.7	0.5	0.3	0.1	0.05	0.01	0.001
Nombre min. d'itérations	3	6	11	37	76	390	3900

La valeur du coefficient de sous-relaxation de couplage à choisir dépend de la sensibilité du système à la densité. En effet, si on écrit la loi de Darcy en fonction de la charge équivalente en eau douce  $H_d$ , les relations (4), (16) et (17) permettent d'obtenir :

$$V = -K \cdot [\text{Grad}(H_d - z) + d \cdot \text{Grad} z]$$

Soit sous forme adimensionnelle :

$$-V/K = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{vitesse due} \\ \text{au gradient de} \\ \text{charge (douce)}}}{\text{Grad } H_d} + (d - 1) \cdot \underset{\substack{\uparrow \\ \text{vitesse due} \\ \text{à l'effet de} \\ \text{densité}}}{\text{Grad } z}$$

Le coefficient de relaxation devra donc être d'autant plus petit que :

- Les variations de densité sont grandes ;
- Les variations de charge hydraulique sont petites.

En pratique, en régime permanent, le coefficient de sous-relaxation de couplage peut avoir une valeur de 0.2 à 0.3 pour les schémas stables, à 0.01 pour des systèmes peu stables (lentille d'eau douce en milieu poreux insulaire par exemple ou biseau salé avec fractures et très forts contrastes de perméabilité). En régime transitoire il peut être plus efficace d'utiliser un coefficient  $R_C$  égal à 1, mais associé à des pas de temps adaptés pour éviter les instabilités.



#### **23.5.4 Réajustement du champ de charge hydraulique et du champ de pression**

Après calcul du champ de salinité, donc du champ de densité, les champs de pression et de charge ne sont plus au pair. MARTHE les réajuste donc :

- si on a choisi une résolution en charge : le champ de pression est recalculé à partir du champ de charge et du champ de densité calculé ;
- si on a choisi une résolution en charge d'eau douce ou en pression : le champ de charge hydraulique réelle est recalculé à partir du champ de pression et du champ de densité calculé.



## 24 Les fichiers de données supplémentaires pour le transport de salinité


Les fichiers ou champs supplémentaires pouvant être utilisés pour le transport de masse sont listés dans la Figure 59.

<i>Aquifère :</i>	
Pression de l'eau	: PRESSION
Porosité = Teneur en Eau à Saturation	: POROSITE
Salinité du fluide	: SALINITE
Salinité Extérieure	: SALIN_EXT
Salinité dans la Recharge [Ce n'est pas un fichier spatialisé]	: SALIN_RECH
Débit Massique de Salinité	: QMASS_SALIN
Dirac de Masse de Salinité	: MASS_SALIN
Diffusion Moléculaire spatialisée	: DIFFUS_MOLEC
Dispersivité Longitudinale spatialisée	: DISPER_LONGI
Dispersivité Transversale spatialisée	: DISPER_TRANSV
Asservissement Salinité : Pompage => Injection:	SALINI_RE-INJ
<i>Rivières :</i>	
Salinité dans la Rivière	: SALIN_RIVI
Salinité Extérieure de Rivière	: SALIN_EXT_RIV
Débit massique de Salinité dans la Rivière	: Q_SALIN_RIVI
Dirac Masse de Salinité dans la Rivière	: MASSE_SALI_RIV
<i>Drains :</i>	
Salinité de Drain/Conduit	: SALIN_DRAIN
Salinité Extérieure de Drain/Conduit	: SALI_EXT_DRAI
Débit Massique de Salinité de Drain/Conduit	: Q_SALIN_DRAIN
Dirac de Masse de Salinité de Drain/Conduit	: M_SALIN_DRAIN
<i>Autres :</i>	
Index d'exclusion du calcul de salinité	: ZON_NO_SALINI
Particules de Salinité	: PARTIC_SALIN
Départs de Trajectoires	: DEPART_TRAJ

Figure 59 – Liste des fichiers (et des champs) relatifs au transport de salinité



## 25 Description détaillée des paramètres relatifs à la prise en compte des effets de la densité

Le fichier des paramètres est créé ou modifié avec le module de « Gestion des données non maillées » (module « Paramart »), accessible par le bouton  de la barre d'outils du bas du cadre de WinMarthe.

### 25.1 Unités des données

On décrit ici uniquement les paramètres nécessaires à la prise en compte des effets de densité.

```
*** Unités des données ***
cm/s = Unité de Perméabilité des aquifères en m/s (ou m2)
1e-7 = Unité de Débit en m3/s (ou kg/s si Gaz)
cm = Unité de Charge, Altitude, Pression en m
0 = Unité de coefficient d'Emmagasinement Captif en [-] ou [m-1]
% = Unité de coefficient d'Emmagasiments Libre en [-] ['%' si en %]
min = Unité de Temps (des Pas de temps) (sec, min, heu, jou, déca, moi, ann)
cm = Unité de Coordonnée Horizontale en m
-> 0 = Unité de Salinité en kg/m3
-> % = Unité de Porosité = Teneur en eau en [-] ['%' si en %]
-> g = Unité de Masse en kg
0 = Type de Perméabilité : (Déf=0 => Perméab. à l'eau ; 1=Perméab intrins.)
0 = Type de Débit Massique et de Chaleur : [Déf=0 => Par maille ; 'm2'=> Par m2]
```

#### 25.1.1 Unité de la salinité

Valeur par défaut : 0 => kg/m<sup>3</sup>.

C'est l'unité de concentration volumique de salinité (ou « soluté dense »).

#### 25.1.2 Unité de la porosité = teneur en eau

Valeur par défaut : 0 => m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>. => Sans unité.

Si la porosité est donnée en % : utiliser le caractère « % » ou bien donner la valeur 0.01

Voir le chapitre décrivant le transport de masse classique.

#### 25.1.3 Unité de masse

Valeur par défaut : 0 => kg.

Voir le chapitre décrivant le transport de masse classique.

## 25.2 Options de Géométrie, États de référence

```

*** Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs ***
  100 = Épaisseur de la tranche de coupe (Unité de Coordonnée de maille ou degrés)
    0 = État initial [0=Charge ; 1=Pression ; 2=Saturation ; etc.] (Déf=Charge)
Vertic = Orientation du maillage : 0=Standard ; 1=Coupe verticale : pesanteur sur Oy
    0 = Angle correcteur de la Direction de la Pesanteur (en degrés)
    0 = Effet angle correcteur : 0=Orthonormé ; 1=Escalier (Perspective Cavalière)
    0 = Initialisation des Nombres Aléatoires (pour les particules) [Déf=0 => 1789]
    0 = Calcul à symétrie Cylindrique [0=Non ; 1=Oui]
    0 = Viscosité (dynam.) de l'Eau si Perméabilités Intrinsèques [Déf=0 => 1.002e-3]
    0 = Compressibilité de l'Eau [m-1] [Déf=0 => 5e-6]
    
```

### 25.2.1 État initial à prendre en compte

Valeur par défaut : 0 => Charge hydraulique réelle.

Les fichiers de données initiales se rapportent à :

- La salinité (donc la masse volumique) ;
- La charge hydraulique (réelle) ;
- La pression hydraulique.

Étant donné qu'il existe une relation entre ces 3 champs :

$$H = z + h \cdot \rho_0 / \rho,$$

Il n'est pas possible de donner indépendamment une valeur initiale à chacun de ces 3 champs.

MARTHE conserve toujours la valeur initiale de la salinité. On lui indique donc, par ce paramètre, s'il faut retenir les valeurs :

- Du fichier de la charge hydraulique réelle initiale (cas général)
  - Ou bien celles du fichier de la pression hydraulique initiale (en hauteur d'eau douce).
- « Charge » = 0 : MARTHE retient le fichier de la charge hydraulique (réelle) **H**.  
Il en déduit la pression hydraulique **h**.
- « Pression » = 1 : MARTHE retient le fichier de la pression hydraulique **h**.  
Il en déduit la charge hydraulique (réelle) **H**.

À chaque fois que c'est possible, il est conseillé de choisir une initialisation en charge hydraulique (c'est valeur par défaut).

## 25.3 Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité

```

*** Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité ***
-> 25 = Nombre maxi d'itérations pour *Couplage* Densité/Pression ou Viscosité/Tempér
-> 0 = Coefficient de Relaxation pour Couplage Densité/Pression, etc. [Déf=0 => 1]
-> 0 = Nombre maxi d'itérations pour *Transport* Salinité/Chaleur, etc [Déf=0 => 20]
-> DF = Méthode de Transport [0=Diff_Finies ; 1=Random_Walk ; 2=MOC ; 3=TVD]
6.6e-6 = Diffusion moléculaire (m2/s) [* = Spatialisée]
0 = Dispersivité Longitudinale (m) [* = Spatialisée]
0 = Dispersivité Transversale (m) [* = Spatialisée]
-> 0 = Solveur pour les calculs de Transport [0=Orthomin ; 2=Autre]
-> 0 = Concentration/Température Non limitée par les mini/maxi
    [Déf=0 => Limitées ; 1=Non Limitées]
-> 0 = Rapport Dispersivité Transvers. Vertic. / Dispersivité Transvers. Horizontale

```

### 25.3.1 Nombre maximal d'itérations pour le couplage

Valeur par défaut : 0 => Pas d'itérations de couplage, donc pas de couplage.

Ce paramètre définit le nombre maximal d'itérations de couplage entre les calculs d'hydraulique (charge ou pression) et les calculs de transport.

Si on donne la valeur 0 à ce paramètre il n'y aura pas de couplage, donc pas de calcul de la salinité.

0 = Pas de couplage, donc pas de calcul de la salinité.

$N > 0$  = Au maximum **N** cycles de calculs, formés chacun d'un calcul d'hydraulique (charge hydraulique) suivi d'un calcul de transport de la salinité. Le couplage se termine au plus tard après ces **N** itérations de couplage.

Le couplage se termine avant si la variation de charge en début de calcul de charge, est inférieure au seuil de convergence de la charge.

En régime permanent (pour le calcul du transport) il peut être nécessaire d'utiliser un nombre d'itérations de couplage assez grand (20 ou 100 itérations) surtout si le couplage est fort, avec des calculs instables qui nécessitent un coefficient de sous-relaxation  $R_C$  très inférieur à 1.

Le nombre d'itérations de couplage devra au moins être égal à **Nc** défini par la relation :

$$Nc = -1.7 / \text{Log}_{10}(1 - R_C)$$

Ceci conduit aux valeurs suivantes du nombre minimal d'itérations :

Coefficient de relaxation	0.7	0.5	0.3	0.1	0.05	0.01	0.001
Nombre min. d'itérations	3	6	11	37	76	390	3900

En régime transitoire, avec de petits pas de temps, seules quelques itérations de couplage sont nécessaires.

Dans le cas d'un schéma de transport faisant intervenir des particules (Méthode des caractéristiques MOC), MARTHE n'utilise qu'une seule itération de couplage puisque qu'après déplacement, les positions des particules ne peuvent être reculées. Le coefficient de sous-relaxation doit alors être égal à 1. Il faut donc, *a priori*, utiliser des pas de temps plus petits dans ce dernier cas.

### **25.3.2 Coefficient de relaxation pour le couplage Densité/Pression/Chaleur**

Valeur par défaut : 0 => Pas sous-relaxation de couplage.

Ce paramètre définit le coefficient de sous-relaxation pour le couplage entre le calcul d'hydraulique (calcul de la charge) et le calcul de transport (calcul de la salinité).

En régime permanent (pour le calcul du transport) il peut être nécessaire d'utiliser un faible coefficient de sous-relaxation, de l'ordre de 0.3 ou même 0.1 ou 0.01, surtout si le couplage est fort, avec des calculs instables. Le nombre d'itérations de couplage devra naturellement être augmenté si on utilise un coefficient  $R_C$  très inférieur à 1. En régime transitoire, avec de petits pas de temps, un coefficient de sous-relaxation de 1 (valeur par défaut) peut convenir.

### **25.3.3 Coefficient de diffusion moléculaire**

Ce paramètre, décrit dans le chapitre relatif au transport de masse classique, peut être spatialisé si on lui donne la valeur « \* ». On peut alors définir (dans le fichier projet [.rma], ou bien dans les « modifications initiales ») le champ DIFFUS\_MOLEC, d'extension de fichier [.dimol].

### **25.3.4 Dispersivité longitudinale**

Ce paramètre, décrit dans le chapitre relatif au transport de masse classique, peut être spatialisé si on lui donne la valeur « \* ». On peut alors définir (dans le fichier projet [.rma], ou bien par des « modifications initiales ») le champ DISPER\_LONGI, d'extension de fichier [.alfal].

### **25.3.5 Dispersivité transversale**

Ce paramètre, décrit dans le chapitre relatif au transport de masse classique, peut être spatialisé si on lui donne la valeur « \* ». On peut alors définir (dans le fichier projet [.rma], ou bien par des « modifications initiales ») le champ DISPER\_TRANSV, d'extension de fichier [.alfat].



## 25.4 Salinité, densité

```

*** Salinité, Densité                                     ***
Douce = Effet de la Densité (0=Non ; 1=Charge ; 2=Pression ; 3=Charge d'eau Douce)
Linéai = Loi de Densité(Salinité) (0=Non ; 1=Linéaire ; 3=Schlumberger_VDB[Salinité])
1 = Dérivée de la loi Densité = F(Salinité) si loi Linéaire [Déf=0 => 0.7]
(P) 0 = Masse de chaque particule de Salinité (si particules)
1e-4 = Variation moy. de Salinité entre 2 itérat pour convergence [Déf=0 => 1e-8]
Transit = Régime du Transport de Salinité [0=Transitoire ; 1=Permanent]
(P) 0 = Nombre max possible de particules de salinité (MOC ou R.W.) [Déf=0 => 60000]
1 = Calcul (Transport) de la Salinité

```

Remarque : Les paramètres marqués (**P**) ne concernent uniquement les schémas de transport faisant intervenir des Particules : schéma MOC (ou Random Walk).

### 25.4.1 Effet de la densité

Valeur par défaut : 0 => Pas de prise en compte des effets densitaires.  
(Sauf si, plus bas dans ce paragraphe « Salinité, densité », on sélectionne : « Calcul de la salinité »).

Il faut donner à ce paramètre la valeur suivante :

- 0 = Pas de prise en compte de la densité : calcul standard de la charge ;
- « Charge » = 1 = Prise en compte de la densité : résolution en Charge réelle (Méthode conseillée) ;
- « Pression » = 2 = Prise en compte de la densité : résolution en Pression (déconseillé) ;
- « Douce » = 3 = Prise en compte de la densité : résolution en Charge d'eau douce.

Il convient de noter que si on donne une valeur positive à ce paramètre il y aura « prise en compte » des effets de la densité (résultant de la salinité initiale lue par MARTHE, ou de la température).

Cependant il n'y aura pas forcément un « calcul de la salinité ». Le calcul de la salinité est choisi par un autre paramètre de ce paragraphe « Salinité, densité ».

Remarque : Si dans le paragraphe « [Température, effets thermiques](#) » on sélectionne une loi de « densité en fonction de la température », Il y aura automatiquement la prise en compte des effets densitaires (résolution des calculs en charge hydraulique), même si on n'a pas sélectionné cette option.

### 25.4.2 Loi reliant la masse volumique du fluide à la salinité

Valeur par défaut : 0 => La densité ne dépend pas de la salinité.

- 0 = Pas de dépendance
- Linéaire = 1 = Dépendance linéaire :  $\rho = 1000 + a \cdot C$   
(**a** est défini par le paramètre suivant)
- Schlumb = 3 = Relation Schlumberger (Vandenbeusch, 1976 révisée).  
Valable jusqu'à une concentration en NaCl de plus de 250 kg/m<sup>3</sup> :  
$$\rho = 1000 \cdot [1 + C / (1341.3 + 0.5677 \cdot C)].$$

En cas de prise en compte des effets de la température, d'autres lois de type  $\rho = f(\text{Concentr.}, \text{Température})$ , sont disponibles. Ces lois sont choisies dans le paragraphe « Température, effets thermiques » du fichier des paramètres. En particulier on peut utiliser la relation  $\rho = f(\text{Concentr.}, \text{Température})$  de Schlumberger (Vandenbeusch, 1976 révisée) qui est valable jusqu'à une concentration en NaCl de plus de 250 kg/m<sup>3</sup> et une température jusqu'à 102 °C.

### 25.4.3 Dérivée : (Masse Volumique du fluide) / (Salinité)

Valeur par défaut : 0 => 0.70.

Ce paramètre est utilisé uniquement si on a choisi une dépendance linéaire. C'est le paramètre « **a** » de la loi linéaire.

Si on a choisi une relation Schlumberger (loi n°3), ce paramètre n'est pas utilisé.

Par défaut la dérivée **a** est fixée à 0.70. En effet, on admet généralement, pour l'océan Atlantique, une salinité de 35 kg de NaCl par m<sup>3</sup> de solution, qui engendre une eau salée de masse volumique de 1025 kg/m<sup>3</sup>. On obtient ainsi une dérivée :

$$a = (1025 - 1000) / 35 = 0.71$$

On peut cependant utiliser d'autres valeurs de **a** et choisir par exemple :

- « Salinité » de l'eau de mer = 25 kg/m<sup>3</sup>
- Dérivée **a** = 1

D'où une masse volumique :  $\rho = 1000 + 1 \cdot C \Rightarrow 1025 \text{ kg/m}^3$  pour l'eau de mer.

Si la salinité est exprimée en kg/m<sup>3</sup> d'ion Cl<sup>-</sup>, **a** sera de l'ordre de 1.15, ou bien de  $1.15 \cdot 10^{-3}$  si la salinité est exprimée en mg/l d'ion Cl<sup>-</sup>.

Si on considère un fluide **plus léger** que l'eau, par exemple un fluide chaud, on pourra avoir une dérivée **a** négative, par exemple **a** = -2.

D'où :  $\rho = 1000 - 2 \cdot C$

$\Rightarrow \rho = 800 \text{ kg/m}^3$  pour une salinité de 100 unités de salinité.

### 25.4.4 Variation moyenne de salinité entre 2 itérations pour accepter la convergence

Valeur par défaut : 0 =>  $10^{-8}$ .

Voir le chapitre décrivant le transport de masse classique.

C'est le critère de convergence pour les calculs de salinité (au sein d'une itération de couplage). Un ordre de grandeur pour ce paramètre est d'environ  $10^{-5}$  fois la salinité moyenne du champ étudié.

Remarque : Ce paramètre n'est pas utilisé si on choisit un calcul de transport avec la méthode Random Walk (*méthode déconseillée*).

#### 25.4.5 Régime de transport de la salinité : Transitoire ou Permanent

Voir le chapitre décrivant le transport de masse classique.

Valeur par défaut : 0 ou « rien » => Régime transitoire.

- « Transit » ou « 0 » = Transport de la salinité en régime Transitoire
- « Perman » ou « 1 » = Transport de la salinité en régime Permanent

#### 25.4.6 Calcul de la salinité (transport)

Valeur par défaut : 0 => Pas de calcul de la salinité.

C'est ce paramètre qui permet de demander un **calcul** de la salinité par résolution de l'équation de transport.

- 0 = Pas de calcul de la salinité. (Mais possibilité, si on l'a demandé : paramètre n°1, d'utiliser un champ de salinité initiale lue par MARTHE). L'intérêt de cette option est de permettre de faire un calcul rapide avec un champ de salinité estimée. Cette option permet aussi, de manière un peu détournée, de définir des conditions limites en pression dans un écoulement sans prise en compte de la salinité.
- 1 = Calcul de la salinité (en résolvant l'équation du transport par différences finies, par la méthode MOC, ou par RW). L'effet de la densité sera pris en compte dans le calcul hydrodynamique par une résolution en charge, en charge d'eau douce, ou en pression selon le choix du paramètre n°1 de ce paragraphe. Par défaut, si on a laissé ce paramètre n°1 égal à 0, la résolution se fera en Charge réelle (d'eau salée).


Comme indiqué plus haut : pour réaliser un calcul de la salinité il faut avoir fixé un « nombre maximal d'itérations de couplage », dans le paragraphe « Couplage et transport ».

Rappelons que pour faire un calcul de transport : il faut définir un champ de porosité (cinématique). Ce champ est utilisé explicitement si le transport se fait en régime transitoire, et dans tous les cas où on prend en compte des coefficients de dispersions.

## 25.5 Sauvegarde des résultats

### 25.5.1 Mailles à historiques

Il est possible de sélectionner certaines mailles du domaine modélisé pour lesquelles on souhaite sauvegarder l'évolution au cours du temps de la salinité (champ « SALINITE<sup>o</sup>»), ou de la salinité sortante (champ « SALINIT\_SORT<sup>o</sup>»).

Comme pour les historiques de charge hydraulique, de débit, de teneur en eau ou de concentration, cette sélection des mailles et des champs est réalisée par le module de « Gestion des données non maillées », accessible par le bouton  de la barre d'outils du bas du cadre de WinMarthe. On choisit alors la ligne « Mailles à Historiques ».

Les champs et les mailles choisies sont écrits automatiquement dans le fichier de « mailles à historiques », d'extension de fichier [.histo].

Les historiques calculés des mailles sélectionnées sont sauvegardés dans les fichiers « historiq.prn » et « historiq.out » habituels.

### 25.5.2 Champs calculés

À n'importe quel pas de temps, il est possible de sauvegarder le champ (« Grilles Marthe ») de salinité calculée.

En plus des champs classiques, les champs relatifs à la salinité et à la densité qui peuvent être sauvegardés sont les suivants :

- SALINITE = Champ de la salinité
- VAR\_SALINITE = Différence de salinité par rapport à la salinité initiale : (accessible en sélectionnant le champ « SALINITE »).
- MASSE\_VOLUMIQ = Champ de la masse volumique (en kg/m<sup>3</sup>) résultant de la salinité et de la température.
- PRESSION = Champ de la pression hydraulique (en unité de charge hydraulique).
- QMASS\_SALIN = Champ du débit massique de salinité échangé par les limites, exprimé en unité de masse par unité de temps.
- ECH\_SALI\_FACE = Débit massique de salinité échangé par chaque face des mailles.
- QSALIN\_RESID = Champ du débit massique de salinité résiduel, pour contrôle de la convergence.

Également, dans les modélisations avec réseau hydrographique (rivières) :

- SALIN\_RIVI Salinité dans les tronçons de rivière.
- Q\_SALIN\_RIVI Débit massique « salinité » à l'aval des tronçons de rivière.

Également, dans les modélisations avec réseau de drains-conduits :

- SALIN\_DRAIN Salinité dans les Drain-Conduits.
- Q\_SALIN\_DRAIN Débit massique « salinité » à l'aval des tronçons de Drain-Conduit.

La méthode de sélection est identique à celle utilisée pour les autres champs éditables (comme la concentration par exemple) :

- On sélectionne l'objet : SALINITE (par exemple)
- Puis l'action : ÉDITION

Les grilles MARTHE sélectionnées sont sauvegardées, en clair ou en binaire :

- Dans le fichier « chasim.out » pour les états (concentrations)
- Dans le fichier « debsim.out » pour les flux ou débits.

En outre, si le domaine est monodimensionnel, les valeurs apparaissent en format libre dans le fichier séquentiel « chasimsq.prn », importable directement dans Excel® (ou un tableur équivalent), et également dans le fichier « chasimsq.out ».

### 25.5.3 Champ du débit massique de salinité calculé

#### ***Champ du débit massique dans chaque maille.***

C'est le débit massique de salinité échangé avec l'extérieur du domaine : QMASS\_SALIN.

Le débit massique de salinité est exprimé en unité de masse par unité de temps. Il est sauvegardé dans le fichier « debsim.out ». Une valeur positive indique un débit massique entrant ; une valeur négative indique un débit massique sortant. Le débit massique de salinité apparaît uniquement pour les mailles suivantes :

- Mailles avec injection ou prélèvement de masse ;
- Mailles à concentration imposée ;
- Mailles limites du domaine à charge hydraulique imposée.

#### ***Débits massiques de salinité échangés par les faces de chaque maille***

Les débits massiques de salinité échangés par les 4 ou 6 faces de la maille, ainsi que les termes source, sont sauvegardés dans un fichier séquentiel de nom « flux\_mass.out ».

Le débit massique de salinité échangé est exprimé en unité de masse par unité de temps. Le terme source comprend les injections ou prélèvements massiques

La sauvegarde des débits échangés par face est possible uniquement avec les méthodes de transport faisant intervenir des différences finies (TVD, DF ou MOC). Avec la méthode MOC, le bilan correspond uniquement à la phase dispersion par différences finies.

## 25.6 Calibration automatique

Il est possible de faire une calibration automatique en utilisant des observations sous forme :

- De « Grilles Marthe » d'observations de salinité ;
- D'historiques d'observations de salinité ;
- D'historiques d'observations de salinité sortantes.

Tous les champs ou paramètres qui ont une influence sur ces champs peuvent être déterminés par calibration automatique : perméabilités, porosités, dispersivités, etc.



## 26 EXEMPLES D'APPLICATION ET DE VÉRIFICATION

Les chapitres suivants présentent des exemples d'application et de vérification des fonctionnalités :

- De [transport de masse classique](#).
- De transport de masse [avec double porosité](#).
- De [transfert thermique](#) et de prise en compte de la température.
- De [transport de salinité](#) avec effets densitaires.





## **27 Vérification du calcul de transport de masse classique et exemples d'application**

Ce chapitre présente des exemples d'application et de vérification des méthodes de transport de masse classique du code de calcul MARTHE. Les exemples traités sont les suivants :

- 1) [Pollution dans la nappe « Rocky Mountain »](#) : écoulement 2D à vitesse quelconque, avec dégradation ;
- 2) [Injection continue en coupe verticale](#) avec surface libre ;
- 3) [Injection en Zone Non Saturée](#) à partir d'un bassin ou d'un canal ;
- 4) [Solution analytique de Cleary](#) : écoulement 2D à vitesse uniforme avec concentration imposée ;
- 5) [Écoulement oblique à 45° en coupe](#) verticale 2D ;
- 6) [Réflexion sur une paroi étanche](#) ou une surface libre ;
- 7) [Injection continue dans un écoulement cylindrique](#) (radial). Comparaison à une solution analytique ;
- 8) [Infiltration de soluté dans une colonne verticale non saturée](#). Comparaison à une solution de référence ;
- 9) [Transfert thermique dans un écoulement 2D](#) cylindrique ;
- 10) [Transport dans un milieu très fortement hétérogène](#).



## 27.1 Exemple de transport n°1 : Pollution dans la nappe « Rocky Mountain »

### 27.1.1 But de l'exemple n°1

Cet exemple permet d'illustrer l'applicabilité du code dans un écoulement 2D à vitesses quelconques, avec un transport en régime permanent et une dégradation du polluant.

### 27.1.2 Description de l'exemple n°1

Cet exemple est l'exemple n°6.4 décrit par Voss (1984). Les unités utilisées sont des unités américaines (1 pied = 0.3048 m). Il s'agit d'une nappe alluviale monocouche rectangulaire de 16 000 pieds sur 20 000 pieds (4877 m x 6096 m), avec des limites étanches à l'est et à l'ouest, et des charges hydrauliques imposées (variables) sur les limites nord et sud :

- Limite nord : charge imposée à 250 pieds (sauf sur les premiers et derniers 2000 pieds d'abscisse).
- Limite sud : charge hydraulique variant linéairement de 17.5 pieds à gauche, à 57.5 pieds à droite.
- Un étang carré de 1000 pieds de côté (cf. Figure 60) alimente la nappe avec un débit de fuite  $Q_E$  à une concentration  $C_E$ . Trois captages situés au sud (losanges sur la figure) prélèvent de l'eau avec un débit  $Q_P$  chacun. Le substratum affleure en deux zones (deux rectangles sur la figure).
- La concentration extérieure (amont) ainsi que la concentration initiale est partout égale à  $C_0$ .

- Paramètres hydrodynamiques

Perméabilité :	$K = 2.5 \cdot 10^{-4}$ ft/s
Épaisseur :	$E = 40$ pieds
Débit :	$Q_E = +1$ ft <sup>3</sup> /s
	$Q_P = -0.2$ ft <sup>3</sup> /s

- Paramètres de transport

Concentration étang :	$C_E = 1000$ (unités de concentration)
Concentration extérieure :	$C_0 = 10$ (unités de concentration)
Porosité :	$\omega = 20$ %
Dispersion longitudinale :	$\alpha_L = 500$ pieds (152.4 m)
	$\alpha_T = 100$ pieds (30.48 m)
Temps de ½ dégradation :	$t_d = 20$ ans

- Maillage

On a choisi un maillage formé de mailles carrées de 500 pieds (152.4 m) de côté, soit un total de 33 x 41 mailles.

- Solution de référence

Les résultats peuvent être comparés avec ceux de Voss (1984), obtenus en régime permanent avec le code de calcul SUTRA, en éléments finis avec un maillage très comparable.

### **27.1.3 Simulation avec le code de calcul MARTHE**

#### ***a) Simulation en régime permanent par la méthode DF***

La Figure 60 montre que la simulation avec le code de calcul MARTHE (à droite) est quasi identique à la simulation de référence (sans les problèmes de concentration inférieure à  $C_0$  signalés par Voss, 1984). Ce résultat est obtenu en régime permanent en une fraction de seconde.

Pour comparer avec les méthodes de calcul par particules (MOC et RW), peu adaptées aux calculs de transport en régime permanent, on a vérifié par une simulation en régime transitoire, qu'après 44 ans on obtenait un champ de concentration quasiment stabilisé. On a donc simulé une période de 44 ans par 22 pas de temps de 2 ans. Pour les méthodes de transport à particules, en supposant que la concentration est exprimée en  $\text{kg/m}^3$ , on a choisi une masse égale à  $2.5 \cdot 10^5$  kg pour chaque particule. Après 44 ans, en régime quasi-permanent, il y a un peu plus de 60 000 particules dans la nappe.

#### ***b) Simulation en régime transitoire par la méthode TVD***

Pour respecter un nombre de Courant, au sens de la méthode TVD, qui ne dépasse pas 1, chaque pas de temps de modèle est automatiquement subdivisé en 16 sous-pas pour le transport. La simulation par la méthode TVD (méthode conseillée), Figure 61, partie gauche, présente un champ de concentration après 44 ans proche de celui obtenu par la méthode DF. Ceci est assez logique puisque le nombre de Péclet moyen est proche de 1.

#### ***c) Simulation en régime transitoire par la méthode MOC***

Avec le pas de temps de 2 ans, le nombre de Courant maximal, dans la maille d'injection, est égal à 7.8, et le nombre de Courant moyen est égal à 1.0. La Figure 61, partie droite, montre que la simulation par la méthode MOC (à gauche) est proche de la simulation obtenue par la méthode TVD (Il ne faut pas tenir compte des couleurs car les échelles de couleurs, déterminées automatiquement, sont différentes).

#### ***d) Simulation en régime transitoire par la méthode DF***

La simulation par la méthode DF, Figure 62, à droite, est proche des simulations par les méthodes TVD ou MOC (Il ne faut pas tenir compte des couleurs car les échelles de couleurs, déterminées automatiquement, sont différentes).

#### ***e) Simulation en régime transitoire par la méthode RW (pour mémoire)***

La simulation par la méthode « Random Walk » RW, non représentée, présente un champ de concentration mal simulé sur la limite aval, ce qui est classique en RW. En effet on y observe un appauvrissement en particules, car les particules qui sortent du domaine par dispersion, ne peuvent

pas y revenir. Ceci introduit un effet de « diode » qui diminue la concentration. Par ailleurs, la concentration dans la maille d'injection, qui devrait être égale à 1000, est égale à 5800 à cause d'une accumulation de particules dans la maille d'injection. En effet, les vitesses des quatre faces de cette maille sont divergentes et il y a un point à vitesse nulle (donc un point d'accumulation) au centre de cette maille.

### f) Caractéristiques des 5 simulations

Il apparaît que, pour un transport en régime permanent, le calcul par la méthode DF est ici extrêmement rapide. Les méthodes TVD et MOC donnent de bons résultats (similaires) en régime transitoire. Le calcul par la méthode Random Walk ne donne pas de bons résultats.

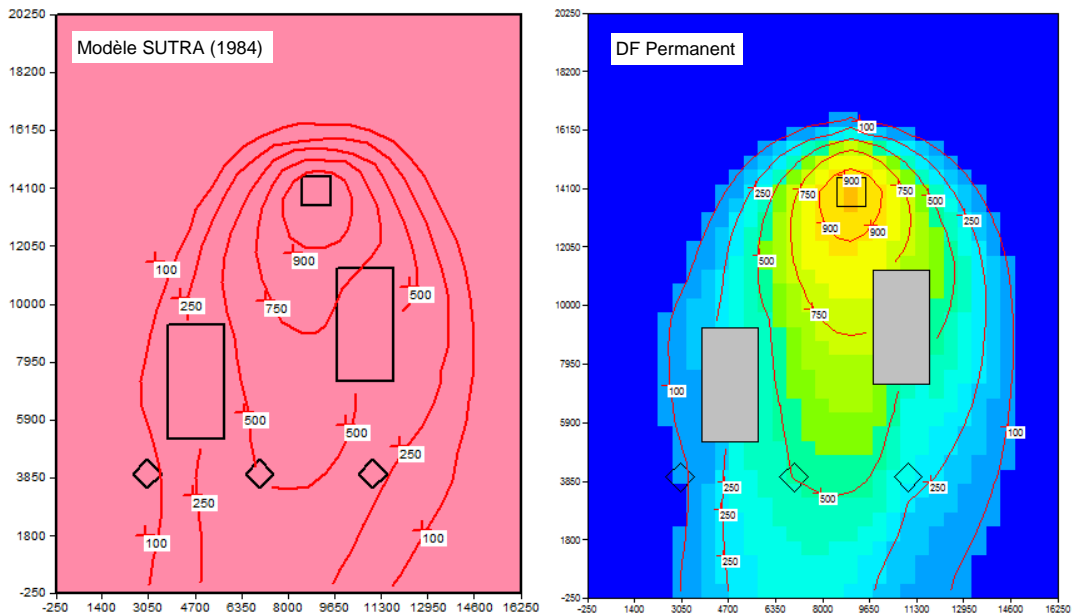


Figure 60 – Rocky Mountain : courbes d'iso-concentration calculées en régime permanent par la méthode DF. Comparaison avec la simulation par le code de calcul SUTRA en éléments finis.

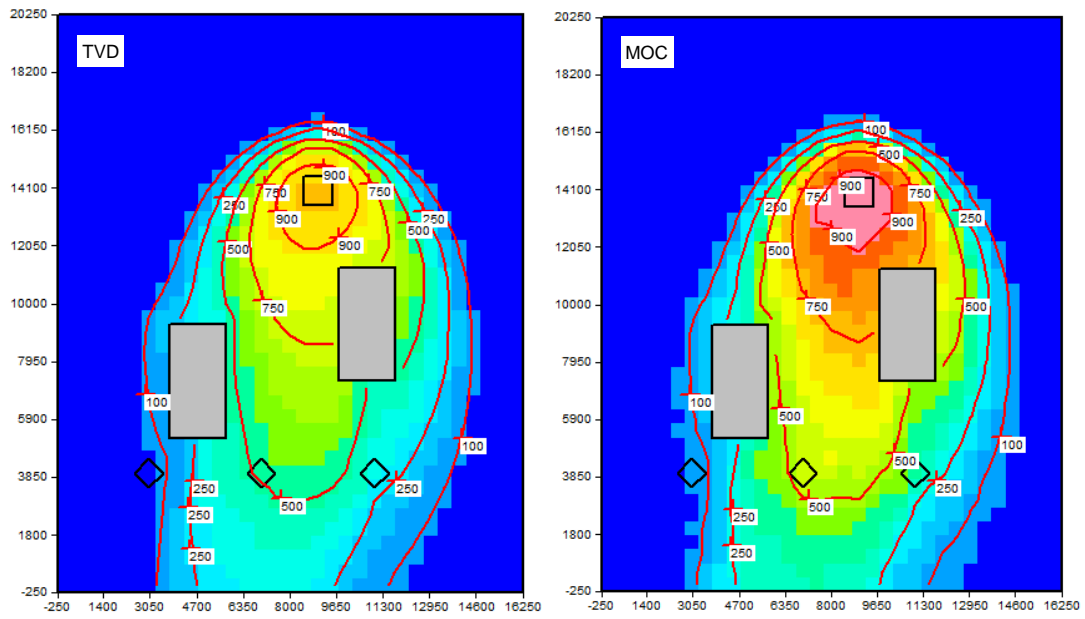


Figure 61 – Rocky Mountain : concentration après 44 ans. Méthode TVD et méthode MOC. (Les échelles de couleur sont différentes).

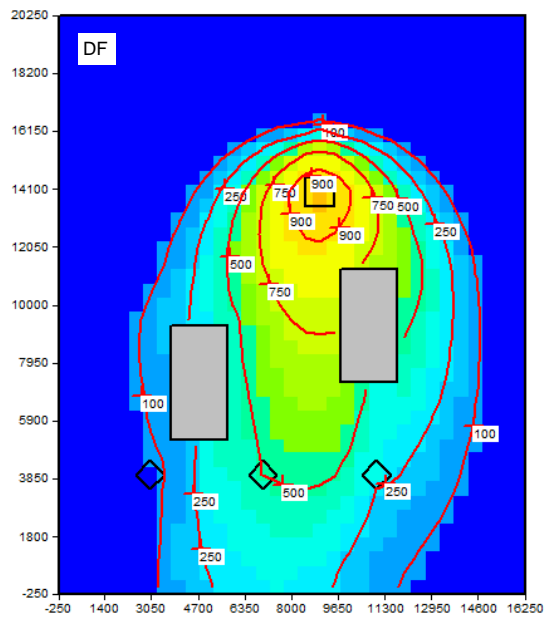


Figure 62 – Rocky Mountain : concentration après 44 ans. Méthode DF.

## 27.2 Exemple de transport n°2 : Injection continue en coupe verticale avec surface libre.

### 27.2.1 But de l'exemple n°2

Cet exemple permet d'illustrer les capacités du code à simuler une coupe verticale en présence d'une surface libre.

### 27.2.2 Description de l'exemple n°2

La Figure 63 montre que le domaine étudié s'étend sur 400 m de large et 200 m de haut. Les paramètres sont les suivants :

Perméabilité :	$K = 5 \cdot 10^{-5}$ m/s
Limite est :	Charge hydraulique imposée à 190 m
Limite ouest :	Étanche, avec un drain en bas à la charge = 0.

Le régime hydrodynamique est permanent. Dans la maille de coordonnées ( $x = 310$  m,  $z = 100$  m), on injecte en continu un débit massique QM et on veut calculer le panache de concentration après 10 jours.

Les paramètres de transport sont les suivants :

Porosité :	$\omega = 2$ %
Dispersivité :	$\alpha_L = 10$ m
	$\alpha_T = 2$ m
QM :	15000 kg/j

### 27.2.3 Simulation avec le code de calcul MARTHE

On utilise une discrétisation à mailles carrées de 10 m de côté et 160 pas de temps de 0.0625 jours (10 jours). Pour les méthodes MOC et RW, chaque particule porte une masse de 0.2 kg.

On choisit une schématisation classique en « pseudo-non-saturé »

La Figure 63 montre le champ de charge hydraulique calculé, ainsi que la surface libre et les lignes de courant.

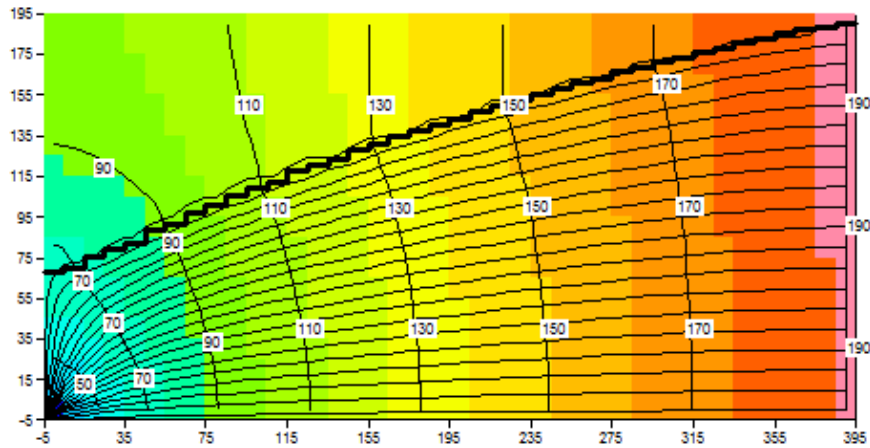


Figure 63 – Écoulement à surface libre  
Champ de charge hydraulique calculé, surface libre et lignes de courant.

### a) Simulation par la méthode DF

On a réalisé les calculs avec un transport en régime permanent, puis en régime transitoire. Les calculs s'effectuent en une fraction de seconde. Les résultats sont très semblables, ce qui montre que le régime permanent de transport est quasi établi après 10 jours.

La Figure 64 montre le champ de concentration calculé. On voit qu'il y a un peu de concentration dans la zone non saturée, ce qui est logique car la teneur en eau y est faible mais pas nulle.

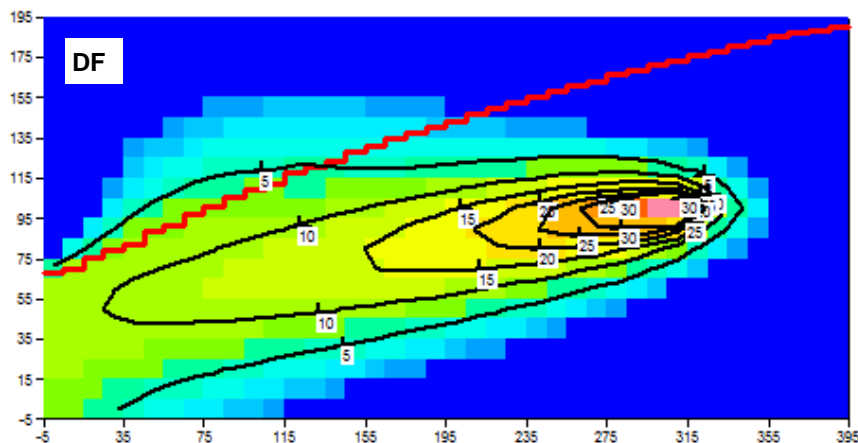


Figure 64 – Écoulement à surface libre. Transport par la méthode DF : Schéma pseudo-ZNS.

### b) Simulation par la méthode TVD

La simulation a été réalisée avec le schéma par défaut en pseudo-non saturé. La Figure 65 présente le panache de concentration calculé. On voit qu'il y a un peu de concentration dans la zone non saturée, ce qui est logique. Les résultats sont semblables à ceux obtenus par la méthode DF, mais moins dispersés sur la verticale.



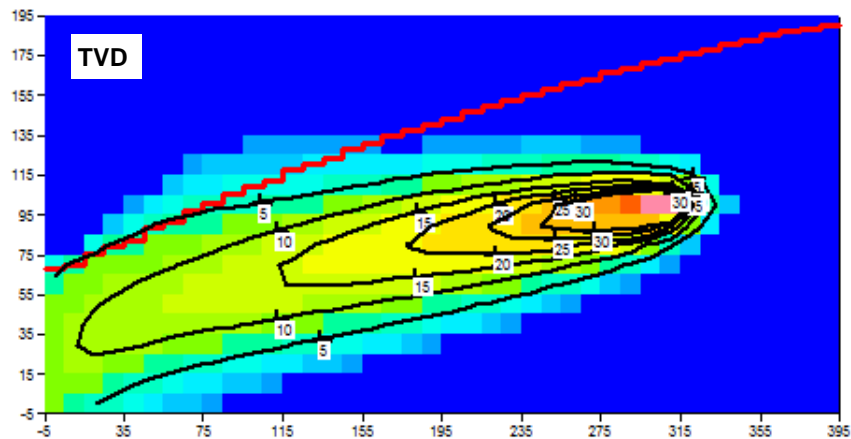


Figure 65 – Écoulement à surface libre. Transport par la méthode TVD : Schéma pseudo-ZNS.

### c) Simulation par la méthode MOC

La simulation a été réalisée en pseudo-non saturé. La Figure 66 présente le panache de concentration calculé. La concentration dans la zone pseudo non saturée est localement assez forte car, compte tenu de la très faible teneur en eau, il suffit d'une ou 2 particules dans une maille pour y avoir une forte concentration. Il n'y a pas d'accumulation près de la surface libre. Les résultats sont assez semblables à ceux obtenus par la méthode TVD.

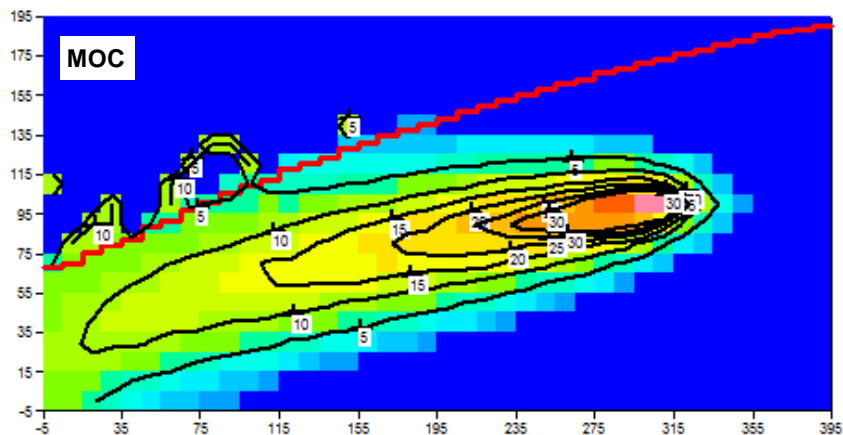


Figure 66 – Écoulement à surface libre. Transport par la méthode MOC : Schéma pseudo-ZNS.

### d) Simulation par la méthode Random Walk

Une première simulation avec le schéma classique « pseudo-non saturé » a donné de mauvais résultats, non représentés, avec une surconcentration près de la surface libre. En effet le schéma « pseudo-non saturé » génère des zones à faibles vitesses au-dessus de la surface libre. Les particules qui arrivent y restent en quelque sorte engluées.

Une 2<sup>ème</sup> simulation a été réalisée avec le schéma hydrodynamique « en nappe libre ». Les calculs hydrodynamiques sont plus lents et nettement moins stables avec ce « en nappe libre ».

Le panache de concentration (non représenté) est un peu plus conforme, mais fait apparaître de fortes fluctuations.



## 27.3 Exemple de transport n°3 : Injection en Zone Non Saturée à partir d'un bassin ou d'un canal.

### 27.3.1 But de l'exemple n°3

Cet exemple permet d'illustrer l'applicabilité du code à un transport dans un domaine mixte Zone Saturée - Zone Non Saturée.

### 27.3.2 Description de l'exemple n°3

Le schéma hydrodynamique est celui du test n°6 décrit par Cooley (1983). La modélisation se fait en coupe verticale. Un bassin allongé, ou un canal, dont le fond est situé 14 m au-dessus d'une nappe, a une hauteur mouillée de 2 m d'eau. La nappe a une charge hydraulique imposée (à la cote 2 m) de part et d'autre de l'axe du canal. Les champs de charge hydraulique et de pression sont calculés en régime hydrodynamique permanent. À la date zéro, la concentration dans le canal, qui était nulle, devient égale à 1000. On calcule la propagation de la concentration à travers la zone saturée et la zone non saturée.

#### Paramètres hydrodynamiques

Ce sont ceux du test n°1 de Cooley (1983) :

$$\theta_r = 5 \%$$

$$\theta_s = 25 \%$$

$$S_s = 10^{-4} \text{ m}^{-1}$$

- Loi de rétention homographe

$$\frac{h}{h_t} = \left( \frac{\theta_s - \theta}{\theta - \theta_r} \right)^{b_t}$$

$$h_t = 1.778 \text{ m} ; b_t = 0.25$$

- Loi de perméabilité puissance

$$\frac{K}{K_s} = \left( \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{b_k}$$

$$K_s = 10^{-2} \text{ m/h} ; b_k = 4$$

- Paramètres de transport

$$\text{RhoKD} = 0$$

$$\text{Dispersivité : } \begin{array}{l} \alpha_L = 1.5 \text{ m} \\ \alpha_T = 0.2 \text{ m} \end{array}$$

### 27.3.3 Simulation avec le code de calcul MARTHE

#### a) Maillage

Le maillage, qui ne couvre que la moitié gauche du domaine à cause de la symétrie, fait intervenir  $34 \times 34$  mailles carrées de 0.5 m de côté. Le transport est calculé par pas de temps de 5 heures jusqu'à la date 302 heures (soit 61 pas).

#### b) Calcul du champ de charge hydraulique

Le calcul de l'hydrodynamique est fait en régime permanent (150 itérations avec un coefficient de sous-relaxation de 0.1). Ce calcul est réalisé en une fraction de seconde.

#### c) Transport de masse

On a choisi une résolution par la méthode TVD. On a les valeurs suivantes :

Nombre de Péclet moyen = 0.37  
Nombre de Courant maxi = 0.40

La Figure 67 présente la teneur en eau calculée (en régime permanent). La Figure 68 présente la concentration calculée après 90 heures. On voit nettement que le soluté passe dans la zone saturée (sous le canal), mais également dans la zone non saturée (à l'extérieur de la limite de saturation).

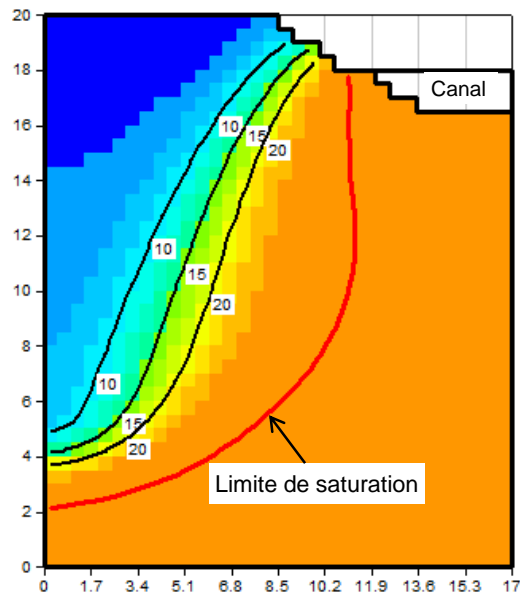


Figure 67 – Infiltration en Zone Non Saturée à partir d'un canal.  
Teneur en eau calculée en régime permanent.

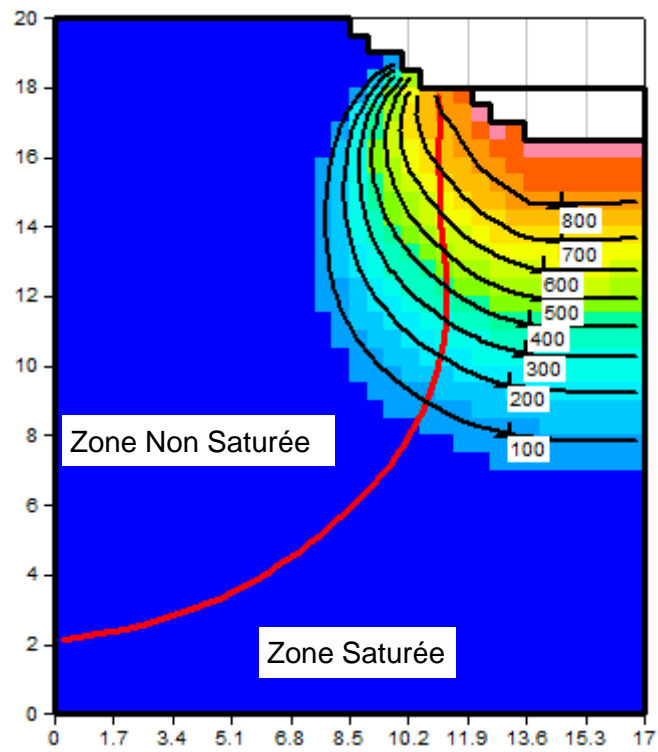


Figure 68 – Infiltration en Zone Non Saturée à partir d'un canal. Concentration calculée après 90 heures.

## 27.4 Exemple de transport n°4 : Solution analytique de Cleary (1978)

### 27.4.1 But de l'exemple n°4

Cet exemple permet de vérifier le code de calcul MARTHE en 2D avec une vitesse uniforme et une concentration imposée, non uniforme, sur une limite du domaine. Une solution analytique a été développée par Cleary (1978). Un code, permettant de calculer cette solution, nous a été transmis par J. Molson et E. Frind du Waterloo Center for Groundwater Research de l'université de Waterloo, Ontario (Canada).

### 27.4.2 Description de l'exemple n°4

C'est un milieu semi-infini avec une concentration imposée sur la limite verticale gauche. Les valeurs de concentrations imposées choisies sont :

- y = 0 à 4 m : Concentration = 1000.
- y = 4 à 8 m : Concentration = 1000 à 0 (linéairement).

Et la même chose symétriquement de y = 0 à -8 m.

La vitesse est égale à 0.1 m/s dans la direction  $O_x$  (et à 0 sur  $O_y$ ). On calcule le champ de concentration jusqu'à la date 640 s. Les dispersivités longitudinales et transversales sont toutes deux égales à 1 mètre.

### 27.4.3 Simulation avec le code de calcul MARTHE

On a choisi de modéliser uniquement la moitié supérieure du domaine sur 100 m de long et 40 m de haut. Le maillage est formé de mailles carrées de 2 m de côté, avec un raffinement sur la verticale près de la limite à concentration imposée (mailles de 1 m de hauteur). Le pas de temps choisi est de 10 secondes.

#### **a) Simulation par la méthode TVD**

La Figure 69 et la Figure 70 montrent que la simulation est excellente (courbes confondues).

#### **b) Simulation par la méthode MOC**

On a choisi une masse égale à 0.5 kg pour chaque particule, de façon à avoir 77 600 particules à la date 640 s. Les Figure 69 et Figure 70 montrent que la simulation est excellente.

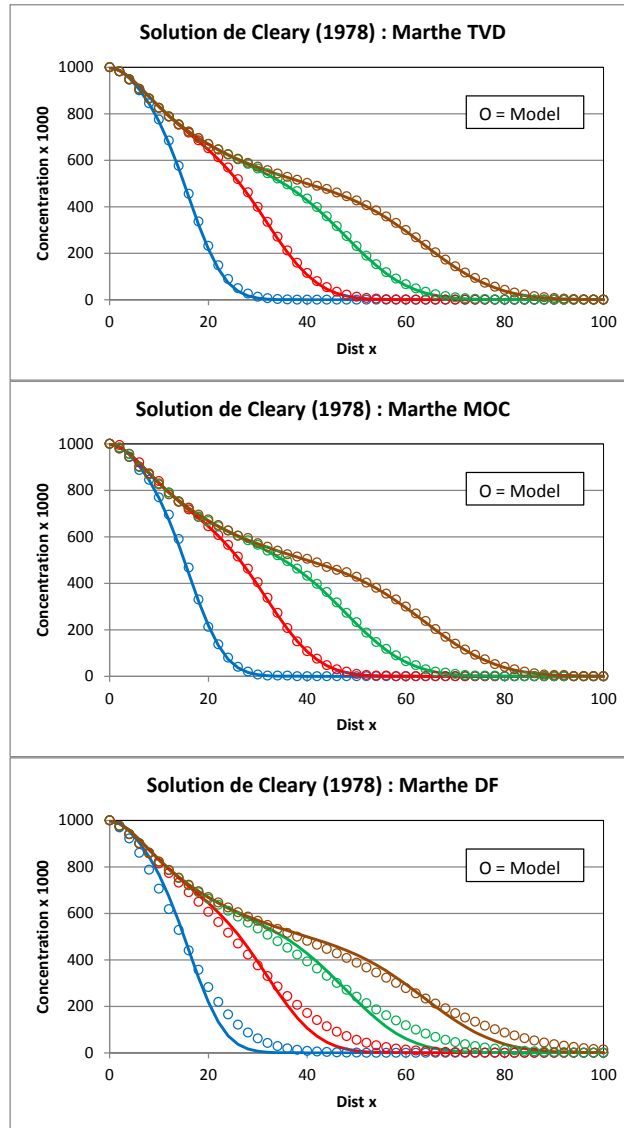


Figure 69 – Solution analytique de Cleary. Concentration le long de l'axe des x à 4 dates. Calcul par les méthodes TVD, MOC et DF.

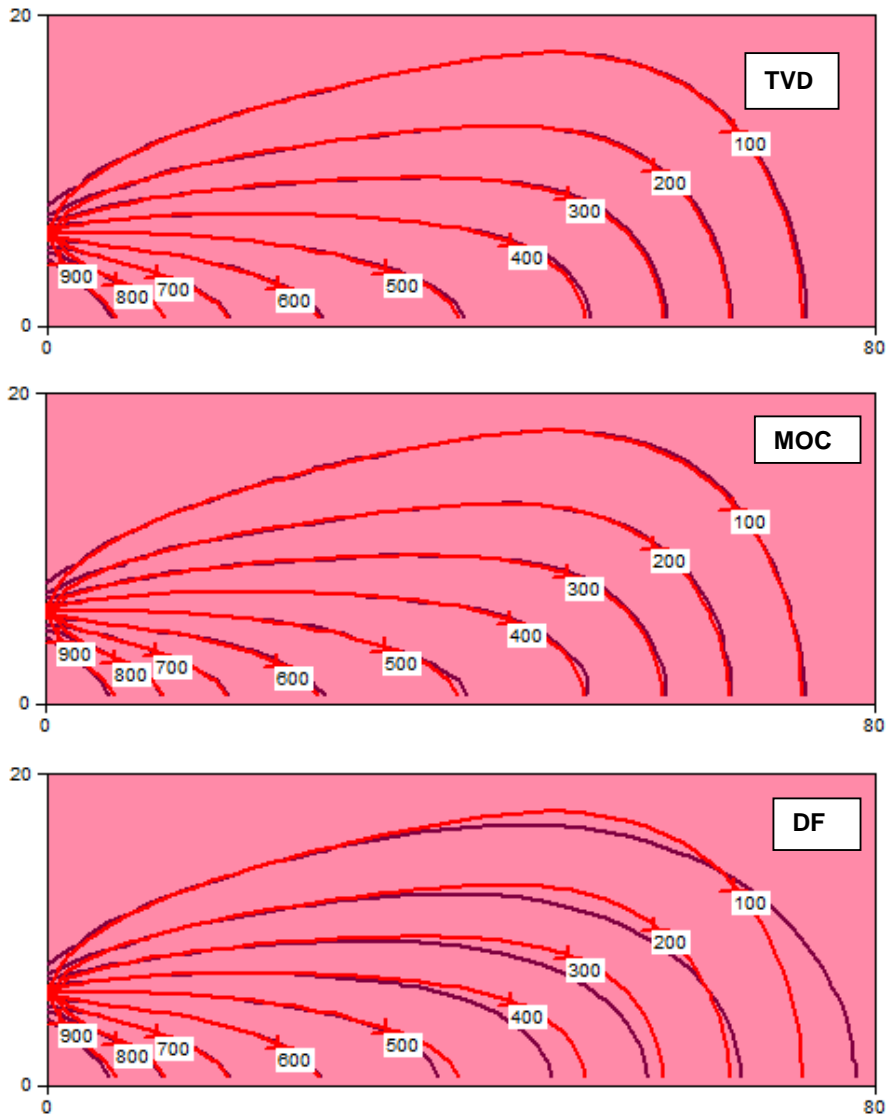


Figure 70 – Solution analytique de Cleary.  
 Champ de concentration à la date 640 s : méthodes TVD, MOC et DF.

**c) Simulation par la méthode DF**

Les Figure 69 et Figure 70 montrent que la simulation est de qualité moyenne et présente un peu de dispersion numérique, ce qui est logique car la dimension des mailles est 2 fois plus grande que la dispersivité.

**d) Simulation par la méthode RW**

La simulation est réalisée avec la même masse portée par chaque particule. La simulation (non représentée) est mauvaise car la condition à concentration imposée est difficile à respecter, et on observe un appauvrissement en particules à cet endroit.

Les méthodes de transport les plus précises pour cette application sont les méthodes TVD et MOC.



## 27.5 Exemple de transport n°5 : Écoulement oblique à 45° en coupe verticale 2D.

### 27.5.1 But de l'exemple n°5

Cet exemple permet de vérifier la discrétisation de MARTHE avec des vitesses obliques par rapport au maillage. Le tenseur de dispersion non symétrique fait intervenir 8 mailles voisines en 2D (il ferait intervenir 18 mailles voisines en 3D).

### 27.5.2 Description de l'exemple n°5

On injecte brutalement une masse (ou une concentration) dans un écoulement uniforme. On obtient une tache de concentration elliptique qui se déplace en s'agrandissant. Il existe une solution analytique classique pour ce problème. Pour vérifier la discrétisation de MARTHE dans des conditions difficiles on a choisi une vitesse à 45° par rapport au maillage (on a fait également subir une rotation 45° à la solution analytique).

On a simulé un écoulement avec les paramètres suivants :

Perméabilité	= $10^{-3}$ m/s
Gradient de charge hydraulique	= 1/100 ( $7.071 \cdot 10^{-3}$ sur Ox et sur Oz)
Porosité	= 10 % (c'est-à-dire une vitesse réelle de $10^{-4}$ m/s)
Épaisseur de la coupe	= 1 m

Paramètres de transport :

RhoKD = 0.  
 Dispersivité :  $\alpha_L = 10$  m et  $\alpha_T = 2$  m.

Injection :

Concentration initiale =  $1000 \text{ kg/m}^3$  dans un carré de  $10 \text{ m} \times 10 \text{ m}$  centré sur le point ( $x = 110$ ,  $z = -108$ ), c'est-à-dire une masse de  $10\,000 \text{ kg}$  injectée instantanément.

### 27.5.3 Simulation avec le code de calcul MARTHE

On a choisi un maillage régulier avec des mailles carrées de  $2 \text{ m}$  de côté, et  $20$  pas de temps de  $0.125$  jours, soit une durée totale de  $2.5$  jours.

Pour les méthodes MOC et RW, chaque particule porte une masse de  $0.1 \text{ kg}$ , d'où un nombre total de particules égal à  $100\,000$ .

#### a) Simulation par la méthode TVD

La Figure 72a montre que la simulation MARTHE est très précise : les isovaleurs simulées et les isovaleurs de la solution analytique sont quasiment superposées.

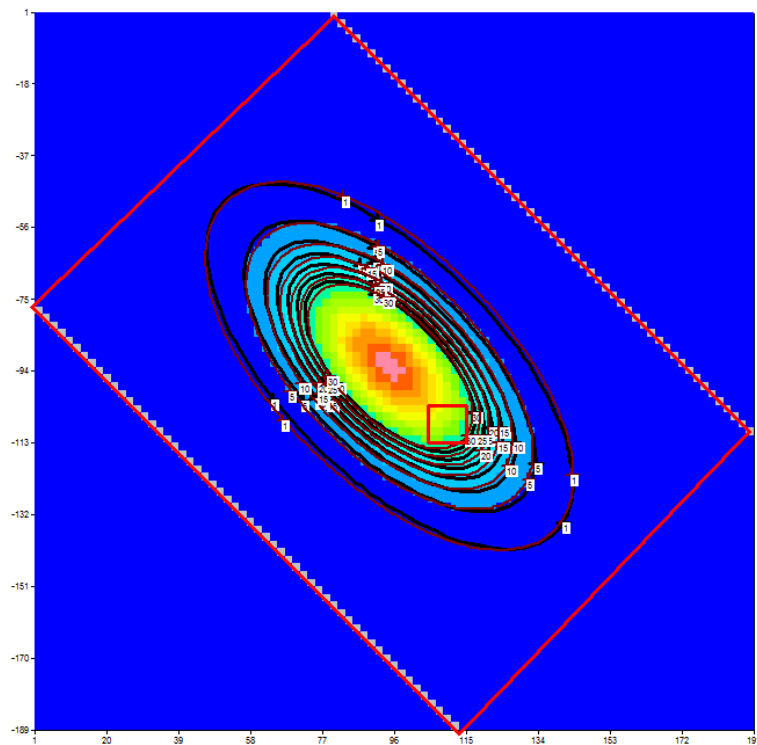


Figure 71 – Écoulement oblique à 45 degrés en coupe verticale : Transport par la méthode TVD. MARTHE = Isovaleurs en brun ; Solution analytique = isovaleurs en noir.

### **b) Simulation par la méthode DF**

La Figure 72a montre que les résultats obtenus sont assez bons, sauf pour la queue de distribution (isovaleur  $1 \text{ kg/m}^3$ ). On note une légère dispersion numérique, en particulier parce que les mailles ont la dimension de la dispersivité transversale (Un calcul avec un pas de temps deux fois plus petit a donné des résultats quasi identiques).

### **c) Simulation par la méthode MOC**

La Figure 72b montre que la simulation est très précise, ce qui permet de valider les calculs de dispersion en différences finies utilisés dans la méthode MOC.

### **d) Simulation par la méthode RW**

La Figure 72c montre une simulation très précise, qui présente cependant des oscillations significatives. En effet, compte tenu de la taille des mailles, on a 40 particules par maille pour une concentration de  $10 \text{ kg/m}^3$ , et 4 particules seulement pour une concentration de  $1 \text{ kg/m}^3$ .

On a donc refait une deuxième simulation avec des mailles de 10 m de côté, au lieu de 2 m de côté. La Figure 72d montre que les résultats sont corrects et présentent beaucoup moins d'oscillations, car il y a 25 fois plus de particules par maille.

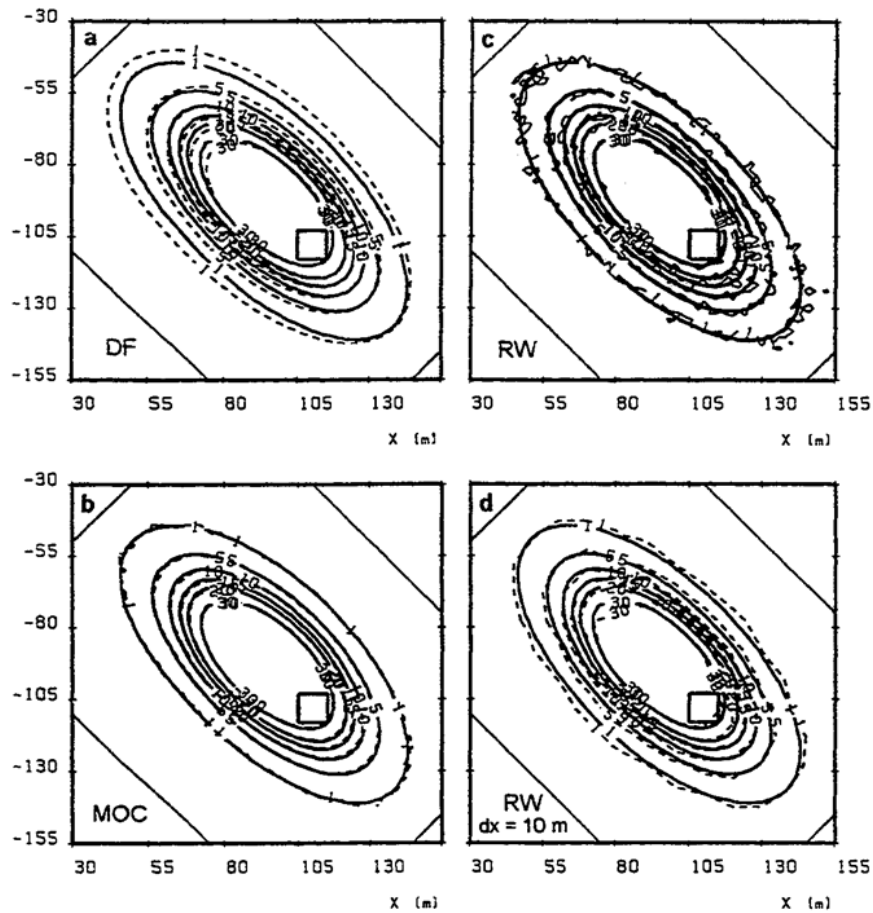


Figure 72 a, b, c, d - Écoulement oblique à 45 degrés en coupe verticale :  
Transport par les méthodes DF, MOC et RW. La solution analytique est en trait continu.

#### d) Caractéristiques des simulations

Il apparaît ici que, dans cet exemple sans conditions aux limites, avec des propriétés homogènes, les méthodes TVD, MOC, mais aussi la méthode RW, donnent des simulations précises. En particulier, la méthode RW est assez rapide puisqu'il est possible de n'utiliser qu'un seul pas de temps (Nombre de Courant 1.5 ou même 7.6).

## **27.6 Exemple de transport n°6 : Réflexion sur une paroi étanche ou sur une surface libre horizontale.**

### **27.6.1 But de l'exemple n°6**

Cet exemple permet de vérifier le schéma de calcul de MARTHE avec des « réflexions » sur des parois étanches ou des surfaces libres horizontales.

### **27.6.2 Description de l'exemple n°6**

Dans un écoulement uniforme, on injecte brutalement une masse (ou une concentration) à proximité d'une limite étanche ou d'une surface libre horizontale. On utilise la même solution analytique que précédemment en utilisant la méthode des images pour tenir compte de la limite étanche.

Les paramètres hydrodynamiques sont identiques à ceux de l'exemple précédent : vitesse réelle uniforme de  $10^{-4}$  m/s, dispersivités = 10 m et 2 m.

Une limite étanche est introduite à l'ordonnée  $y = 115$  m.

Injection : concentration initiale =  $1000 \text{ kg/m}^3$  dans un carré de  $10 \text{ m} \times 10 \text{ m}$  centré sur le point ( $x = 310 \text{ m}$ ,  $y = 100 \text{ m}$ ).

### **27.6.3 Simulation avec le code de calcul MARTHE**

#### ***a) Maillage***

On a choisi un maillage régulier avec des mailles carrées de 10 m de côté.

#### ***b) Simulation par les méthodes TVD et MOC***

La Figure 73 montre que les simulations sont précises et se comparent bien avec la solution analytique.

#### ***c) Simulation par la méthode RW***

La simulation par la méthode RW est réalisée avec un seul pas de temps de 5 jours. Chaque particule porte une masse de 0.2 kg, d'où un nombre total de particules égal à 50 000. Dans ce contexte particulier, sans injection de masse ni de concentration imposée, la méthode RW donne une simulation très précise (Figure 73).

#### ***b) Résultat des simulations***

La Figure 73 permet de vérifier que les simulations avec les méthodes TVD, MOC et RW du code de calcul MARTHE sont très proches de la solution analytique.

La méthode RW, avec le schéma de Pollock (1988) fonctionne correctement, avec un nombre de Courant égal à 4.32, malgré la présence d'une limite étanche ; le nuage de particules est régulier.

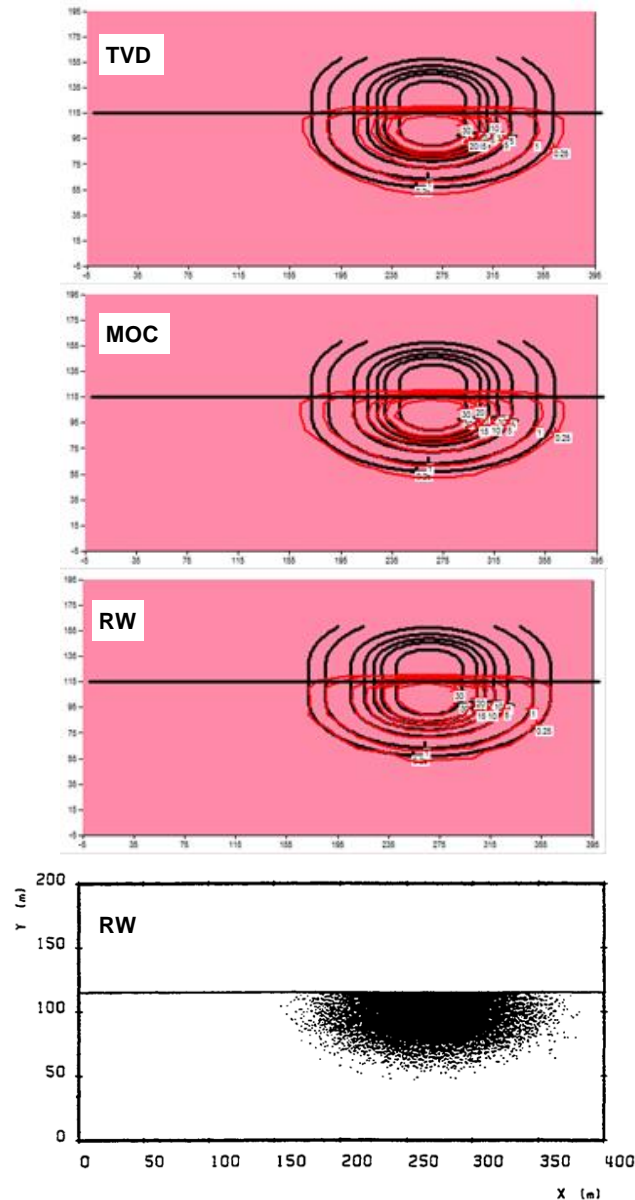


Figure 73 – Injection instantanée à proximité d'une limite étanche.  
Simulation par les méthodes TVD, MOC et RW.  
Simulation MARTHE en traits rouges, solution analytique en traits noirs.

#### 27.6.4 Transport de masse dans un écoulement autour d'une zone carrée imperméable.

Une autre simulation a été réalisée, sans limite imperméable mais avec un bloc carré étanche situé au milieu de l'écoulement. Les paramètres hydrodynamiques sont les mêmes, mais avec :

- Injection : concentration initiale  $1000 \text{ kg/m}^3$  dans la maille de  $10 \text{ m} \times 10 \text{ m}$  centrée sur le point ( $x = 270 \text{ m}$ ,  $y = 100 \text{ m}$ ).
- Carré étanche :  $x = 175 \text{ m}$  à  $225 \text{ m}$  ;  $y = 75 \text{ m}$  à  $125 \text{ m}$ .
- Masse portée par chaque particule =  $0.5 \text{ kg}$  (soit 20000 particules).

### **a) Simulation par la méthode TVD**

Pas de temps : 1 seul pas de temps de 10 jours.

La Figure 74 montre, en haut, le champ de charge hydraulique calculé avec les lignes de courant. En bas : le champ de concentration. Il apparaît que l'écoulement est très régulier et tout à fait symétrique.

Les lignes de courant sont parfaitement symétriques : par rapport à l'axe vertical :  $x = 200$  m, et par rapport à l'axe horizontal médian. Le schéma de vitesses Pollock (1988) est donc parfaitement appliqué.

### **b) Simulation par la méthode MOC**

Pas de temps : 1 pas de temps de 10 jours découpé en 10 sous-pas de 1 jour pour respecter un nombre de Courant moyen pas trop grand.

La Figure 75 montre que le champ de concentration est symétrique et tout à fait comparable à celui obtenu avec la méthode TVD.

### **c) Simulation par la méthode RW**

Pas de temps : 1 seul pas de temps de 10 jours, car avec cette méthode la durée des pas de temps n'est pas critique.

La Figure 75 montre que le champ de concentration est peu différent de celui obtenu avec les autres méthodes, mais, compte tenu des aléas, il n'est pas symétrique. On vérifie qu'il n'y a pas d'accumulation de particules, même à l'aval du bloc étanche où il y a un point d'arrêt (à vitesse nulle).

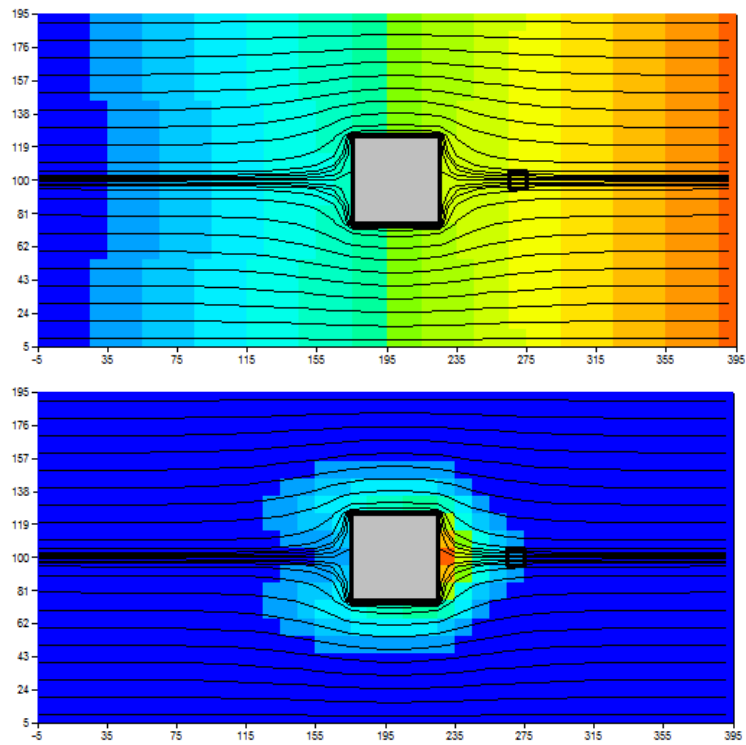


Figure 74 – Injection instantanée. Écoulement autour d'un carré étanche. Méthode TVD.  
En haut : le champ de la charge hydraulique, en bas : le champ de la concentration.

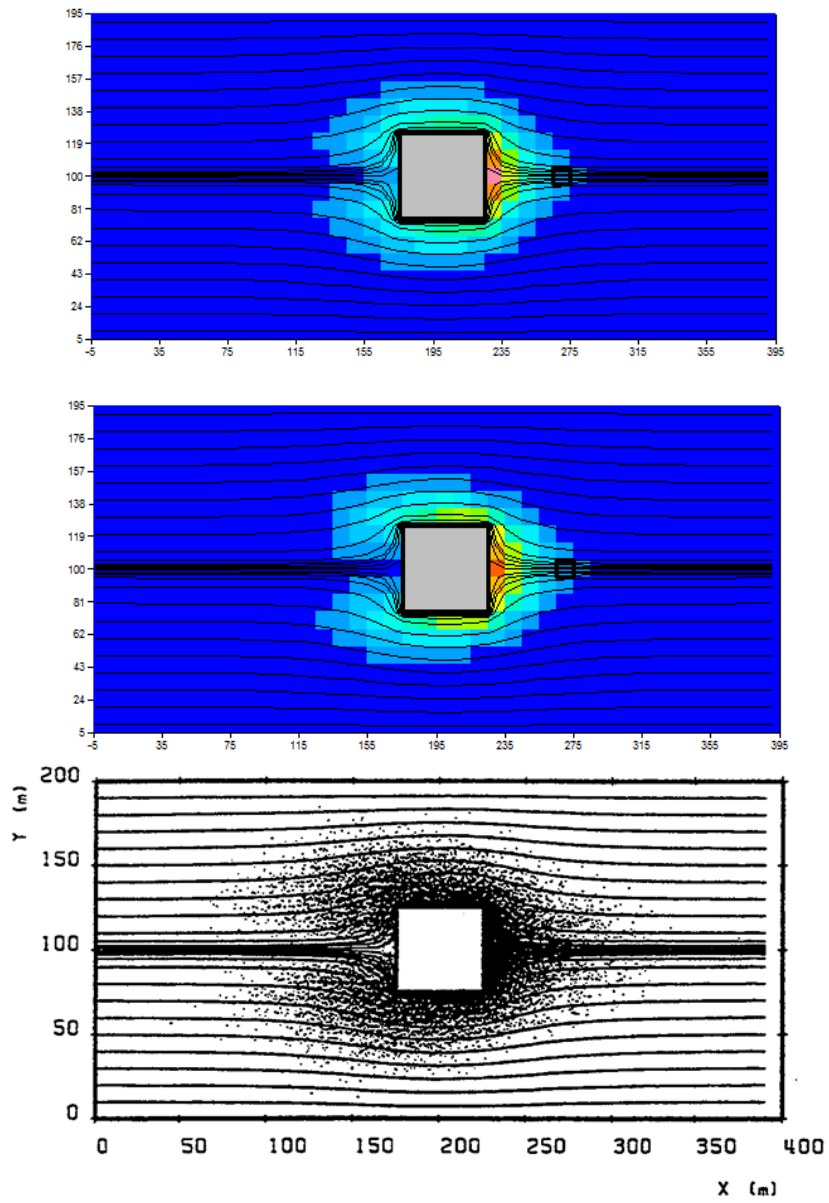


Figure 75 – Injection instantanée. Écoulement autour d'un carré étanche.  
En haut : Méthode MOC, au milieu méthode RW.  
En bas : Position des particules RW en fin de calcul.



## 27.7 Exemple de transport n°7 : Injection continue dans un écoulement cylindrique 1D (radial).

### 27.7.1 But de l'exemple n°7

Cet exemple permet de vérifier le code de calcul MARTHE en écoulement cylindrique, pour différentes méthodes de transport, par comparaison à une solution analytique approchée.

### 27.7.2 Description de l'exemple n°7

Cet exemple est l'exemple n°6.2 décrit par Voss (1984).

Dans un milieu homogène à concentration  $C_0$ , on injecte un débit  $Q_I$  à la concentration  $C_0$ . À la date zéro, quand le régime hydrodynamique radial est établi, la concentration du débit  $Q_I$  passe de  $C_0$  à  $C_1$ .

#### a) Solution analytique approchée

Gelhar et Collins (1971) donnent une solution approchée pour la concentration  $C$  à la distance  $r$  et à la date  $t$  :

$$C_a = 0.5 \operatorname{erfc} [(r^2 - r_a^2) / \text{Dénom}]$$

Avec :

$$C_a = (C - C_0) / (C_1 - C_0)$$

$$A = \frac{Q_I}{2\pi\omega b}$$

$b$  = Épaisseur de la nappe

$$r_a = \sqrt{2 \cdot A \cdot t}$$

$$\text{Dénom} = 2 \sqrt{\frac{4}{3} \alpha_L \cdot r_a^3 + \frac{D_m}{A} \cdot r_a^4}$$

#### b) Paramètres hydrodynamiques

Perméabilité :  $K = 10^{-3}$  m/s  
 Débit injecté :  $Q_I = 62.5 \cdot 10^{-3}$  m<sup>3</sup>/s  
 Épaisseur :  $b = 1$  m

#### c) Paramètres de transport

$$C_0 = 0$$

$C_i = 100$   
Porosité :  $\omega = 20 \%$   
Dispersivité :  $\alpha_L = 10 \text{ m}$   
Diffusion moléculaire :  $D_m = 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$

### 27.7.3 Simulation avec le code de calcul MARTHE

#### a) Maillage et découpage du temps

On a choisi un maillage radial avec des mailles de dimensions croissantes de  $dr = 2.5 \text{ m}$  à  $dr = 24.2 \text{ m}$ , avec un facteur 1.06, puis de dimension 24.2 m uniforme jusqu'à la distance maximale de 1000 m.

La période totale modélisée est de 83.771 jours. Le pas de temps choisi est de 1/80 de cette durée, soit 1.0471 jour.

Dans les méthodes de transport à particules (MOC et RW), la masse portée par chaque particule est égale à 1000 kg. Un débit de  $62.5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$  à une concentration de  $100 \text{ kg}/\text{m}^3$  pendant 83.771 jours injecte une masse totale de  $4.524 \cdot 10^7 \text{ kg}$ , soit 45 200 particules.

#### b) Résultat des simulations

La Figure 76 présente la comparaison de la solution analytique (approchée) en trait continu, avec les simulations MARTHE conduites avec les méthodes TVD, MOC, DF. La figure présente les profils de concentration tous les 20 pas de temps, c'est-à-dire tous les 20.943 jours.

La simulation TVD est la meilleure, la simulation MOC est également très précise. Ces deux simulations sont meilleures que la simulation par la méthode DF. Cependant, compte tenu des petites mailles au centre du domaine, le temps de calcul de la simulation TVD est environ 50 fois plus long que celui de la méthode DF. Compte tenu du nombre de particules choisies, le temps d'exécution de la simulation MOC est environ 20 fois plus long. La simulation RW (non représentée) est très mauvaise, certainement à cause du contraste de largeur des mailles qui est équivalent à un contraste de porosité (donc de dispersion).

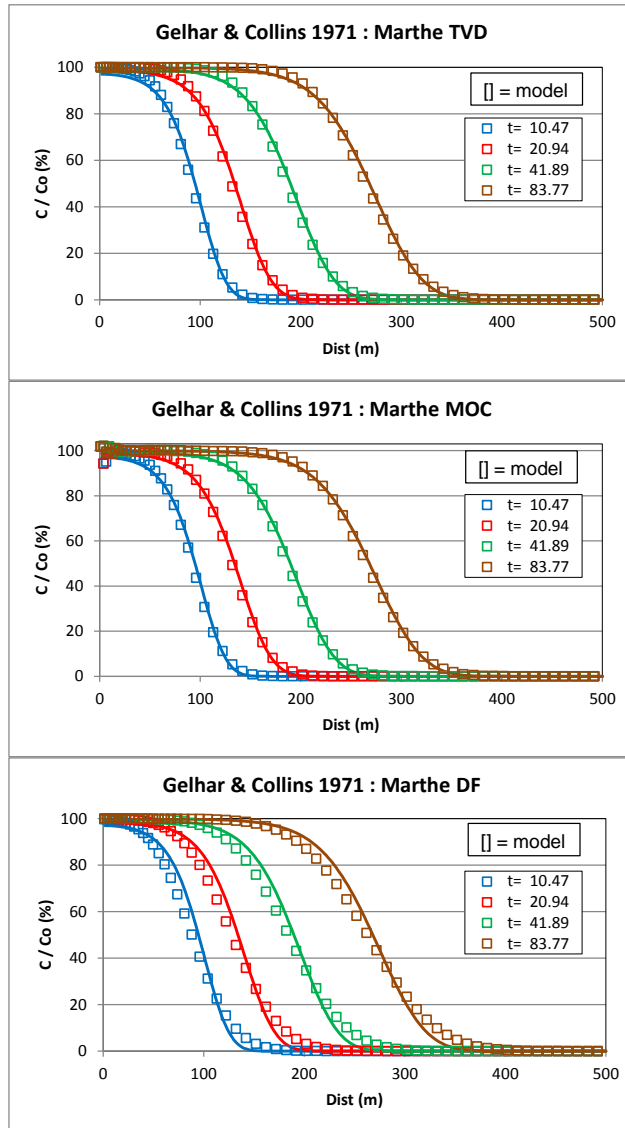


Figure 76 – Injection continue dans un écoulement cylindrique.  
 Profils de concentration à quatre dates (20.9, 41.9, 62.8, 83.8 jours).  
 Solution analytique de Gelhar et Collins en trait continu. Simulations MARTHE = Symboles.  
 Méthodes TVD, MOC et DF.

## 27.8 Exemple de transport n°8 : Infiltration de soluté dans une colonne verticale non saturée.

### 27.8.1 But de l'exemple n°8

Cet exemple permet de vérifier le transport en Zone Non Saturée, en régime hydrodynamique transitoire, par comparaison avec des simulations de référence publiées dans la littérature scientifique.

### 27.8.2 Description de l'ensemble n°8

On injecte de l'eau contenant du chlore dans une colonne verticale semi-infinie dont l'état initial hydraulique est défini par un profil de saturation. Cet exemple, qui sert de référence depuis 1973, est décrit par Van Genuchten (1982), par Voss (1984) et par Warrick *et al.* (1971).

#### a) Lois caractéristiques du sol

Elles sont données par Van Genuchten (1982). À partir des valeurs de Van Genuchten (1982), on a ajusté par calibration automatique les lois caractéristiques suivantes avec un coefficient de corrélation de 0.999 :

- Une loi de rétention homographique :

$$\theta_r = 10 \%$$

$$\theta_s = 40 \%$$

$$\frac{h}{h_t} = \left( \frac{\theta_s - \theta}{\theta - \theta_r} \right)^{b_t}$$

$$h_t = 95.21 \text{ cm}$$

$$b_t = 0.699$$

- Une loi de perméabilité homographique :

$$K_S = 5.531 \cdot 10^{-6} \text{ m/s}$$

$$h_k = 23.3 \text{ cm}$$

$$b_k = 3.473$$

$$K/K_S = 1/[1 + (h/h_k)^{3.473}]$$

#### b) Paramètres de transport

La dispersivité est égale à 1.0 cm et il n'y a pas de coefficient de retard.

### **c) Conditions initiales et aux limites**

Le profil initial de teneur en eau varie linéairement de 15 % à 20 %, de la profondeur 0 à la profondeur 60 cm, et est égal à 20 % en dessous de 60 cm de profondeur. La concentration initiale est égale à zéro.

#### **Limite supérieure**

En début de simulation, on impose une condition hydraulique de « saturation » ( $\theta = 38\%$ ). La concentration est imposée à la valeur 209 (meq/litre) pendant 168 mn (2 h 48 mn) ; elle est ensuite imposée à 0.0 (meq/litre).

#### **Limite inférieure**

Cette limite ne sera pas atteinte lors de la simulation. On y impose donc la teneur en eau initiale de 20 % et une concentration extérieure égale à 0.

### **d) Solution de référence**

Il n'y a pas de solution analytique, mais une « solution numérique » a été définie (voir Van Genuchten, 1982) par utilisation de plusieurs codes de calcul avec des pas d'espace et de temps très fins. La Figure 77 présente les profils de référence de teneur en eau et de concentration : 2 heures et 9 heures après le début de l'infiltration. On remarque que, même en l'absence de coefficient de retard, le front de concentration se déplace plus lentement que le front d'humidité (après 2 h, ils atteignent respectivement les profondeurs 40 cm et 90 cm). Ceci est dû à l'eau contenue dans le profil initial d'humidité.

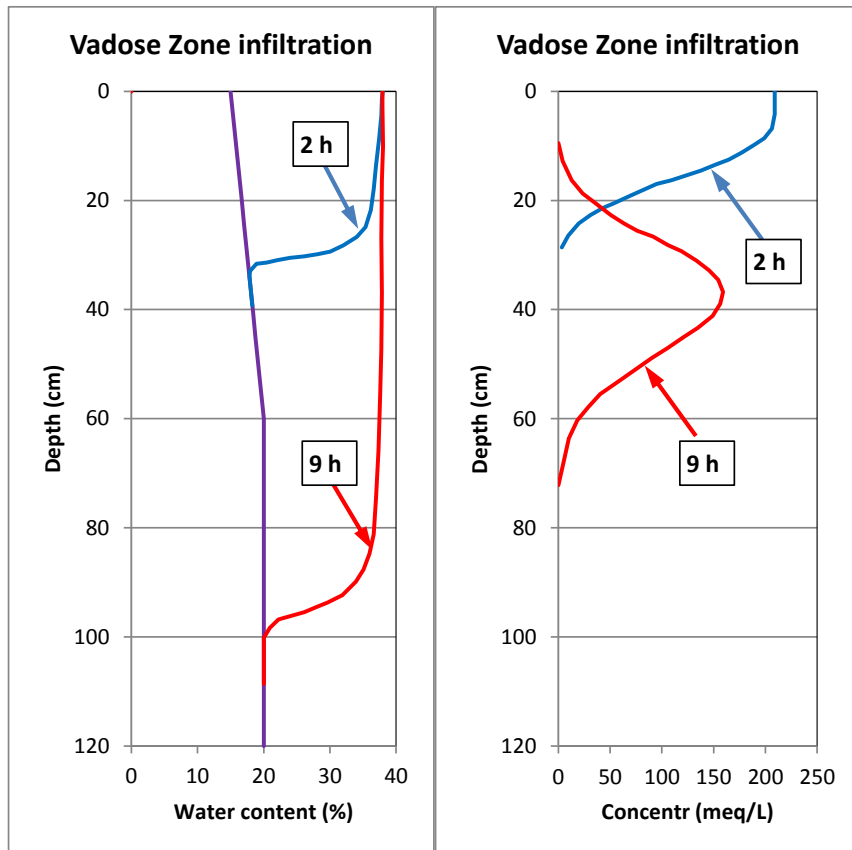


Figure 77 – Infiltration dans une colonne verticale Non Saturée en régime transitoire. Profils de référence de teneur en eau et de concentration.

### 27.8.3 Simulation par le code de calcul MARTHE

Le but est de calculer le profil de concentration 2 heures et 9 heures après le début de l’infiltration.

On a choisi des pas de temps de calcul compris entre 2 s et 500 s. Ils sont déterminés automatiquement par MARTHE pour assurer une bonne convergence hydrodynamique. On a choisi un maillage mono dimensionnel vertical de 61 mailles de 2 cm de haut (sur 100 cm de large), soit une hauteur totale modélisée de 122 cm.

On a simulé le transport de masse en ZNS successivement avec les méthodes TVD, MOC, DF et RW.

Pour les simulations faisant intervenir des particules (méthodes MOC et RW), on a supposé que la concentration était exprimée en  $\text{kg/m}^3$ . On a alors fixé la masse de chaque particule à 0.002 kg de façon à avoir 8000 particules en fin de simulation.

### 27.8.4 Résultats obtenus

La Figure 78 montre que la simulation avec la méthode TVD est précise. La concentration calculée est cependant légèrement en avance par rapport à la simulation de référence. Ceci résulte de la perméabilité à saturation utilisée dans la loi homographe, qui est un peu plus forte que la perméabilité de référence.

La Figure 79 compare les simulations obtenues avec les méthodes MOC, RW, DF et DF à mailles de 0.25 cm.

- La simulation avec la méthode MOC est très proche de la simulation TVD. Elle présente uniquement quelques petites fluctuations.
- La simulation avec la méthode RW est acceptable mais présente de fortes fluctuations.
- La simulation par la méthode DF avec un maillage de 2 cm présente une forte dispersion numérique, ce qui est logique puisque le nombre de Péclet est égal à 2.
- La simulation par la méthode DF avec un maillage de 0.25 cm (Péclet = 0.25) et des pas de temps de calcul limités à 125 s est très proche de la simulation TVD. Cette simulation est très rapide.

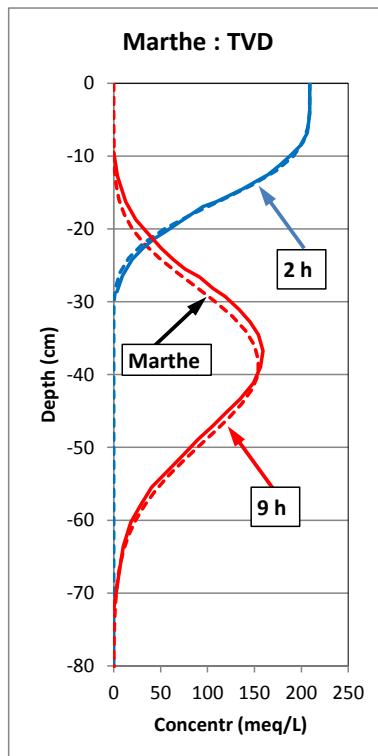


Figure 78 – Infiltration dans une colonne verticale ZNS en régime transitoire. Concentration calculée par la méthode TVD. Profils de référence en trait continu.

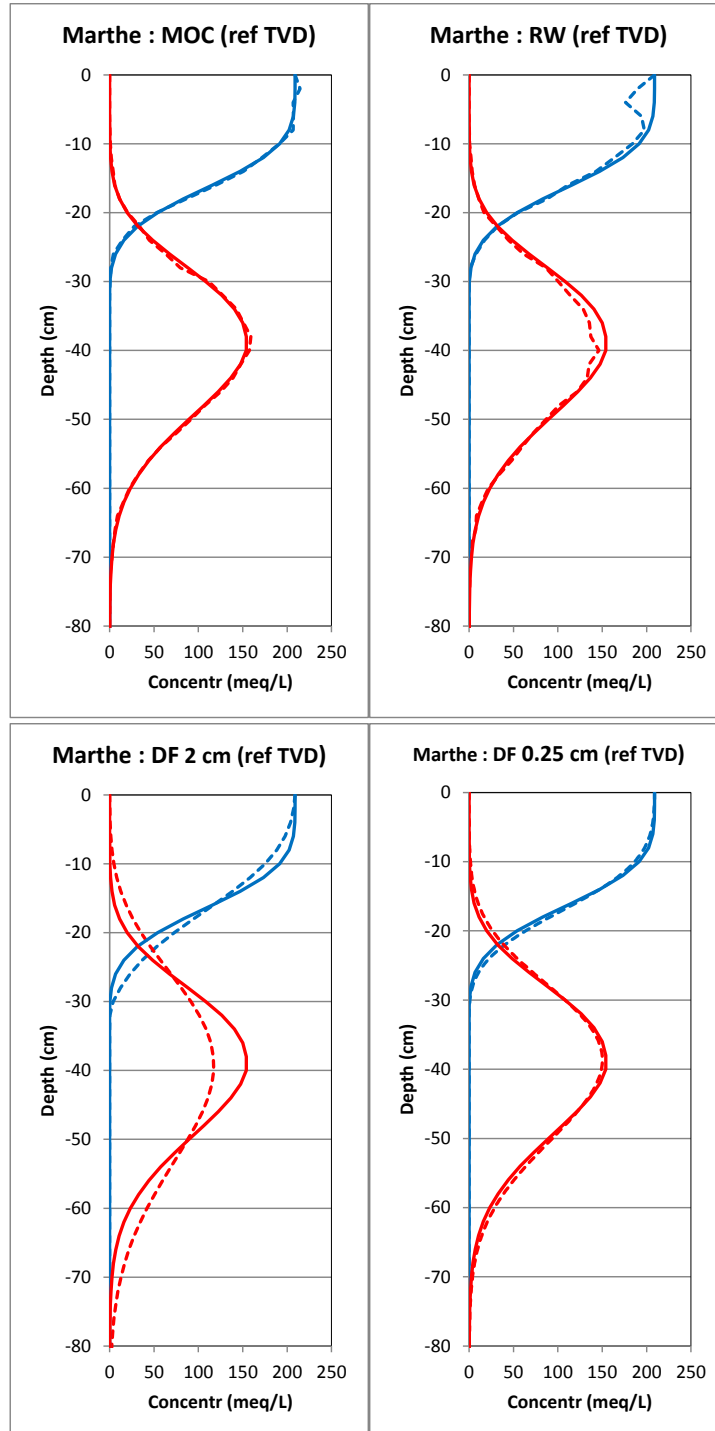


Figure 79 – Infiltration dans une colonne verticale ZNS en régime transitoire. Concentration calculée par méthodes TVD, MOC, RW, DF\_2 cm et DF\_0.25 cm Simulation TVD en trait continu.



## 27.9 Exemple de transport n°9 : Transfert thermique dans un écoulement 2D cylindrique.

### 27.9.1 But de l'exemple n°9

Cet exemple permet d'illustrer les possibilités du code de calcul en simulation de transfert thermique en écoulement cylindrique.

### 27.9.2 Description de l'exemple n°9

Cet exemple est l'exemple n°6.6 décrit par Voss (1984). Il s'agit de l'injection d'eau chaude dans un puits pendant 90 jours, puis de son re-pompage pendant 90 jours également.

- Paramètres hydrodynamiques

Perméabilité (à 20 °C) :  $K = 10^{-3}$  m/s

Épaisseur :  $b = 30$  m

Débit injecté : (réparti le long du puits) :  $Q = 20 \cdot 10^{-3}$  m<sup>3</sup>/s

Coefficient d'emmagasinement : 0

- Paramètres thermiques :

Température initiale : 20 °C

Température injectée : 60 °C

Conductivité thermique :

Eau : 0.6 J/s/m/°C

Solide : 3.5 J/s/m/°C

Capacité thermique :

Eau : 4182 J/kg/°C

Solide :  $2.226 \cdot 10^6$  J/m<sup>3</sup>/°C (Capacité thermique volumique)

Loi de densité : fonction (température) :

$$\rho(T) : 1007.5 - 0.375 \times T \quad (\text{en kg/m}^3)$$

Loi de viscosité : fonction (température) = Loi exponentielle :

$$\mu(T) = 2.394 \cdot 10^{-5} \cdot 10^A \quad (\text{en Pa.s} \Leftrightarrow \text{kg/m.s})$$

$$\text{Avec } A = 248.37 / (T + 133.15 \text{ °C})$$

$$T = \text{température en °C}$$

- Paramètres de transport :

Porosité :  $\omega = 35$  %

Dispersivités :  $\alpha_L = 4$  m

$\alpha_T = 1$  m

- Conditions aux limites :

Pression hydrostatique imposée sur la couronne extérieure (située à 246 m de l'axe de symétrie), avec une pression de référence égale à zéro sur la maille du haut.

### **27.9.3 Simulation avec le code de calcul MARTHE**

Pour tenir compte du couplage entre la température, la densité et la viscosité, 5 itérations de couplage sont effectuées pour chaque pas de temps. La modélisation du transport est faite par la méthode DF.

#### **a) Maillage et découpage du temps**

Le maillage cylindrique utilisé comprend 12 mailles sur la verticale :

- 8 mailles de 3 m ;
- 2 mailles de 2.8 m ;
- 2 mailles de 0.2 m.

Dans la direction radiale, le maillage comprend 108 mailles de largeurs croissantes, de 1 m de large à 9.2 m de large avec une progression géométrique de raison 1.1592.

Les pas de temps sont tous égaux à 3 jours.

#### **b) Résultats de la simulation**

Les champs de température calculée 30 jours après le début de l'injection d'eau chaude, 90 jours après le début de l'injection et 60 jours après le début du re-pompage sont représentées sur la Figure 80. On voit nettement l'effet de la température qui provoque une inclinaison des isothermes sous l'effet :

- De la densité : l'eau froide, plus lourde, reste en bas et l'eau chaude se déplace vers le haut ;
- De la température : l'eau chaude, en haut, a une viscosité plus faible, ce qui induit une perméabilité plus forte, donc une vitesse plus forte.

Les nombres de Courant moyens, pondérés par le flux de chaleur, varient au cours du temps entre 7 et 30, ce qui peut générer de la dispersion numérique. La valeur maximale du nombre de Courant est égale à 785, dans les très petites mailles en haut et en bas du puits d'injection. De tels nombre de Courant rendraient très longs les calculs par la méthode TVD. Le nombre de Péclet moyen est égal à 0.45. Les résultats obtenus sont relativement semblables à ceux obtenus avec le code de calcul SUTRA (Voss C., 1984).

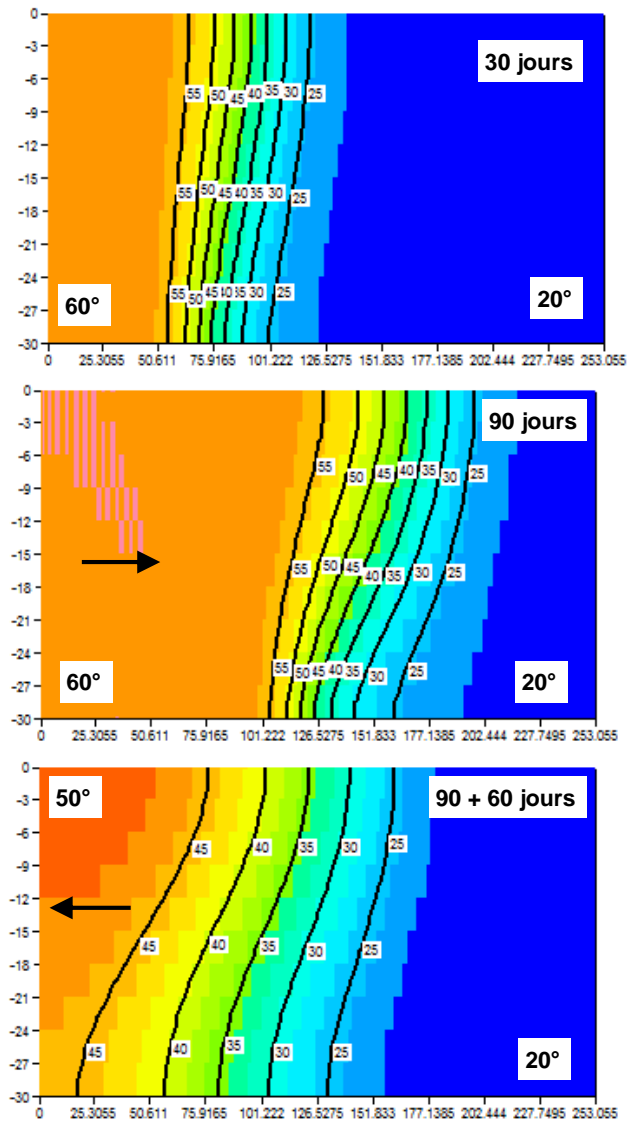


Figure 80 – Transfert thermique dans un écoulement radial : Température calculée à trois dates.

## 27.10 Exemple de transport n°11 : Transport dans un milieu très hétérogène.

### 27.10.1 But de l'exemple n°11

Cet exemple permet de vérifier le comportement des méthodes de transport dans un milieu de perméabilité (donc de vitesses) très hétérogène.

### 27.10.2 Description de l'exemple n°11

Il s'agit d'un domaine 2D d'environ 480 m de long sur 70 m de large, avec une bande horizontale de perméabilité cent fois plus forte que celle des bords. On impose un gradient horizontal de charge hydraulique uniforme : les vitesses sont donc horizontales et cent fois plus fortes dans la bande horizontale centrale que sur les bords. Les dispersivités étant uniformes, les dispersions sont elles aussi cent fois plus fortes dans la bande centrale.

- Paramètres hydrodynamiques
  - Perméabilité :  $K = 10^{-5}$  m/s
  - Gradient horizontal de charge hydraulique : 1/100 de la droite vers la gauche
  - Épaisseur de l'aquifère :  $b = 1$  m
  - Largeur de la bande plus perméable :  $L = 30$  m
- Paramètres de transport
  - Porosité :  $\omega = 10$  %
  - Dispersivités :  $\alpha_L = 10$  mètres et  $\alpha_T = 2$  mètres
  - Diffusion moléculaire : 0
  - Injection : concentration instantanée :  $C = 200$  kg/m<sup>3</sup>
  - Lieu d'injection : Point d'injection à mi-hauteur de la bande plus perméable, à l'abscisse  $x = 600$  m ( $y = 30$  m).
  - Surface d'injection : Une maille de 10 m de large sur 2 m de haut (soit 2 m<sup>3</sup> d'eau). La masse totale injectée est donc de 400 kg.

### 27.10.3 Simulation avec le code de calcul MARTHE

On a choisi un maillage rectangulaire avec des mailles de 10 m de large sur 2 m de haut. La simulation se fait pendant 20 jours avec des pas de 0.2 jours (soit 100 pas). Le champ de concentration est calculé avec les méthodes TVD, MOC, DF (et RW pour mémoire). Avec les méthodes de transport à particules (MOC et RW), chaque particule porte une masse de  $5 \cdot 10^{-3}$  kg, soit au total 80 000 particules pour les 400 kg injectés.

#### ***Simulation de référence à maillage fin***

Une première simulation a été tout d'abord effectuée, à titre de référence, par la méthode DF avec des mailles très fines de 2 m sur 2 m (Figure 81).

Les autres simulations ont ensuite été réalisées avec le maillage de 10 m x 2 m : voir Figure 82.

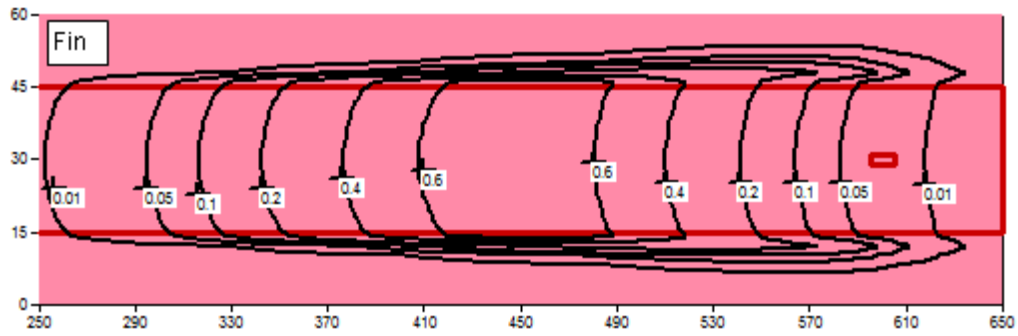


Figure 81 – Transport dans un milieu très hétérogène : Concentration calculée avec un maillage fin.

### a) Simulation par la méthode TVD

La Figure 82 montre que la méthode TVD donne de très bons résultats, comparables à la simulation à maillage fin.

### b) Simulation par la méthode MOC

La Figure 82 montre que la méthode MOC donne de très bons résultats, avec quasiment pas d'oscillations (sauf pour les très faibles concentrations). Les résultats sont proches de ceux obtenus avec la méthode TVD.

### c) Simulation par la méthode DF

La Figure 82 montre que la méthode DF donne des résultats approximatifs car les mailles sont trop larges (nombre de Péclet = 1 dans la direction horizontale). La zone comprise dans l'isovaleur 0.6 est nettement trop petite.

### d) Simulation par la méthode RW (pour mémoire)

La méthode RW donne de mauvais résultats (non représentés), avec une forte accumulation dans les zones à faible vitesse, où la concentration est maximale et est plus de 5 fois supérieure à celle de la zone centrale. Ceci est dû au contraste de dispersion.

On a effectué un calcul supplémentaire par la méthode RW avec prise en compte des gradients de vitesse (termes de Ito). Les résultats sont meilleurs, avec moins d'accumulation, mais ils ne sont pas satisfaisants.

## Caractéristiques des simulations

À titre indicatif, les temps de calcul du transport sont, sur l'ordinateur utilisé sont de :

- 2.1 s pour la méthode TVD
- 10.3 s pour la méthode MOC
- 1.6 s pour la méthode DF.

Pour cette application, la méthode TVD, qui donne de très bons résultats, est très rapide.

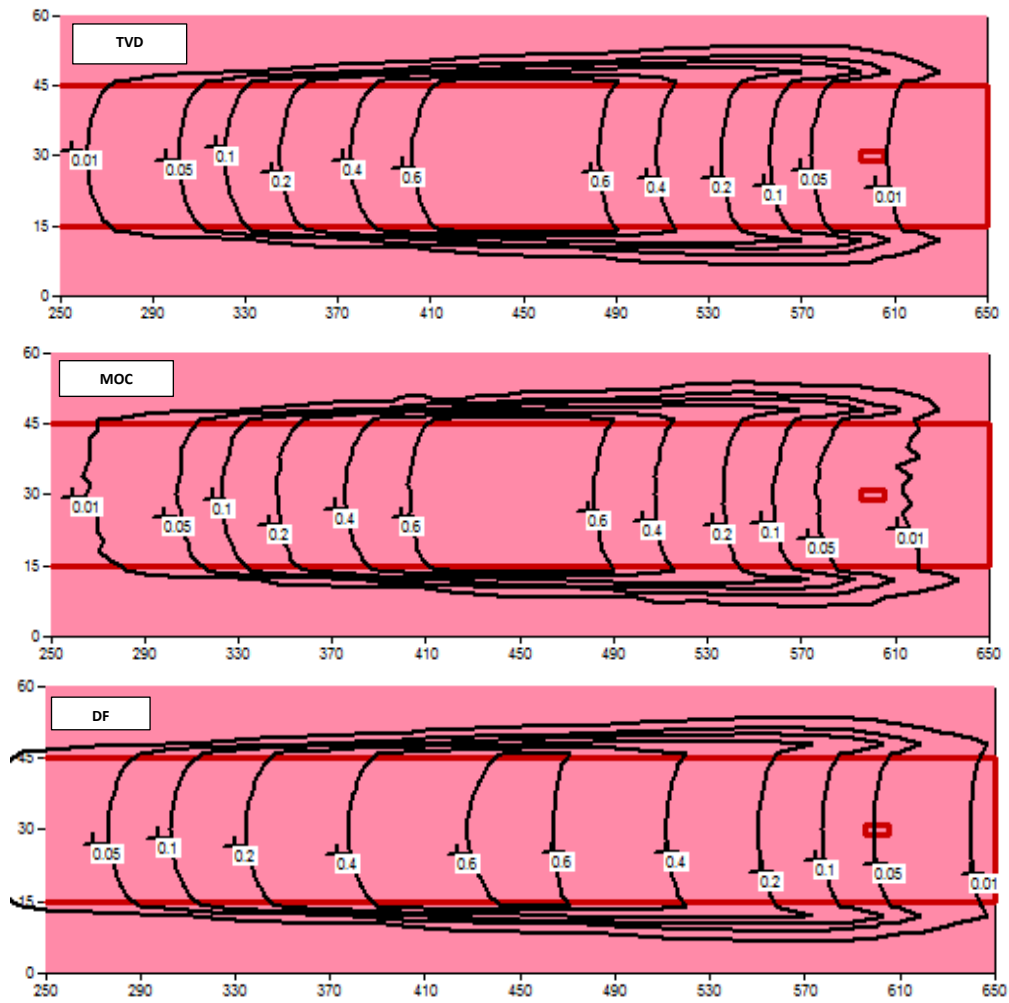


Figure 82 – Transport dans un milieu très hétérogène.  
Concentration calculée par les méthodes TVD, MOC et DF.

## **28 Vérification du calcul de transfert de masse avec double porosité et exemples d'application**

Ce chapitre présente quelques exemples d'applications et de vérifications de la prise en compte de la double porosité avec cinétique d'échange :

- 1) Injection d'un débit massique dans un milieu infini : vérification avec une solution analytique.
- 2) Concentration imposée dans un milieu semi-infini : vérification avec une solution analytique.
- 3) Dilution dans une colonne de dimension finie.
- 4) Pollution dans la nappe « Rocky Mountain » : Écoulement 2D avec dégradation.
- 5) Calibration automatique des paramètres de double porosité.
- 6) Transport avec une vitesse différente dans chaque porosité.

## 28.1 Exemple avec double porosité n°1 : Injection d'un débit massique dans un milieu infini.

### 28.1.1 Définition du test

Ce test de validation est adapté du test décrit par Grove et Stollenwerk (1984).

Les caractéristiques de l'écoulement sont les suivantes :

- colonne de 1 m<sup>2</sup> de section ;
- écoulement 1D en régime permanent avec une vitesse réelle (vitesse de filtration) égale à :  $u = 0.1$  cm/s ;
- porosité :  $\omega = 37$  % ;
- dispersivité :  $\alpha = 1$  cm ;
- durée de l'injection de masse = 160 s ;
- double porosité avec cinétique ;
- coefficient de retard équivalent quand les échanges sont instantanés :  $R = 5$ .

Compte tenu qu'en milieu saturé le coefficient de retard  $R$  est donné par la relation :

$$R = 1 + \frac{\text{RhoKD}}{\omega}$$

On a introduit ce coefficient de retard en utilisant une valeur de  $\text{RhoKD}$  définie par :

$$\text{RhoKD} = (R - 1) \cdot \omega$$

$$\text{Soit } \text{RhoKD} = 1.48$$

Ce coefficient  $\text{RhoKD}$  est égal à  $\rho_s \cdot k_d$

Avec :

$$\rho_s = \text{masse volumique sèche du sol}$$

$$k_d = \text{coefficient de partage}$$

Il est adimensionnel. Dans MARTHE il est exprimé en unité utilisateur de porosité, soit 148 % ici, car il correspond exactement à une porosité immobile. On remarque qu'ici  $\text{RhoKD}$  est supérieur à 100 % ce qui correspond par exemple à une forte sorption sur la matrice poreuse.

La discrétisation est la suivante :

- dimension des mailles :  $dx = 0.16$  cm ;
- discrétisation du temps :  $dt = 1.6$  s.

À partir de ces données on déduit les informations suivantes :

- vitesse de Darcy = 0.037 cm/s ( $3.7 \cdot 10^{-4}$  m/s) ;
- nombre de Péclet = 0.16 ( $Pe = dx / \alpha$ ) ;
- nombre de Courant = 1 ( $Cr = u \cdot dt / dx$ ).



Conditions aux limites :

- milieu Infini ;
- injection au milieu de la colonne d'un débit massique =  $3.7 \cdot 10^{-4}$  kg/s pendant 160 secondes, puis arrêt de l'injection de masse. On note que compte tenu de la vitesse de Darcy, ce flux de masse correspond à une concentration de  $1 \text{ kg/m}^3$ .

L'objectif du test est de comparer, pour différentes valeurs de la cinétique, l'évolution temporelle de la concentration à une distance de 8 cm en aval du point d'injection.

Les échanges entre eau liée et phase immobile sont donnés par :

$$\rho_s \cdot \frac{\partial S_{mc}}{\partial t} = \beta \cdot \left( C - \frac{S_{mc}}{k_{dc}} \right)$$

Ou bien :

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = \beta \cdot \left( C - \frac{C_s}{\rho_s \cdot k_d} \right)$$

Avec :

$\rho_s$  = Masse volumique sèche du terrain (de l'ordre de  $1600 \text{ kg/m}^3$ ).

$S_{mc}$  = Concentration massique de la phase immobile [ $M \cdot M^{-1}$ ].

$C_s$  = Concentration volumique du solide en masse par volume de terrain [ $M \cdot L^{-3}$ ].

$C_s$  =  $S_{mc} \cdot \rho_s$

$k_{dc}$  = Coefficient de partage pour la porosité immobile avec cinétique [ $M \cdot M^{-1}$ ].

$\beta$  = Cinétique d'échange linéaire [ $T^{-1}$ ].

Au lieu du paramètre  $\beta$  classique, on utilise le temps de  $\frac{1}{2}$  échange de masse  $t_{1/2e}$  qui est le temps nécessaire pour obtenir la moitié des échanges de masse :

$$t_{1/2e} = \frac{\text{Ln}(2)}{\beta}$$

$$\text{Ln}(2) = 0.6931$$

### 28.1.2 Simulations réalisées

Les calculs ont été réalisés avec la méthode de transport TVD.

Les simulations ont été réalisées pour les valeurs de cinétique d'échange de la Figure 83

$\beta$ (s <sup>-1</sup> )	1/ $\beta$ (s)	$t_{1/2e}$ (s) correspondant
0	infini	infini
0.002	500	346.6
0.01	100	69.3
100	0.01	0.0069

Figure 83 – Cinétiques d'échange entre la phase mobile et la phase immobile.

Le premier cas est équivalent à un schéma sans sorption (coefficient de retard = 1) parce que la cinétique est infiniment lente.

Le quatrième cas est pratiquement équivalent à une sorption linéaire en équilibre (coefficient de retard = 5) puisque le temps de ½ échange  $t_{1/2e}$  est inférieur à 0.01 seconde. C'est une valeur pratiquement instantanée comparée au temps nécessaire pour atteindre le point d'observation (à 8 cm) qui est de 80 secondes, et comparé au temps de résidence dans une maille qui est de 1.6 s.

### 28.1.3 Comparaison avec la solution analytique

Une solution analytique a été développée pour une injection de masse dans un milieu infini. Elle a été obtenue par intégration de fonctions sources.

Remarque : Il convient de noter que cette solution analytique a été calculée pour une constante de temps d'échange =  $1/\beta \times$  Porosité mobile.

Les courbes d'évolution de la concentration dans la phase mobile et dans la phase immobile pour les quatre valeurs de cinétiques sont représentées sur la Figure 84 et la Figure 85. Les simulations avec le code de calcul MARTHE sont représentées avec un trait continu ; les solutions analytiques de référence sont représentées par des symboles. Il apparaît que les simulations sont très précises puisque, pour chaque cinétique, la simulation est superposée à la solution de référence.

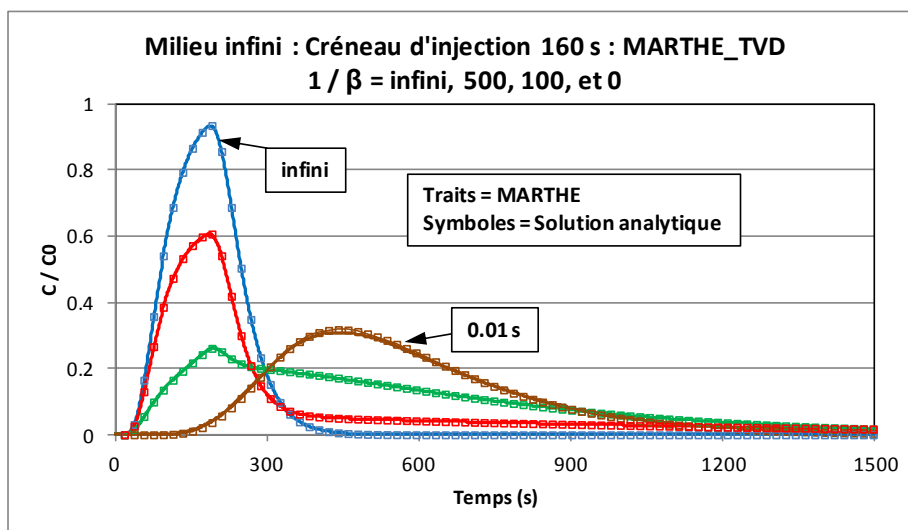


Figure 84 – Injection de masse dans une colonne infinie. Double porosité avec cinétique. Évolution temporelle de la concentration à 8 cm du point d'injection. De haut en bas : cinétique  $1/\beta =$  infini, 500 s et 0.01 s.

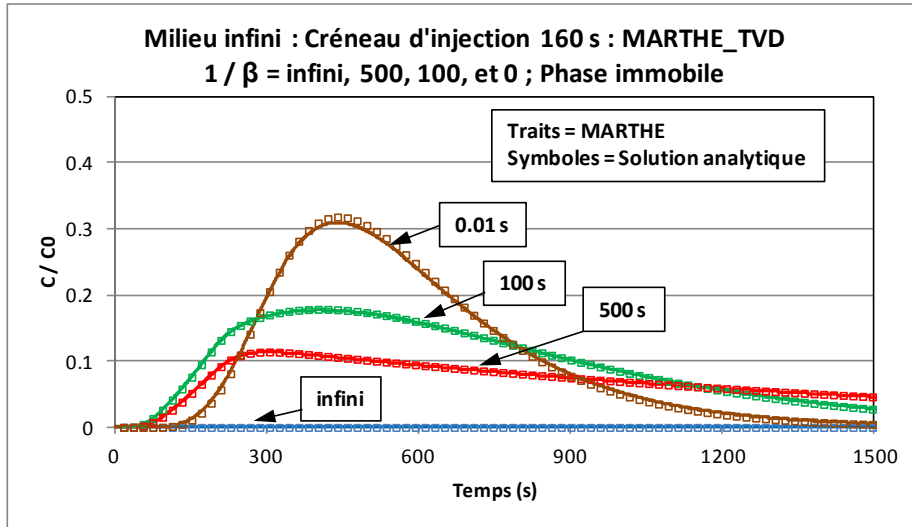


Figure 85 – Injection de masse dans une colonne infinie. Double porosité avec cinétique. Évolution temporelle de la concentration dans la phase immobile, à 8 cm du point d'injection, pour 4 cinétiques.

La Figure 86 montre la simulation obtenue pour  $1/\beta = 500$  s avec la méthode MOC. La simulation est précise et ne présente pas de fluctuations numériques.

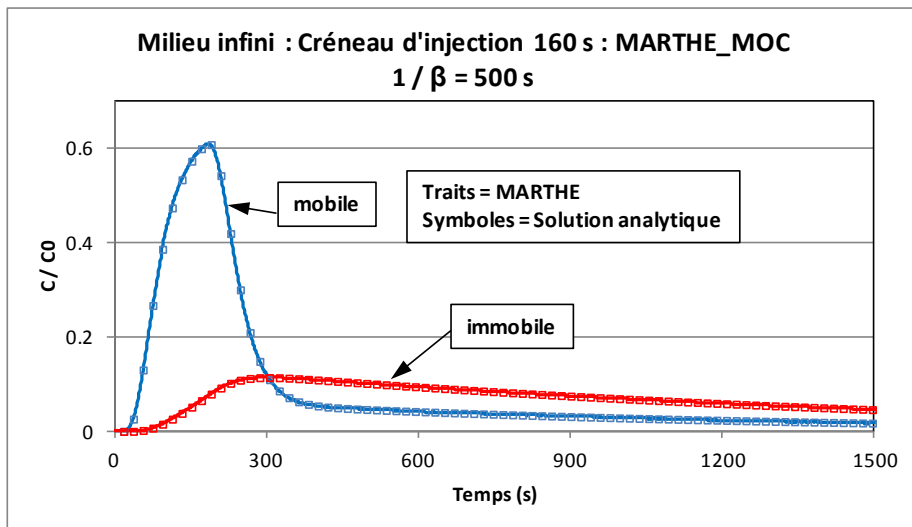


Figure 86 – Injection de masse dans une colonne infinie. Double porosité avec cinétique. Évolution temporelle à 8 cm du point d'injection : méthode MOC.

## 28.2 Exemple avec double porosité n°2 : Concentration imposée dans un milieu semi-infini.

### 28.2.1 Définition du test

Ce test est comparable au précédent, mais avec les différences suivantes :

- la colonne poreuse est semi-infinie au lieu d'infinie ;
- la concentration est imposée sur la limite amont, au lieu de l'injection d'un flux massique. La concentration est imposée à 1 ( $\text{kg/m}^3$ ) pendant 160 secondes. À partir de cette date, elle est imposée à 0.

### 28.2.2 Simulations réalisées

Les simulations ont été réalisées avec la méthode de transport TVD, pour les mêmes cinétiques d'échange que pour le test n°1.

### 28.2.3 Comparaison avec la solution analytique

Une solution analytique a été développée pour le cas d'une concentration imposée dans un milieu semi-infini.

Les courbes d'évolution pour les quatre valeurs de cinétiques sont représentées sur la Figure 87. Les simulations avec le code de calcul MARTHE sont représentées avec un trait continu ; les solutions analytiques de référence sont représentées par des symboles. Il apparaît que les simulations sont très précises.

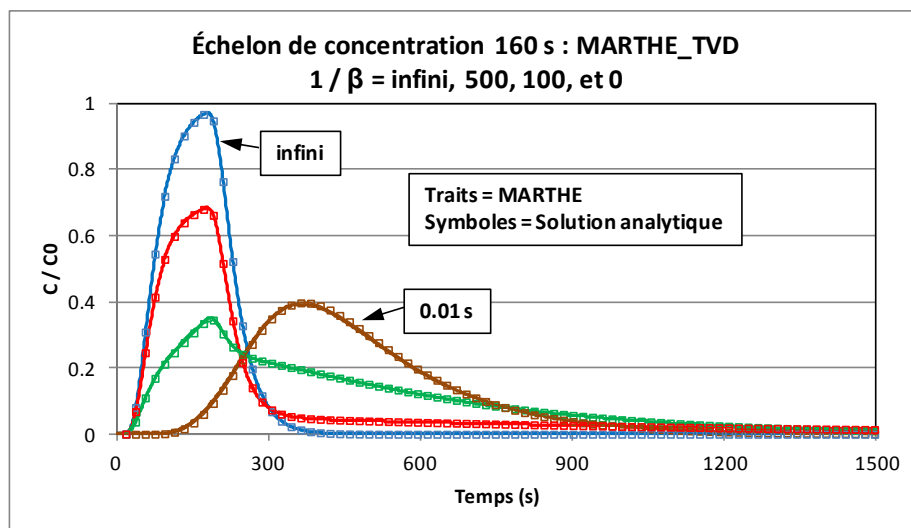


Figure 87 – Concentration imposée dans une colonne semi-infinie. Double porosité avec cinétique. Évolution temporelle de la concentration à 8 cm du point d'injection. De haut en bas : cinétique  $1/\beta = \text{infini}$ , 500 s, 100 s et 0.01 s.

## 28.3 Exemple avec double porosité n°3 : Dilution dans une colonne de dimension finie.

### 28.3.1 Définition du test

Ce test de double porosité avec cinétique est adapté d'un test proposé par VanderBorghet et al. (2005).

Les caractéristiques de l'écoulement sont les suivantes :

- colonne de 200 cm de long, traversée par un flux uniforme avec une vitesse réelle (vitesse de filtration) égale à 1 000 cm / j ;
- porosité = 5 % ;
- porosité de la phase immobile = 45 % ;
- dispersivité (longitudinale) = 2 cm ;
- cinétique d'échange ( $\beta$ ) = 0.27 j<sup>-1</sup>.

Les échanges sont donnés par la relation :

$$\frac{\partial(\text{Por}_{\text{FIX}} \cdot C_{\text{FIX}})}{\partial t} = \beta \cdot (C - C_{\text{FIX}})$$

La discrétisation est la suivante :

- dimension des mailles = 1 cm ;
- discrétisation du temps = Variable (pas de temps internes adaptés pour respecter un nombre de Courant = 1 imposé par la méthode de transport TVD).

À partir de ces données, on déduit les informations suivantes :

- temps de ½ échange  $t_{1/2e} = 2.567$  j ;
- vitesse de Darcy = 0.5 m/j (soit 50 cm / j) ;
- nombre de Péclet = 0.5.

Conditions initiales :

- concentration = 1 dans l'eau mobile et dans l'eau immobile entre les distances 10 cm et 11 cm à partir de la limite amont ;
- concentration = 0 partout ailleurs.

Conditions aux limites :

- concentration = 0 dans le flux injecté à la limite amont ;
- flux naturel à la limite aval (à 200 cm). L'eau sort avec sa concentration.

L'objectif du test est de comparer la concentration dans l'eau mobile, la « fracture », et dans l'eau (quasi) immobile, la « matrice ».

### 28.3.2 Résultats

La Figure 88 présente les courbes d'évolution de la concentration calculée dans l'eau mobile et dans l'eau immobile à la distance de 60 cm de l'amont de la colonne, c'est-à-dire à 50 cm de

l'application initiale. Elle montre nettement un pic très marqué dans l'eau mobile, qui pourrait représenter une fracture ou un macropore. On observe alors une décroissance lente due aux échanges avec la phase immobile. La Figure 89 présente la concentration moyenne pondérée dans les deux phases. Elle met nettement en évidence l'arrivée rapide de masse suivie, vers 1.8 jour, d'un pic secondaire retardé.

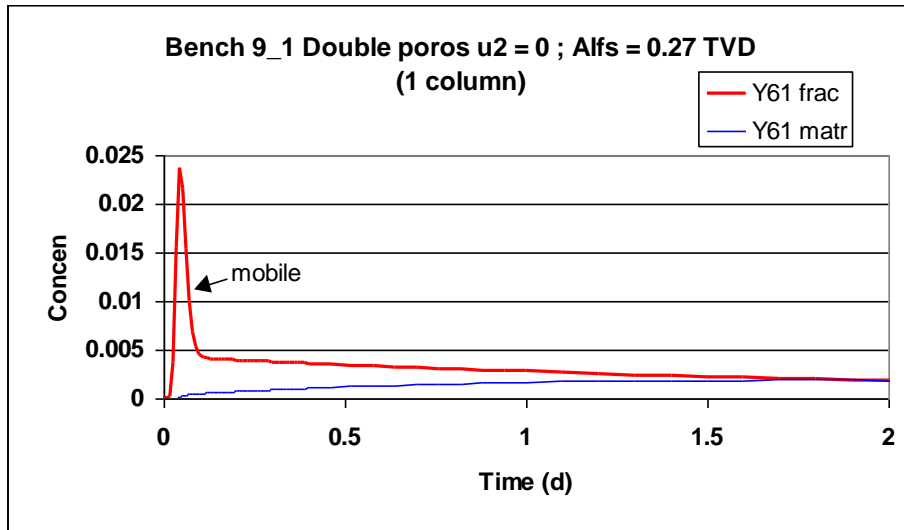


Figure 88 – Dilution dans une colonne finie (temps de  $\frac{1}{2}$  échange = 2.567).

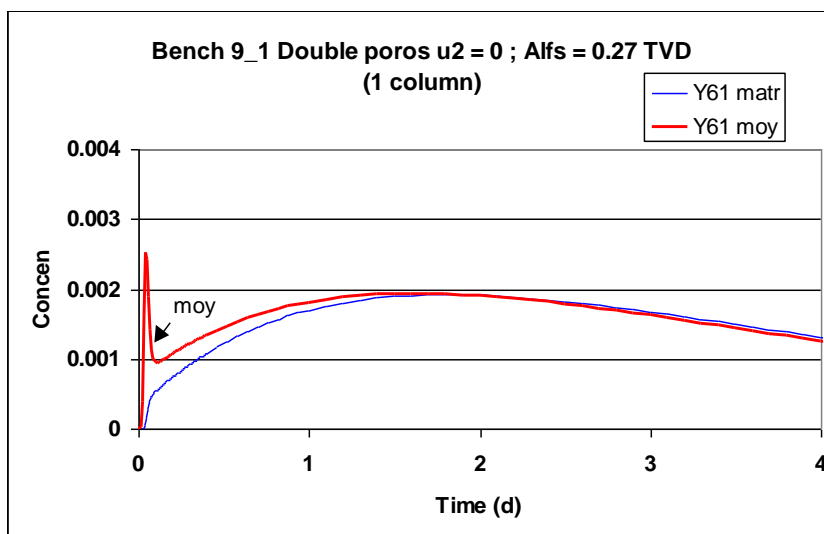


Figure 89 – Dilution dans une colonne finie. Concentration moyenne (masse).

## 28.4 Exemple avec double porosité n°4 : Pollution dans la nappe « Rocky Mountain ».

### 28.4.1 But de l'exemple n°4

Cet exemple permet d'illustrer l'applicabilité du code de calcul dans un écoulement 2D à vitesses quelconques, avec un transport intégrant une dégradation du polluant.

Ce cas d'application est adapté (librement) du test « Rocky Mountain Arsenal » décrit par Voss (1984). Il s'agit d'une nappe alluviale de caractéristiques suivantes :

- zone d'étude de dimensions approximative 16 km x 20 km ;
- écoulement approximativement du Nord au Sud ;
- injection d'eau à une concentration égale à 1 000 unités (ppm) dans un lac situé dans la zone nord du domaine ;
- quelques puits de récupération sont situés dans la partie sud du domaine et un puits d'injection d'eau à concentration égale à 10 au sud-ouest (coordonnées 4 000 m, 7 000 m).

Les paramètres de MARTHE contrôlant l'hydrodynamique sont :

- perméabilité =  $2.5 \cdot 10^{-4}$  m/s ;
- épaisseur = 40 m ;
- charge hydraulique sur la limite amont = 250 m ;
- charge hydraulique sur la limite aval = 38 m.

Les paramètres contrôlant le transport sont :

- Temps de  $\frac{1}{2}$  dégradation = 20 années ;
- dimension des mailles = 1 km (mailles carrées) ;
- dispersivité :     longitudinale = 500 m,  
                          transversale = 100 m ;
- concentration de l'eau entrant par la limite amont = 10 ;
- porosité = 20 % ;
- porosité Fixe = 40 % ;
- temps de  $\frac{1}{2}$  échange = 5 ans.

Les conditions initiales sont les suivantes :

- concentration dans l'eau mobile = 10 ;
- concentration dans l'eau immobile = 100.

### 28.4.2 Simulation avec le code de calcul MARTHE

La simulation est réalisée en régime transitoire de transport. On examine les champs de concentration après 2 ans et après 60 ans.

La Figure 90 montre les champs de concentration après 2 ans. L'effet de la double porosité est très net comme le montre la comparaison avec la même simulation sans double porosité (fig. supérieure). La concentration de la phase immobile diminue, celle de l'eau mobile augmente. La variation de concentration en forme de cible au sud-ouest est due à l'injection d'eau peu concentrée.

La Figure 91 montre le champ de concentration après 60 ans. Après cette longue durée, comparée au temps de  $\frac{1}{2}$  échange, les concentrations dans l'eau mobile et dans l'eau immobile sont très semblables, En revanche, ces concentrations sont nettement plus faibles que la concentration de référence, à cause de l'effet retard dû à la porosité de la phase immobile.

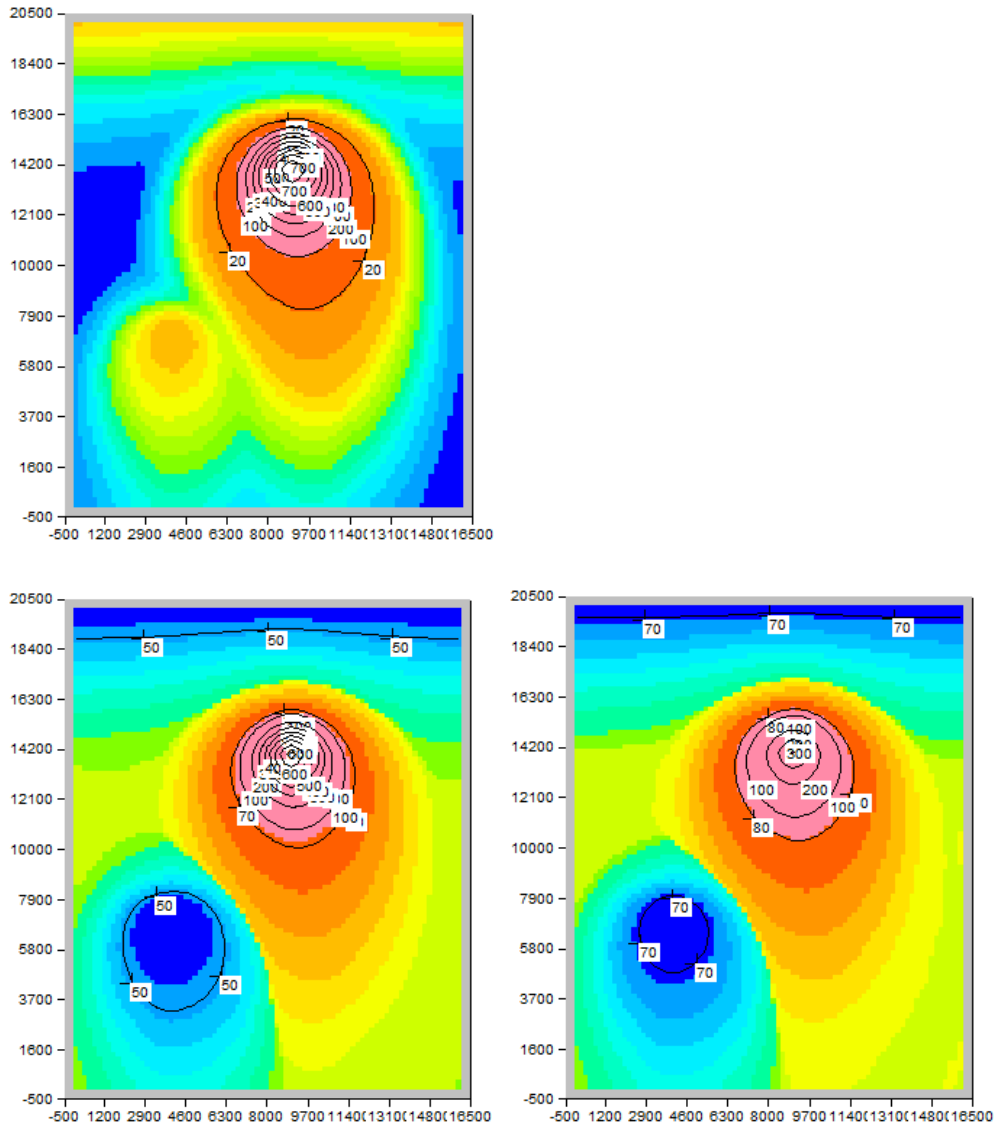


Figure 90 – Test « Rocky Mountain ». Concentration après 2 ans.  
 En haut : référence (sans porosité immobile)  
 En bas : à gauche : concentration ; à droite : concentration dans la phase immobile.



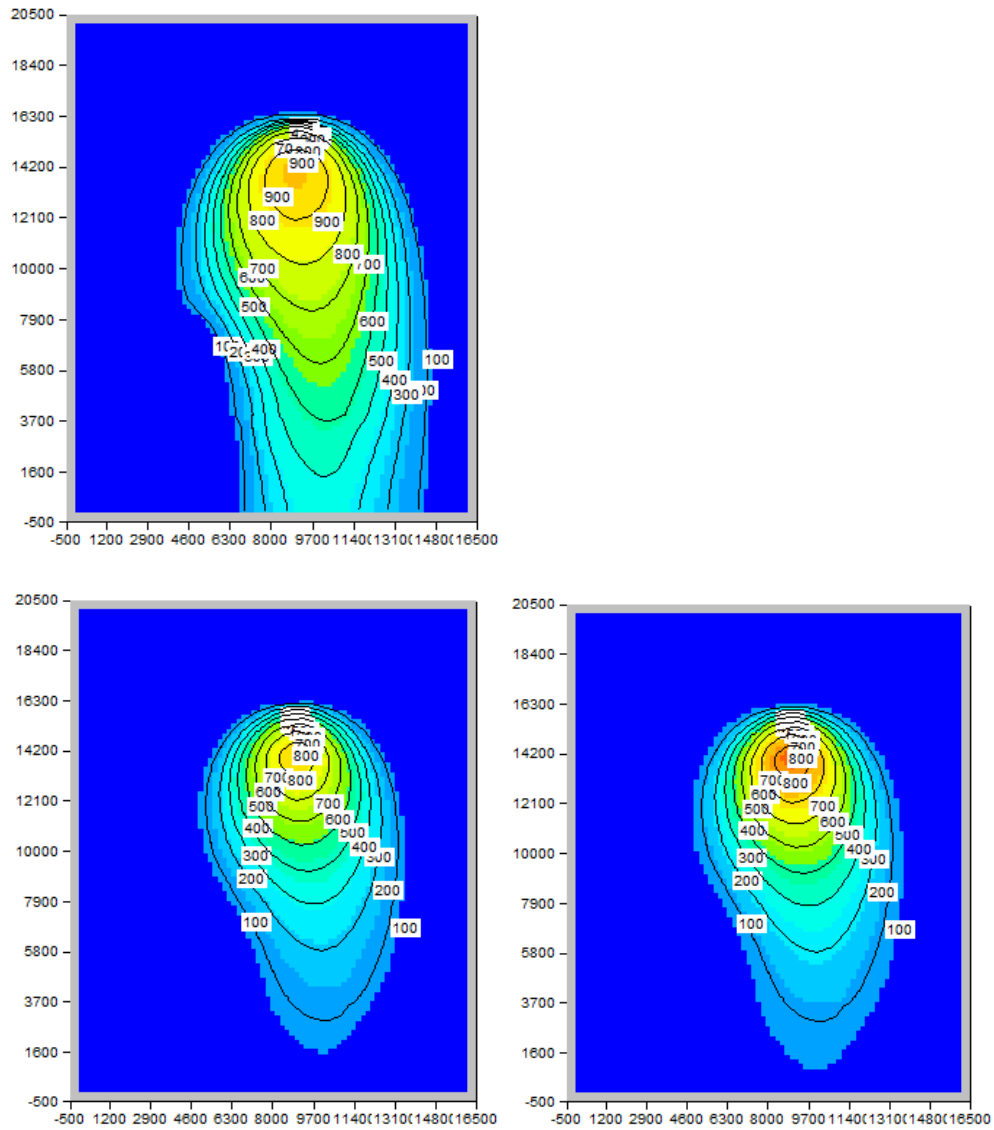


Figure 91 – Test « Rocky Mountain ». Concentration après 60 ans.  
 En haut : référence (sans porosité immobile)  
 En bas : à gauche : concentration ; à droite : concentration dans la phase immobile.

## 28.5 Exemple avec double porosité n°5 : Calibration automatique

Concentration imposée dans un milieu semi-infini avec calibration automatique des paramètres.

### 28.5.1 Définition du test

les conditions de ce test sont identiques à celles du test n°2 :

- Écoulement dans une colonne poreuse semi-infinie ;
- La concentration est imposée sur la limite amont. La concentration est imposée à 1 (kg/m<sup>3</sup>) pendant 160 secondes. À partir de cette date elle est imposée à 0.

### 28.5.2 Simulations réalisées

La simulation réalisée correspond à une cinétique décrite par un temps de ½ échange de masse  $t_{1/2e} = 346.6$  s ( $1 / \beta = 500$  s) et une porosité immobile = 148 %.

Pour valider la possibilité de calibration automatique on est parti des valeurs suivantes des paramètres :

- temps de ½ échange  $t_{1/2e} = 100$  s (au lieu de 346.6 s) ;
- porosité immobile = 30 % (au lieu de 148 %).

Et les paramètres ont été calibrés pour se rapprocher au maximum de la simulation obtenue avec les paramètres nominaux (346.6 s et 148 %).

### 28.5.3 Résultats obtenus

Le processus de calibration automatique est indiqué dans la Figure 92. Il montre qu'en 3 itérations de calibration, les deux paramètres ont été calibrés (erreur quadratique relative inférieure à  $8 \cdot 10^{-4}$  %).

Itération	0	1	2	3	...	(Solution)
Temps de ½ échange	100 s	669.5 s	327.2 s	348.6 s	...	(346.6 s)
Porosité immobile	30 %	30.01 %	220.0 %	146.6 %	...	(148 %)
Erreur quadr. moyenne	27.2 %	8.8 %	0.30 %	$7.8 \cdot 10^{-4}$ %	...	(0)

Figure 92 – Exemple n°5 : Calibration automatique des deux paramètres.

La Figure 93 montre la comparaison de la concentration calculée avant et après calibration automatique. Sur cette figure, la concentration calculée après calibration est confondue avec la concentration de référence, ce qui indique une calibration parfaite.

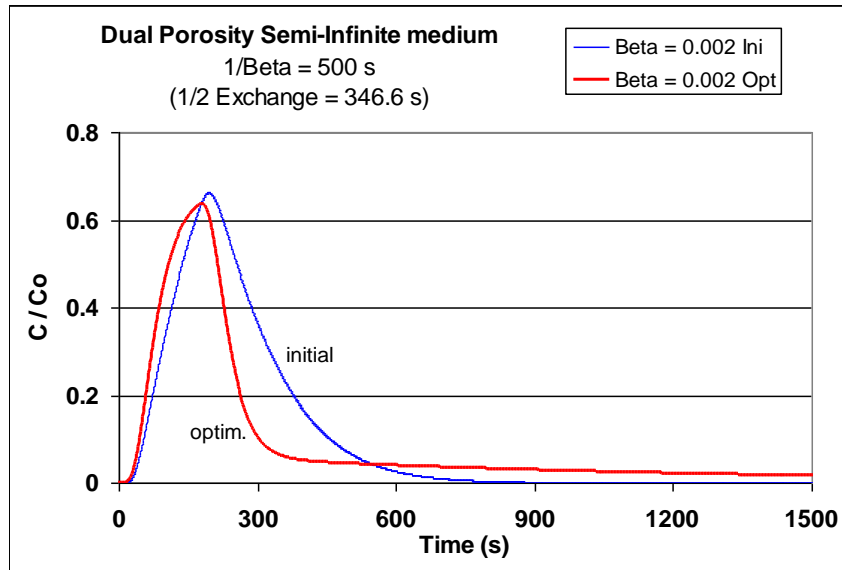


Figure 93 – Concentration imposée dans une colonne semi-infinie.  
 Concentration dans l'eau libre avant et après calibration.  
 (Double porosité avec cinétique). Évolution temporelle à 8 cm.  
 Les courbes de concentration de référence et de concentration calculée en fin de calibration sont indiscernables, ce qui indique une calibration parfaite.

## 28.6 Exemple avec double porosité n°6 : Transport avec une vitesse différente dans chaque porosité

Dilution dans une colonne de dimension finie avec deux vitesses. Ce schéma est différent des autres, puisqu'il n'y a plus ici une phase d'eau « immobile », mais une phase avec de l'eau « moins mobile ». L'approche utilisée est alors complètement différente.

### 28.6.1 Définition du test

C'est un des tests de double porosité avec cinétique proposé par VanderBorghet et al. (2005).

Les caractéristiques de l'écoulement, proche de l'exemple n°3, sont les suivantes :

- colonne de 200 cm de long, traversée par un flux uniforme, différent dans chaque région (Zone), avec une vitesse réelle (vitesse de filtration) égale à 1 000 cm/j ;
- porosité de la phase mobile = 5 % ;
- porosité de la phase peu mobile = 45 % ;
- vitesse réelle phase mobile = 1 000 cm/j (vitesse de Darcy = 50 cm/j) ;
- vitesse réelle phase peu mobile = 10 cm/j (vitesse de Darcy = 4.5 cm/j) ;
- dispersivité (longitudinale) = 2 cm ;
- cinétique d'échange ( $\beta$ ) =  $0.27 \text{ j}^{-1}$ .

Pour cet exemple, on ne peut plus considérer une seule colonne avec deux porosités, mais puisqu'il y a une vitesse dans chaque région, on utilise deux colonnes parallèles ayant chacune une porosité et une vitesse différente :

- colonne 1 : porosité = 5 % ; vitesse de Darcy = 50 cm/s
- colonne 2 : porosité = 45 % ; vitesse de Darcy = 4.5 cm/s

### 28.6.2 Mise en œuvre

Pour assurer des vitesses verticales parallèles on utilise un coefficient d'anisotropie  $K_x/K_y$  pour avoir une vitesse horizontale quasi-nulle.

Pour cette application, on a choisi un coefficient d'anisotropie horizontale :

$$A_{xy} = K_x/K_y = 10^{-8}.$$

La perméabilité à saturation de référence  $K_s$  est donnée par la relation :

$$K_s = \sqrt{K_x \cdot K_y} \quad (\text{soit } 10^{-4} \cdot K_y)$$

Pour obtenir la perméabilité verticale  $K_y$  souhaitée, la perméabilité à saturation  $K_s$  a donc été multipliée par :  $1 / \sqrt{A_{xy}}$  c'est-à-dire par  $10^{+4}$ .

Les échanges entre les deux colonnes sont assurés par une dispersivité transversale  $\alpha_T$  donnant exactement les mêmes échanges.

On peut montrer que, compte tenu de la discrétisation dans le code MARTHE,  $\alpha_T$  est donné par l'expression suivante (en supposant deux colonnes de même largeur) :

$$\alpha_T = \beta \cdot \frac{dx^2}{u_{12} \cdot \theta_{12}}$$

Avec :

$$u_{12} = \text{moyenne arithmétique des vitesses réelles} = 0.5 \cdot (u_1 + u_2)$$

$$\theta_{12} = \text{moyenne harmonique des teneurs en eau (porosités cinématiques)}$$

$$\theta_{12} = 2 \cdot \frac{\theta_1 \cdot \theta_2}{\theta_1 + \theta_2}$$

Soit avec les données de cet exemple :

- $u_{12}$  (1 000, 10) = 505 cm/j
- $\theta_{12}$  (5 %, 45 %) = 9 %

Avec :

$$\beta = 0.27 \text{ j}^{-1}$$

$$dx = 100 \text{ cm}$$

$$u_{12} = 505 \text{ cm/j}$$

$$\theta_{12} = 0.09$$

On obtient :

$$\alpha_T = 59.406 \text{ cm (0.59406 m)}$$

### 28.6.3 Résultats

La Figure 94 présente les courbes d'évolution de la concentration calculée dans les deux régions (eau mobile et eau peu mobile) à la distance de 60 cm de l'amont de la colonne, c'est-à-dire à 50 cm de l'application initiale. Comme dans l'exemple n°3, après 0.05 jour on observe un pic très marqué dans l'eau mobile, qui représente une fracture ou un macropore.

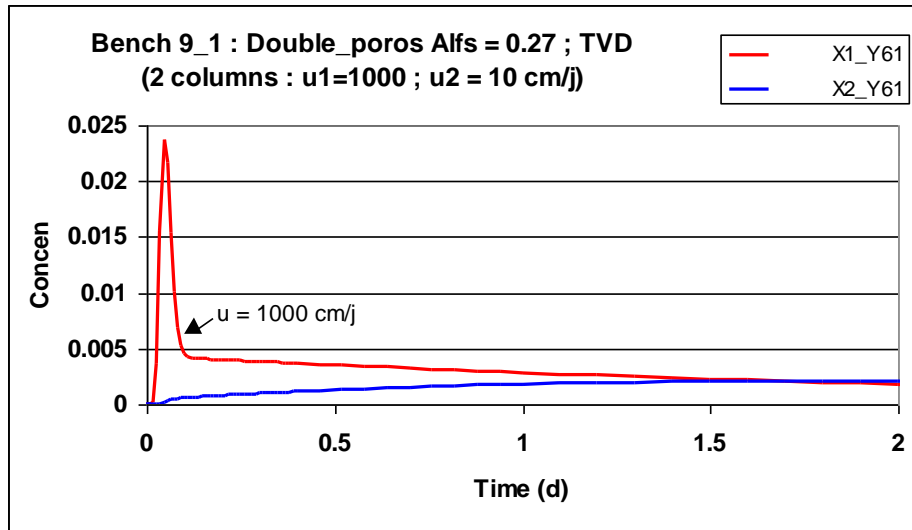


Figure 94 – Dilution dans une colonne finie avec deux régions à vitesses différentes (temps de ½ échange = 2.567).

La Figure 95 présente, sur une période plus longue, la concentration dans la zone peu mobile ainsi que la concentration moyenne dans les deux zones (moyenne pondérée par les volumes relatifs). C'est en effet cette concentration qui serait mesurée par prélèvement d'un échantillon de sol *in situ*.

Comme dans l'exemple n°3, on voit apparaître un pic retardé après 1.8 jour. Dans cet exemple on voit de plus nettement apparaître un 3<sup>ème</sup> pic dans la phase peu mobile. Il est dû au déplacement à la vitesse de 10 cm/j dans cette phase.

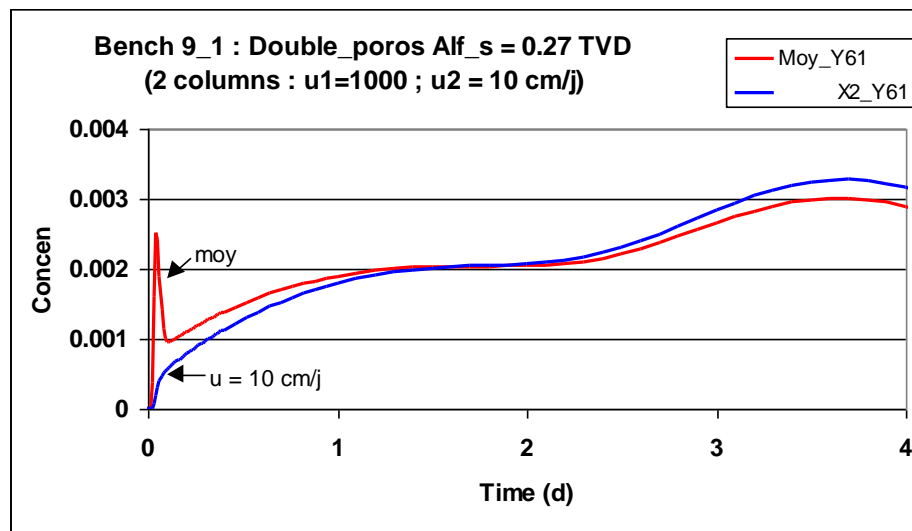


Figure 95 – Dilution dans une colonne finie avec deux régions à vitesses différentes. Concentration moyenne (masse).

## **29 Vérification du calcul de transfert thermique et exemples d'application**

Ce chapitre présente quelques exemples d'applications et de vérifications de calculs avec transfert thermique.

- Exemple n°1 : Conduction pure en écoulement radial. Régime permanent : Kolditz et Shao (2010).
- Exemple n°2 : Conduction thermique en régime transitoire à travers une paroi verticale : Kolditz et Shao (2010).
- Exemple n°3 : Pompage de chaleur sur une paroi en milieu infini - régime transitoire. Milieu saturé ou non saturé.
- Exemple n°4 : Pompage de chaleur dans un puits en milieu infini - régime transitoire. Milieu non-saturé.
- Exemple n°5 : Injection d'eau chaude dans un milieu aquifère saturé (ou une fracture) compris entre 2 épontes rocheuses - régime transitoire. Hypothèses de Lauwerier (1955).
- Exemple n°6 : Injection d'eau chaude dans un forage : Avdonin (1964).
- Exemple n°7 : Simulation d'un doublet géothermique.
- Exemple n°8 : Effet de la densité : Injection de chaleur au substratum d'un aquifère en équilibre hydrostatique.
- Exemple n°9 : Effet de la viscosité : Transfert thermique dans une colonne horizontale.





## 29.1 Exemple n°1 : Conduction pure en écoulement radial. Régime permanent

Cet exemple est tiré de Kolditz et Shao (2010). Il s'agit d'un anneau horizontal de rayon interne égal à 1 m, et de rayon externe 5 m. La température externe est fixée à 25 °C. La face intérieure (de rayon 1 m) reçoit un flux de chaleur égal à 30 W/m<sup>2</sup>.

On modélise cet exemple avec une géométrie radiale en 1D sur une épaisseur de 1 mètre. Les 4 mètres compris entre les 2 faces sont découpés en 41 mailles (radiales) de 0.1 m de largeur. On a 41 mailles, car les conditions aux limites sont imposées au centre des mailles limites. La maille interne reçoit le flux de chaleur sur une aire égale à  $1 \times 1 \times 2 \times \pi$ , soit 6.2832 m<sup>2</sup>. Le flux de chaleur apporté est donc égal à 188.496 W.

Les caractéristiques de cet exemple sont donc les suivantes :

- $\omega$  = Porosité = 0. (on prend 10<sup>-5</sup> %)
- $b$  = Épaisseur verticale du domaine = 1 m
- $R_1$  = Rayon interne = 1 m
- $R_L$  = Rayon externe = 5 m
- $Q_E$  = Flux de chaleur injecté = 188.496 W
- $T_L$  = Température de la limite externe = 25°C
- $\lambda_M$  = Conductivité thermique du minéral de la matrice poreuse = 5.5 W/m/K

Pour avoir uniquement de la conduction, donc pas de convection, on a fixé une perméabilité égale à 10<sup>-11</sup> m/s ce qui induit des débits d'échange quasi-nuls.

La solution analytique, qui donne la température **T** en fonction du rayon **r**, est évidente :

$$T(r) = T_L + \frac{R_1 \cdot Q_E}{\lambda_M} \cdot \ln\left(\frac{R_L}{r}\right) \quad (Q_E \text{ étant exprimé en W/m}^2)$$

La Figure 96 montre, par comparaison avec la solution analytique, que la simulation de cet exemple simple est correcte.

Pour vérifier la prise en compte des hétérogénéités, on a réalisé une autre simulation à partir de cet exemple mais en le rendant hétérogène. Dans ce but on a introduit un anneau 10 fois moins conducteur, soit 0.55 W/m/K, entre les rayons 3 m et 3.2 m. Le maillage a été raffiné à proximité de l'anneau moins conducteur par des mailles de 0.01 à 0.03 m. Le maillage fait intervenir 51 mailles. La solution analytique s'établit très facilement.

La Figure 97 montre, par comparaison avec la solution analytique, que la simulation de cet exemple hétérogène est correcte.

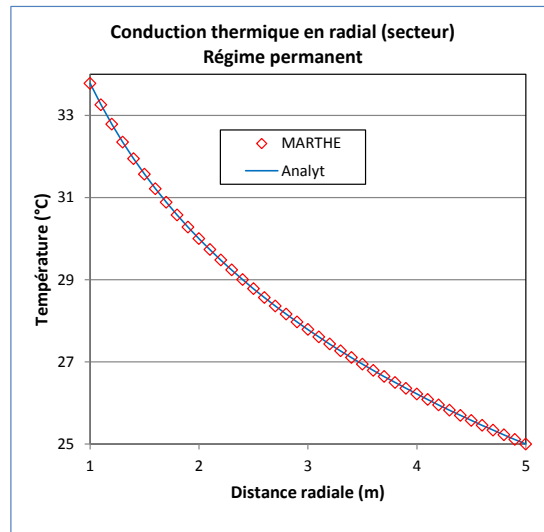


Figure 96 – Simulation avec le code de calcul MARTHE de la conduction thermique en écoulement radial avec injection d'un flux thermique. Domaine uniforme. Comparaison avec la solution analytique logarithmique.

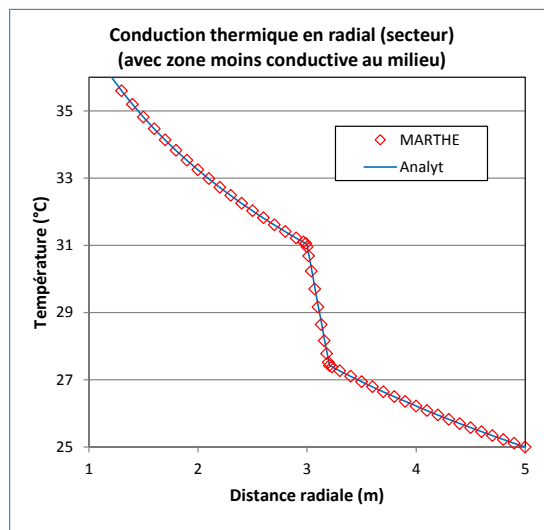


Figure 97 – Simulation avec le code de calcul MARTHE de la conduction thermique en écoulement radial avec injection d'un flux thermique. Domaine hétérogène. Comparaison avec la solution analytique logarithmique.

## 29.2 Exemple n°2 : Conduction thermique en régime transitoire à travers une paroi verticale

Cet exemple est tiré de Kolditz et Shao (2010). Il s'agit d'une paroi verticale (un « mur ») de 4 m de largeur. La température est fixée à 25 °C sur la face de droite. La face de gauche reçoit un flux de chaleur égal à 30 W/m<sup>2</sup>. On modélise cet exemple en 1D au moyen de 81 mailles de 0.05 m de largeur et de 1 m<sup>2</sup> de surface verticale. Les pas de temps sont tous égaux, de durée 5000 s.

Les caractéristiques de cet exemple sont donc les suivantes :

- $\omega$  = Porosité = 0. (on prend  $10^{-5}$  %)
- $b$  = Épaisseur verticale du domaine = 1 m
- $L$  = Largeur du « mur » = 4 m
- $Q_E$  = Flux de chaleur injecté = 30 W
- $T_L$  = Température de la limite externe = 25°C
- $\rho C_M$  = Capacité thermique volumique du minéral =  $1.8 \cdot 10^6$  J/m<sup>3</sup>/K
- $\lambda_M$  = Conductivité thermique du minéral de la matrice poreuse = 5.5 W/m/K

La solution analytique classique, obtenue par la méthode de Fourier est :

$$T_d = (1 - x_d) - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{8}{(2n - 1)^2 \cdot \pi^2} \cdot \cos\left[\frac{(2n - 1) \cdot \pi \cdot x_d}{2}\right] \cdot \exp[-(2n - 1)^2 \cdot \pi^2 \cdot t_d]$$

Avec les variables adimensionnelles :

$$T_d = [T(x, t) - T_L] \cdot \frac{\lambda_M}{Q_E \cdot L} \quad (Q_E \text{ étant exprimé en W/m}^2)$$

$$D = \frac{\lambda_M}{\rho C_M}$$

$$x_d = \frac{x}{L}$$

$$t_d = \frac{D \cdot t}{4 \cdot L^2}$$

La Figure 98 compare les profils de température calculés par MARTHE après  $5 \cdot 10^5$ ,  $10^6$  et  $2 \cdot 10^6$  secondes avec les profils calculés avec la solution analytique. Elle montre que la simulation de cet exemple est exacte.

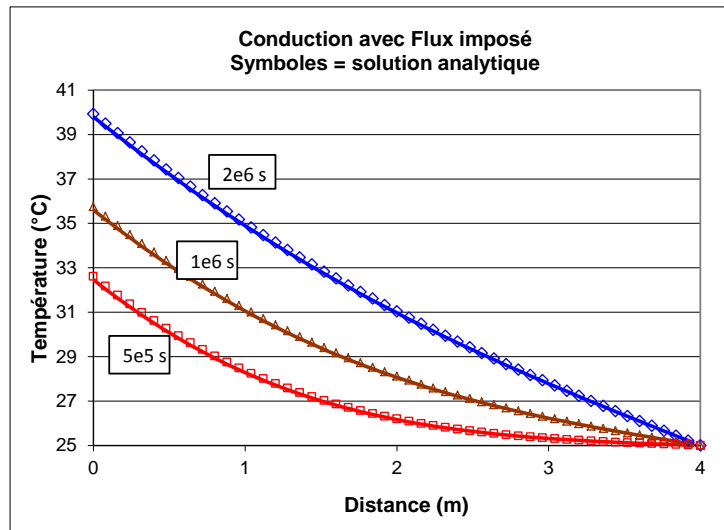


Figure 98 – Simulation avec le code de calcul MARTHE de la conduction thermique à travers une paroi verticale avec injection d'un flux thermique sur une paroi. Comparaison avec la solution analytique.

### 29.3 Exemple n°3 : Pompage de chaleur sur une paroi en milieu infini - régime transitoire. Milieu saturé ou non saturé.

Dans un milieu aquifère infini, saturé ou non saturé en eau, on prélève de la chaleur sur un plan vertical. On calcule la diminution de température dans le milieu. La température initiale est égale à 15 °C. On prélève un flux de chaleur de 5 W/m<sup>2</sup> dans une fracture verticale plane. Compte tenu de la symétrie, il suffirait de considérer un milieu semi-infini dans lequel on prélèverait un flux de 2.5 W/m<sup>2</sup> sur la face de gauche. On n'a pas retenu cette simplification et on a modélisé le milieu infini. On a choisi un domaine de 100 mètres sur l'axe des x. Les 100 mètres sont discrétisés en 1D au moyen de 101 mailles de 1 m de largeur et de 1 m<sup>2</sup> de surface verticale. On y prélève donc 5 W dans la maille du centre, située à l'abscisse 50 mètres. La période modélisée est de 365 jours découpée en 365 pas de temps de 1 jour.

Les caractéristiques de cet exemple sont les suivantes :

- $\omega$  = Porosité = 0.20
- $\theta_1$  = Teneur en eau : premier calcul en milieu saturé = 0.20
- $\theta_2$  = Teneur en eau : deuxième calcul en milieu non-saturé = 0.01
- $b$  = Épaisseur aquifère = 1 m
- $Q_E$  = Flux de chaleur prélevé = 5 W
- $T_A$  = Température initiale de l'aquifère = 15°C
- $\rho_W$  = Masse volumique de l'eau = 1000 kg/m<sup>3</sup>
- $C_W$  = Capacité thermique de l'eau = 4185 J/kg/K
- $\rho C_M$  = Capacité thermique volumique du minéral = 2.2 10<sup>6</sup> J/m<sup>3</sup>/K
- $\lambda_W$  = Conductivité thermique de l'eau = 0.6 W/m/K
- $\lambda_M$  = Conductivité thermique du minéral de la matrice poreuse = 2 W/m/K
- $\alpha_L$  = Dispersivité thermique longitudinale = 0 m

De ces données on déduit :

- $\rho C_W = \rho_W \cdot C_W$  = Capacité thermique volumique de l'eau = 4.185 10<sup>6</sup> J/m<sup>3</sup>/K

Soit pour le premier calcul en milieu saturé :

- $\rho C_{A1} = \theta_1 \cdot \rho C_W + (1 - \omega) \cdot \rho C_M$  = 2.597 10<sup>6</sup> J/m<sup>3</sup>/K
- $\lambda_{A1} = \theta_1 \cdot \lambda_W + (1 - \omega) \cdot \lambda_M$  = 1.72 W/m/K
- $D_{th1} =$  Coefficient de diffusion thermique = 6.623 10<sup>-6</sup> m<sup>2</sup>/s
- $\omega_{th1} =$  Porosité thermique (équivalente) = 0.62055

Soit pour le deuxième calcul en milieu non-saturé :

- $\rho C_{A2} = \theta_2 \cdot \rho C_W + (1 - \omega) \cdot \rho C_M$  = 1.8019 10<sup>6</sup> J/m<sup>3</sup>/K
- $\lambda_{A2} = \theta_2 \cdot \lambda_W + (1 - \omega) \cdot \lambda_M$  = 1.606 W/m/K
- $D_{th2} =$  Coefficient de diffusion thermique = 8.9131 10<sup>-6</sup> m<sup>2</sup>/s
- $\omega_{th2} =$  Porosité thermique (équivalente) = 0.43055

La [solution analytique](#), établie au [chapitre des solutions analytiques thermiques](#), est la suivante :

$$T(x, t) = \frac{F}{\lambda} \cdot \frac{x}{\sqrt{\pi}} \cdot \left[ \frac{\sqrt{4D \cdot t}}{x} \cdot e^{-\frac{x^2}{4Dt}} - \sqrt{\pi} \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x}{\sqrt{4D \cdot t}} \right) \right]$$

F étant le flux de chaleur sur la paroi (W/m<sup>2</sup>)

La Figure 99 compare les profils de température en milieu saturé calculés par MARTHE à 10 j, 50 j, 100 j, 150 j, 200 j, 300 j et 365 j avec les profils calculés avec la solution analytique. Elle montre que la simulation de cet exemple est exacte.

La Figure 100 compare les profils de température en milieu non-saturé aux mêmes dates. Elle montre que la simulation de cet exemple en milieu non-saturé est exacte.

La Figure 101 compare les profils de température à 365 jours en milieu saturé et en milieu non-saturé. Logiquement la baisse de température est plus grande en milieu non-saturé puisque la conductivité thermique  $\gamma$  est diminuée, bien que la diffusion thermique  $\delta$  soit augmentée.

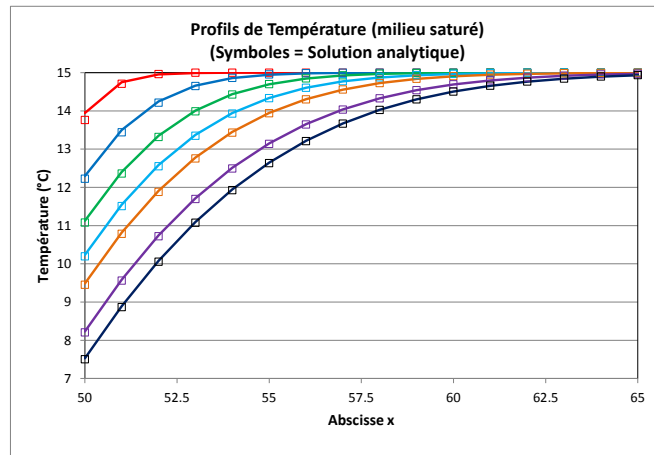


Figure 99 – Milieu saturé. Simulation avec le code de calcul MARTHE d'un pompage de chaleur en milieu infini. Profils de température à 10 j, 50 j, 100 j, 150 j, 200 j, 300 j et 365 j. Comparaison avec la solution analytique (symboles).

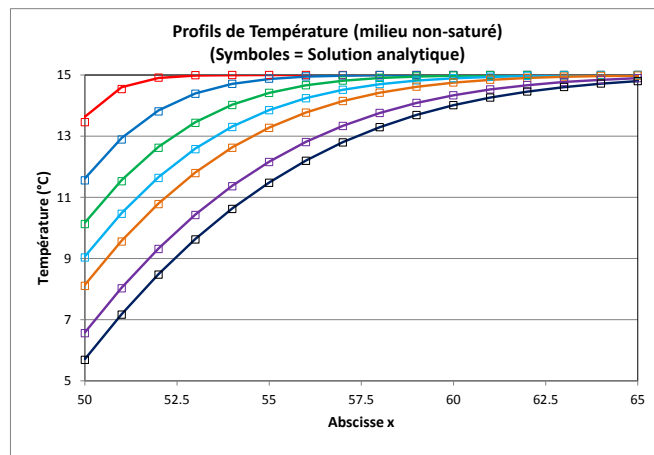


Figure 100 – Milieu non-saturé. Simulation avec le code de calcul MARTHE d'un pompage de chaleur en milieu infini. Profils de température à 10 j, 50 j, 100 j, 150 j, 200 j, 300 j et 365 j. Comparaison avec la solution analytique (symboles).

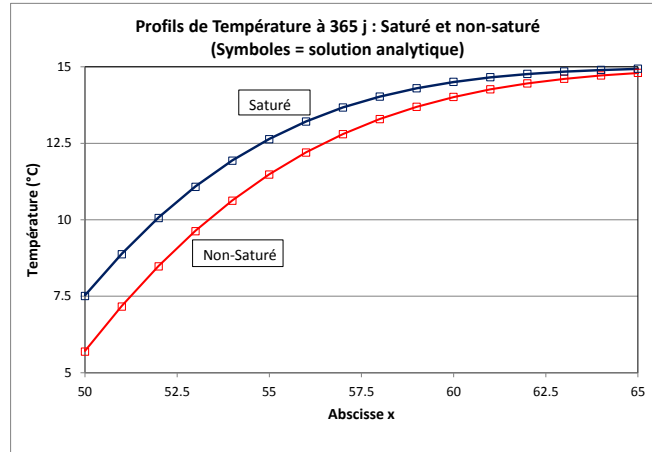


Figure 101 – Milieu saturé et non-saturé. Simulation avec le code de calcul MARTHE d'un pompage de chaleur en milieu infini. Profils de température après 365 j. Comparaison avec la solution analytique (symboles).

### 29.4 Exemple n°4 : Pompage de chaleur dans un puits en milieu infini - régime transitoire. Milieu non-saturé.

Dans un milieu aquifère infini non-saturé eau, on prélève de la chaleur dans un forage vertical de faible diamètre. On calcule la diminution de température dans le milieu. Comme dans l'exemple précédent la température initiale est égale à 15 °C. On prélève un flux de chaleur de 5 W par mètre de forage. On a modélisé le milieu infini par un maillage radial 1D de 31.66 m d'extension, avec 40 mailles de largeur radiale augmentant de 0.03 mètre à 1 mètre. La période modélisée est de 365 jours, par 365 pas de temps de 1 jour. Les caractéristiques de cet exemple sont exactement les mêmes que celles de l'exemple précédent non-saturé.

La solution exacte de cet exemple est la formule classique de Theis en remplaçant la charge hydraulique par la température :

$$T(r, t) = \frac{Q_E}{4\pi\lambda_A} \int_u^\infty \frac{e^{-u}}{u} \cdot du = \frac{Q_E}{4\pi\lambda_A} W(u) \quad \text{avec} \quad u = \frac{\rho C_A \cdot r^2}{4\lambda_A \cdot t} = \frac{r^2}{4Dt}$$

( $Q_E$  étant exprimé en W par mètre de forage)

$$D = \frac{\lambda_A}{\rho C_A}$$

La Figure 102 compare l'évolution de la température calculée par MARTHE à différentes distances avec les évolutions calculées avec la solution analytique. Elle montre que la simulation de cet exemple est très précise.

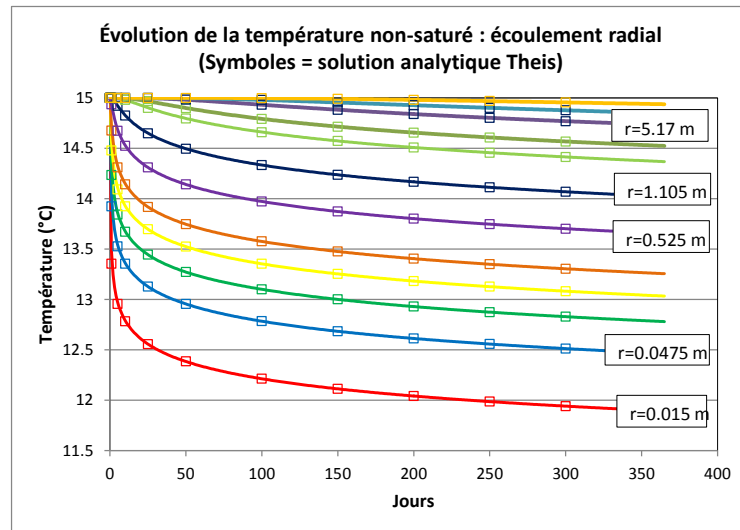


Figure 102 – Simulation avec le code de calcul MARTHE d'un pompage de chaleur dans un forage en milieu infini non-saturé. Évolution de la température à différentes distances. Comparaison avec la solution analytique (symboles).

### 29.5 Exemple n°5 : Injection d'eau chaude dans un milieu aquifère saturé (ou une fracture) compris entre 2 épontes rocheuses - régime transitoire. Hypothèses de Lauwerier (1955).

Dans une couche aquifère horizontale (ou une fracture) infinie, saturée en eau, d'épaisseur  $b$ , à température uniforme  $T_0$ , on injecte un débit d'eau à température  $T_L$ . On admet 2 hypothèses restrictives :

- Dans la fracture la chaleur est transportée uniquement par convection (advection), la conductivité thermique de l'eau et de l'aquifère dans la direction horizontale est donc supposée être nulle.
- Dans l'éponte la chaleur est transportée uniquement par conduction thermique dans la direction  $oz$  (pas dans la direction  $ox$ ).

Bien que les dimensions soient infinies, on considère un domaine fini suffisamment grand pour que l'influence de ses limites ne se fasse pas sentir.

Les caractéristiques de cet exemple, tiré de Kolditz et Shao (2010), sont les suivantes :

- $\omega_F$  = Porosité dans la fracture = 99.999 %
- $\omega_R$  = Porosité dans l'éponte =  $10^{-5}$  %
- $b$  = Épaisseur totale de la fracture sur  $oz$  =  $2 \cdot 10^{-3}$  m
- $Q_S$  = Débit d'injection par unité de surface (c'est la vitesse de Darcy «  $U$  ») =  $1 \cdot 10^{-4}$  m/s
- $T_0$  = Température initiale =  $0^\circ\text{C}$
- $T_I$  = Température de l'eau injectée =  $1^\circ\text{C}$
- $\rho_W$  = Masse volumique de l'eau =  $1000 \text{ kg/m}^3$
- $C_W$  = Capacité thermique de l'eau =  $4000 \text{ J/kg/K}$
- $\rho C_M$  = Capacité thermique volumique du minéral =  $2.5 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3/\text{K}$
- $\lambda_M$  = Conductivité thermique du minéral de l'éponte =  $1 \text{ W/m/K}$
- $\alpha_L$  = Dispersivité thermique longitudinale =  $0 \text{ m}$
- Largeur sur  $ox$  du domaine modélisé =  $40 \text{ m}$

- Hauteur verticale sur oz de chaque éponte modélisée = 32 m
- Épaisseur de la tranche sur oy = 1 m

De ces données on déduit :

- $\rho C_W = \rho_W \cdot C_W$  = Capacité thermique volumique de l'eau =  $4 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3/\text{K}$
- $\rho C_F = \omega_F \cdot \rho C_W + (1 - \omega_F) \cdot \rho C_M$  (Capac. thermique fracture) =  $4 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3/\text{K}$
- $\rho C_R = \omega_R \cdot \rho C_W + (1 - \omega_R) \cdot \rho C_M$  (Capac. thermique éponte) =  $2.5 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3/\text{K}$
- $\lambda_R = \omega_R \cdot \lambda_W + (1 - \omega_R) \cdot \lambda_M$  =  $1 \text{ W/m/K}$

On en déduit, pour comparaison avec une modélisation de transport de masse :

- $D_{th}$  = Coefficient de diffusion thermique dans l'éponte =  $4 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$
- $Pe$  = Nombre de Péclet numérique = 0.25

Le domaine étant symétrique, on modélise uniquement la moitié supérieure du domaine, c'est-à-dire la demi-épaisseur de la fracture et l'éponte supérieure de 40 m de hauteur. La section de la ½ fracture est donc égale à  $1 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$  d'où un débit injecté dans la demi-fracture égal à  $1 \cdot 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$ .

Le maillage 2D est constitué de 75 colonnes et 49 lignes. Les colonnes varient de 0.001 m près de la limite de gauche à 0.5 m. Les lignes varient de 0.001 m (largeur de la fracture) à 1 m. L'écoulement est modélisé pendant une période totale de  $5 \cdot 10^8$  secondes (15.84 ans) découpée en 5000 pas de temps de  $10^5$  secondes (1.157 jour).

Le nombre de Péclet numérique varie de 0.25 sur la limite amont à  $5 \cdot 10^{-4}$  sur la plus grande partie de la fracture. Le nombre de Courant numérique dans la fracture varie de  $10^4$  sur la limite amont à 20 sur la plus grande partie de la fracture.

Dans MARTHE, il n'est pas possible d de prendre en compte les hypothèses de Lauwerier qui sont théoriques, c'est-à-dire d'annuler la conduction dans direction ox, en la conservant dans la direction oy. Pour simuler cet exemple théorique, on a donc utilisé une version spéciale du code dans laquelle on a annulé la conduction sur ox.

La solution analytique de Lauwerier (1955) peut être exprimée de plusieurs manières :

On note :

$$U_W = \text{Flux injecté (m/s)}$$

$$d = b / 2 = \frac{1}{2} \text{ épaisseur de la fracture}$$

$$x_d = \frac{\lambda_R \cdot x}{\rho C_W \cdot U_W \cdot d^2} \quad \text{Abscisse adimensionnelle}$$

$$y_d = \frac{y}{d} \quad \text{Ordonnée adimensionnelle (sur oz)}$$

$$t_d = \frac{\lambda_R \cdot t}{\rho C_F \cdot d^2} \quad \text{Temps adimensionnel}$$

$$T_d = \frac{T - T_0}{T_I - T_0} \quad \text{Température adimensionnelle}$$

$$\phi = \frac{\rho C_F}{\rho C_R}$$



La solution s'écrit alors :

$$\text{Si } t_d < x_d \quad T_d = 0$$

$$\text{Si } t_d > x_d \quad T_d = \operatorname{erfc} \left[ \frac{x_d + \max(y_d - 1, 0)}{2\sqrt{\phi \cdot (t_d - x_d)}} \right]$$

En particulier dans la fracture ( $y_d < 1$ ) :

$$T_d = \operatorname{erfc} \left[ \frac{x_d}{2\sqrt{\phi \cdot (t_d - x_d)}} \right]$$

En radial, on obtient la même formule en remplaçant  $x_d$  par  $r_d$ , le rayon adimensionnel défini par :

$$r_d = \frac{\lambda_R \cdot \pi \cdot r^2}{\rho C_W \cdot Q_{Wtot} \cdot d} \quad \text{Rayon adimensionnel.}$$

Avec  $Q_w$  = débit total injecté ( $\text{m}^3/\text{s}$ )

Une autre formulation, donnée par Kolditz et Shao (2010), avec d'autres nombres adimensionnels est :

$$x_{d2} = \frac{x}{2d} \quad \text{Abscisse adimensionnelle.}$$

$$y_{d2} = \frac{y}{2d} \quad \text{Ordonnée adimensionnelle (sur oz).}$$

$$t_{d2} = \frac{u_x \cdot t}{2d} \quad \text{Temps adimensionnel.}$$

$$\alpha = \frac{\lambda_R}{\rho C_F} \cdot \frac{1}{2d \cdot u_x}$$

$$\beta = \frac{\lambda_R}{\rho C_W} \cdot \frac{1}{2d \cdot u_x}$$

Cette deuxième formulation s'écrit alors :

$$T_d = \operatorname{erfc} \left\{ \frac{\beta}{\sqrt{\alpha \cdot (t_{d2} - x_{d2})}} \cdot \left[ x_{d2} + \frac{1}{2\beta} \cdot \left( y_{d2} - \frac{1}{2} \right) \right] \right\}$$

La Figure 103 et la Figure 104 comparent les profils de température calculée par MARTHE à 4 dates avec les profils de la solution analytique. Elles montrent que la simulation de cet exemple est exacte.

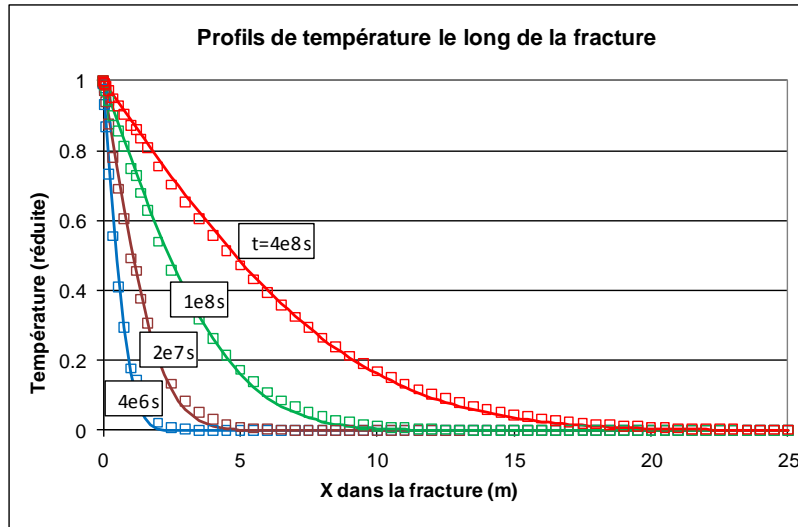


Figure 103 – Simulation avec le code de calcul MARTHE d'une injection d'eau chaude dans une fracture (hypothèses de Lauwerier). Profils de température le long de la fracture après  $4 \cdot 10^6$  s (46.3 j),  $2 \cdot 10^7$  s (231.5 j),  $10^8$  s (3.17 ans) et  $4 \cdot 10^8$  s (12.68 ans). Comparaison avec la solution analytique (trait continu).

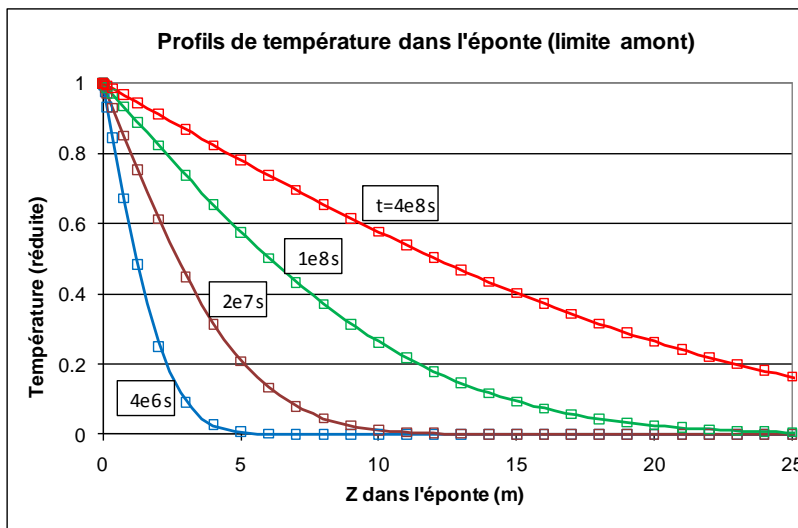


Figure 104 – Simulation avec le code de calcul MARTHE d'une injection d'eau chaude dans une fracture (hypothèses de Lauwerier). Profils de température dans l'éponte, en  $x=0$ , après  $4 \cdot 10^6$  s (46.3 j),  $2 \cdot 10^7$  s (231.5 j),  $10^8$  s (3.17 ans) et  $4 \cdot 10^8$  s (12.68 ans). Comparaison avec la solution analytique (trait continu).

## 29.6 Exemple n°6 : Injection d'eau chaude dans un forage

Les caractéristiques de cet exemple tiré de la littérature (Updegraff 1989) sont les suivantes :

Injection d'eau à  $160^\circ\text{C}$  par un forage, dans un aquifère initialement à  $170^\circ\text{C}$ .

- $\omega$  = Porosité = 0.20
- $b$  = Épaisseur aquifère = 100 m
- $Q$  = Débit d'injection =  $11.047 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$   
= 10 kg/s
- $T_A$  = Température aquifère initiale =  $170^\circ\text{C}$
- $T_I$  = Température de l'eau injectée =  $160^\circ\text{C}$

- $\rho_W$  = Masse volumique de l'eau = 905.24 kg/m<sup>3</sup>
- $C_W$  = Capacité thermique de l'eau = 4336.88 J/kg/K
- $\rho C_M$  = Capacité thermique volumique du minéral = 1.7147 10<sup>6</sup> J/m<sup>3</sup>/K
- $\lambda_W$  = Conductivité thermique de l'eau = 0.6 W/m/K
- $\lambda_M$  = Conductivité thermique du minéral  
de la matrice poreuse = 20 W/m/K  
(*Cette valeur de 20 W/m/K est peu réaliste puisque en pratique, suivant le matériau, elle est généralement de l'ordre de 1 à 2.5 W/m/K*)
- $\alpha_L$  = Dispersivité thermique longitudinale = 0 m

De ces données on déduit :

- $\rho C_W = \rho_W \cdot C_W$  = Capacité thermique volumique de l'eau = 3.9259 10<sup>6</sup> J/m<sup>3</sup>/K
- $\rho C_A = \omega \cdot \rho C_W + (1 - \omega) \cdot \rho C_M$  = 2.15694 10<sup>6</sup> J/m<sup>3</sup>/K
- $\lambda_A = \omega \cdot \lambda_W + (1 - \omega) \cdot \lambda_M$  = 16.12 W/m/K

On en déduit, pour comparaison avec une modélisation de transport de masse :

- $D_{th}$  = Coefficient de diffusion thermique = 7.4735 10<sup>-6</sup> m<sup>2</sup>/s
- $\omega_{th}$  = Porosité thermique (équivalente) = 0.54941

### 29.6.1 Modélisation en coordonnées radiales

L'écoulement est modélisé en 1D radial avec le code de calcul MARTHE.

Un rayon total de 1000 mètres est discrétisé en 127 mailles (couronnes cylindriques) de rayon croissant de 10<sup>-4</sup> m à 68 m avec une raison géométrique de 1.07. L'écoulement a été simulé avec 160 pas de temps de 0.2 ans pendant 32.69 ans, soit 10<sup>9</sup> secondes. Une [solution analytique de Avdonin](#) (1964), décrite par Updegraff (1989), correspond à une telle injection en radial, en négligeant :

- Les variations de densité et de viscosité avec la température,
- La conduction des épontes (épontes adiabatiques),
- La dispersivité thermique, donc à diffusion thermique uniforme.

La Figure 105 montre le profil de température calculé après 10<sup>9</sup> secondes (32.69 ans). Pour cette durée de 10<sup>9</sup> secondes, la distance caractéristique  $x_D$  est égale à 172.9 m. Les valeurs simulées sont extrêmement proches de la solution analytique.

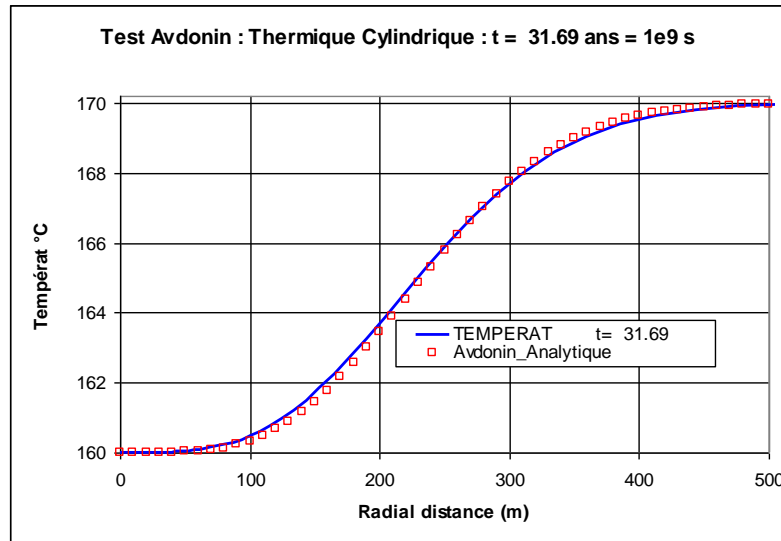


Figure 105 – Simulation avec le code de calcul MARTHE d’une injection d’eau à 160°C dans un forage implanté dans un aquifère initialement à 170°C. Profil de température après  $10^9$  secondes. Comparaison avec la solution analytique d’Avdonin (1964).

Pour ce calcul, le nombre de Péclet numérique moyen est égal à 0.509, et le nombre de Courant numérique moyen est égal à  $3.2 \cdot 10^8$  (avec une valeur maximale de  $4 \cdot 10^{10}$  dans la maille d’injection).

On a également calculé l’évolution de la température au cours du temps à la distance 37.37 m. Pour cette distance de 37.37 m, le temps caractéristique  $t_D$  est égal à  $4.67 \cdot 10^7$  s, soit 1.48 an. Pour obtenir une simulation plus précise à cette petite distance du rayon d’injection, où les vitesses sont très grandes, on a utilisé des pas de temps 10 fois plus fins (0.02 ans) pendant les 2 premières années. La Figure 106 montre que les valeurs simulées sont très proches de la [solution analytique d’Avdonin](#).

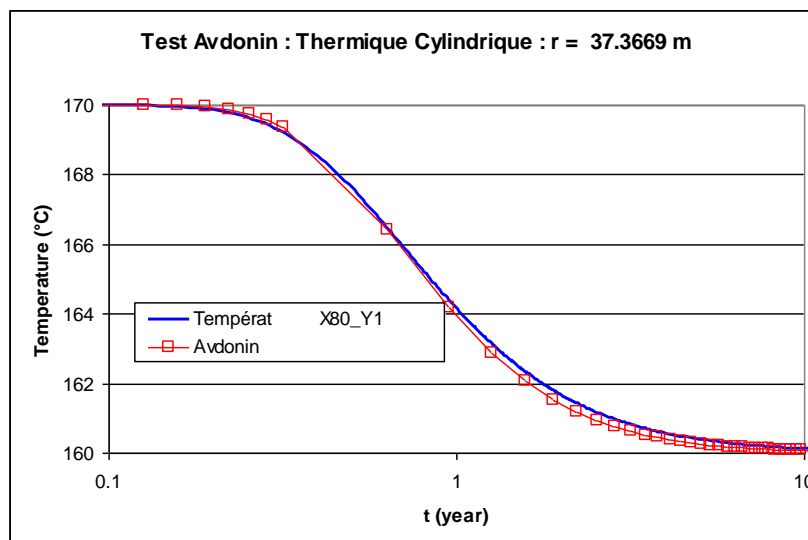


Figure 106 – Simulation avec le code de calcul MARTHE d’une injection d’eau à 160°C dans un forage implanté dans un aquifère initialement à 170°C. Évolution de la température à 37.37 m de distance. Comparaison avec la solution analytique d’Avdonin (1964).

À titre de vérification un calcul identique de transfert de masse a été réalisé avec les paramètres suivants :

- $D$  = Coefficient de diffusion =  $D_{th} = 7.4735 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ .
- $\omega$  = Porosité =  $\omega_{th} = 0.54941$

Les résultats obtenus sont exactement les mêmes ce qui conforte les calculs de transfert thermique.

### 29.6.2 Écoulement uniforme 1D cartésien

Un écoulement uniforme 1D a également été modélisé avec le code de calcul MARTHE, avec les mêmes paramètres (même débit de  $11.047 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$ , même porosité de 0.20).

Une longueur totale de 40 mètres sur l'axe  $ox$  est discrétisée en 400 mailles égales de longueur  $dx = 0.1 \text{ m}$ , et de largeur  $dy = 1 \text{ m}$ . Compte tenu de l'épaisseur de 100 m, la section est égale à  $100 \text{ m}^2$ . La vitesse de Darcy est donc égale à  $11.047 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$  et la vitesse réelle à  $55.235 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$ . La vitesse thermique est égale à  $20.107 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$ . Le coefficient de retard thermique est égal à 2.747. L'écoulement a été simulé avec 370 pas de temps de 0.1 heure (360 secondes) pendant 36.111 heures, soit  $1.3 \cdot 10^5$  secondes. Compte tenu de la vitesse thermique, la distance parcourue par le front thermique est égale à 26.1 m. Une [solution analytique décrite par Coats et Smith](#) (1964) correspond à un tel écoulement 1D, en négligeant les variations de densité et de viscosité avec la température, et en négligeant la conduction des épontes (épontes adiabatiques). Compte tenu de la valeur du nombre de Péclet numérique, égal à 2.69, on a utilisé la méthode de transport TVD du code de calcul MARTHE. La Figure 107 montre le profil de température calculé après  $1.3 \cdot 10^5$  secondes (36.111 heures). Les valeurs simulées sont extrêmement proches de la solution analytique et ne présentent pas de dispersion numérique.

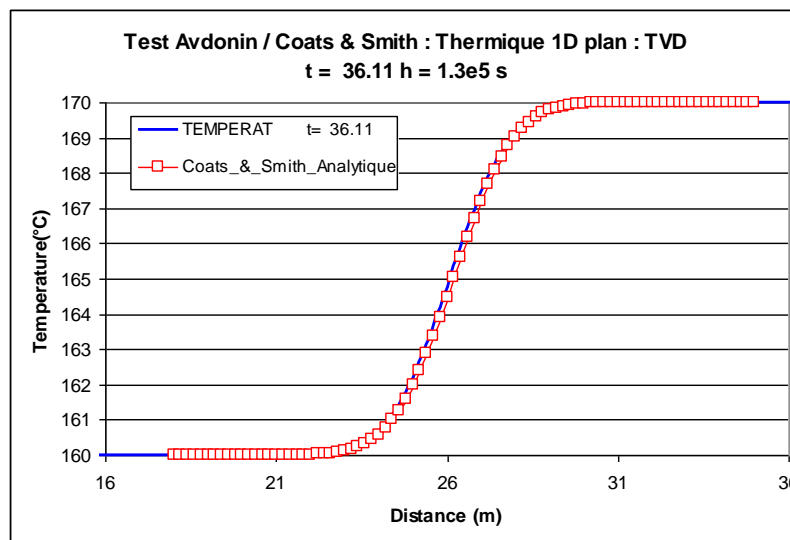


Figure 107 – Simulation avec le code de calcul MARTHE d'une injection d'eau à  $160^\circ\text{C}$  en 1D dans un aquifère initialement à  $170^\circ\text{C}$ . Profil de température après  $1.3 \cdot 10^5$  secondes. Comparaison avec la solution analytique de Coats et Smith (1964).

Pour ce calcul, le nombre de Péclet numérique est égal à 2.69, et le nombre de Courant numérique est égal à 0.724.

On a également calculé l'évolution de la température au cours du temps à la distance 20 m (soit un temps de 27.6 heures pour le front thermique). La Figure 108 montre que les valeurs simulées sont extrêmement proches de la [solution analytique de Coats et Smith](#) (1964).

Un autre calcul a été réalisé avec un maillage deux fois plus grossier (mailles de 0.2 m de longueur), et un pas de temps plus grossier, de 0.2 heure. Le nombre de Péclet numérique est alors égal à 5.38, et le nombre de Courant numérique est égal à 0.724. La Figure 109 montre que malgré le grand nombre de Péclet, la simulation est très précise.

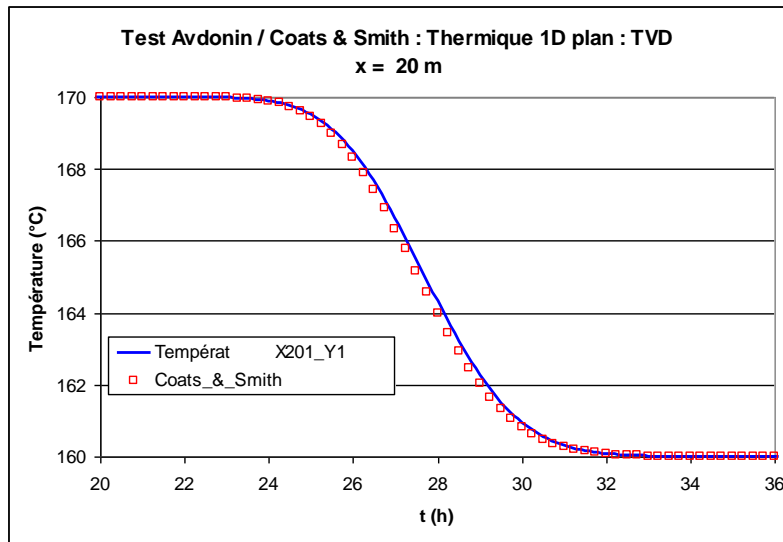


Figure 108 – Simulation avec le code de calcul MARTHE d'une injection d'eau à 160°C en 1D dans un aquifère initialement à 170°C. Évolution de la température à 20 m de distance. Comparaison avec la solution analytique de Coats et Smith (1964).

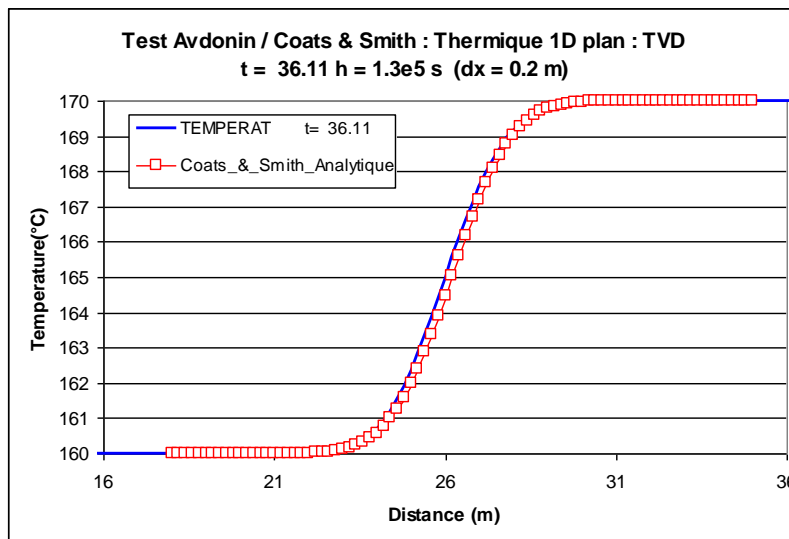


Figure 109 – Simulation avec le code de calcul MARTHE d'une injection d'eau à 160°C en 1D dans un aquifère initialement à 170°C. Profil de température après  $1.3 \cdot 10^5$  secondes. Maillage grossier (nombre de Péclet = 5.38). Comparaison avec la solution analytique de Coats et Smith (1964).

## 29.7 Exemple n°7 : Simulation d'un doublet géothermique

### 29.7.1 Description de l'exemple

Un aquifère profond de 100 m d'épaisseur et de grande extension latérale a une température initiale égale à 72 °C. Dans cet aquifère on réalise un doublet thermique avec deux forages séparés de 500 m de distance latérale. Le puits de production pompe à un débit de 50 m<sup>3</sup>/h l'eau à 72°C. Une fois la chaleur extraite, l'eau est réinjectée, au même débit, à la température de 12 °C dans le deuxième puits. Une bulle d'eau froide se forme et le but du calcul est de prévoir la diminution de température au puits de production quand la bulle d'eau froide à 12 °C se rapprochera de ce puits. La couche aquifère est comprise entre une éponte supérieure et une éponte inférieure de grandes épaisseurs. Pour la modélisation on considère que le puits de réinjection est situé à 500 m à l'Est du puits de production. On remarque que le domaine présente d'une part une symétrie par rapport à la ligne Ouest-Est passant par les deux forages, et d'autre part une symétrie par rapport au plan horizontal médian situé à mi-hauteur de l'aquifère. Il suffira donc de modéliser uniquement ¼ du domaine, par exemple la partie sud située en dessous du plan médian, avec l'éponte inférieure.

Les caractéristiques du système sont les suivantes :

#### Paramètres hydrodynamiques et hydrodispersifs :

- Perméabilité de l'aquifère :  $K = 2 \cdot 10^{-4}$  m/s (à 72°C)
- Perméabilité de l'éponte :  $K = 1 \cdot 10^{-15}$  m/s (c'est-à-dire quasiment imperméable, mais faisant partie du domaine de calcul thermique)
- Porosité :  $\omega = 15$  % dans l'aquifère, 0.01 % dans l'éponte
- Diffusion :  $D = 0$  m<sup>2</sup>/s
- Dispersivité longitudinale :  $\alpha_L = 10$  m (dispersivité transversale = 0)
- Débit de pompage et de réinjection = 50 m<sup>3</sup>/h (soit 12.5 m<sup>3</sup>/h dans le ¼ du domaine modélisé)

#### Paramètres thermiques :

- Conductivité thermique de la matrice poreuse :  $\lambda = 2.5$  W/m/°C
- Chaleur spécifique des terrains =  $2.2 \cdot 10^6$  J/m<sup>3</sup>/°C dans l'aquifère,  $2.1 \cdot 10^6$  J/m<sup>3</sup>/°C dans les épontes.
- Température initiale = Température extérieure au domaine = 72°C

#### Conditions aux limites :

- Limite nord : Imperméable par raison de symétrie.
- Limite sud : Imperméable car située loin de la perturbation due au doublet.

- Limites ouest et est : Charge hydraulique imposée. Ces limites sont situées loin de la perturbation due au doublet.
- Température extérieure sur les limites ouest et est = 72°C

#### État initial :

- Température = 72°C partout, y compris dans les épontes.
- Hydrodynamique : Charge hydraulique uniforme = 100 m NGF partout (juste pour assurer que la nappe est captive).

#### Maillage :


On adopte un maillage irrégulier avec des mailles de 20 mètres de côté dans la zone du doublet, des mailles de 50 mètres dans la zone périphérique et des mailles plus grandes pour atteindre les limites éloignées.

On a choisi un maillage s'étendant de -1810 m à + 1810 m dans la direction ouest-est et s'étendant de -1200 m à 0 m dans la direction sud-nord.

Le maillage est formé de :

- 76 colonnes de dimensions : 600 m, 250 m, 8 fois 50 m, 28 fois 20 m, puis à nouveau 28 fois 20 m, 8 fois 50 m, 250 m et 600 m.
- 35 lignes (à partir du Nord) : 30 fois 20 m, 3 fois 50 m, 150 m, 300 m.
- 6 couches : une couche aquifère de 50 m (de ½ épaisseur) et 5 couches d'épontes, situées sous l'aquifère, d'épaisseurs respectivement : 25 m, 25 m, 25 m, 25 m et 50 m.

On a donc choisi une « topographie » à l'altitude 0 m, et les substratums des 6 couches respectivement aux altitudes : -50 m, -75 m, -100 m, -125 m, -150 m, -200 m. L'épaisseur totale d'éponte est donc égale à 150 mètres.

Pour créer un maillage irrégulier on peut procéder comme suit : on clique sur l'icône  ou bien on sélectionne **Fichier** → **Nouveau**. On donne alors un nom de fichier pour le projet à créer et on précise le nombre de couches. On coche alors « maillage irrégulier » dans le cadre « divers » avant de valider par le bouton « OK ». Des menus apparaissent alors pour définir les coordonnées de l'origine et les largeurs des lignes et des colonnes.

L'hydrodynamique est supposée en régime permanent, car l'aquifère est captif. Les calculs de transfert thermique sont réalisés en régime transitoire pendant 35 ans avec un pas de temps de 2.5 ans. Pour calculer l'hydrodynamique en régime permanent (au pas de temps n° zéro) on fixe un nombre maximal d'itérations externes égal à 2 et un nombre maximal d'itérations internes égal à 300.

On néglige l'influence des variations de la température sur la viscosité et donc sur la perméabilité.



**Paragraphe « Contrôle de la Résolution Hydrodynamique »**

**0** = Nombre maxi d'itérations par pas de temps calcul suivant le pas n°0  
**2** = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)  
**2e-6** = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour Convergence  
**300** = Nombre d'itérations internes pour le solveur [Déf=10]  
**Perman** = Régime Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]

**Paragraphe : « Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité » :**

**0** = Nombre maximal d'itérations pour \*Couplage\* Densité/Pression  
**0** = Nombre maxi d'itérat \*Transport\* Salinité/Chaleur/Concentr. [Déf=20]  
**TVD** = Schéma de Transport [0=D\_Finies ; 1=Random\_W ; 2=Caract=MOC ; 3=TVD]

**Paragraphe : « Température , effets Thermiques » :**

**5e-4** = Variation moyenne de Température entre 2 itérations pour convergence  
**Transit** = Régime Transfert Thermique [0=Transitoire ; 1=Permanent]  
**2.5** = Conductivité Therm. du minéral (W/m/deg) [Déf=1.5] [\* = Spatialisée]  
**10** = Dispersivité Thermique Longitudinale (m) [\* = Spatialisée]  
**0** = Dispersivité Thermique Transversale (m) [\* = Spatialisée]  
**0** = Capacité thermique de l'Eau (J/kg/deg.) [Déf=4185]  
**\*** = Capacité thermique Volum. Minéral (J/m3/deg) [Déf=2e6] [\* = Spatialisée]  
**0** = Conductivité Thermique de l'Eau (W/m/deg) [Déf=0.6]  
**1** = Calcul du champ de Température (Transferts thermiques) [0=Non ; 1=Oui]

On crée également un fichier de « Pas de temps » avec 14 pas de temps de 2.5 ans.

**Pompages :**

On choisit une unité de débit en « m3/h ». On introduit alors les valeurs dans le paragraphe « Initialisation avant calculs »

Pour le puits de production, on introduit alors un débit de -12.5 dans la maille : colonne = 26, ligne = 1, couche = 1.

Pour le puits d'injection, on introduit un débit de +12.5 dans la maille : colonne = 51, ligne = 1, couche = 1.

Dans ce puits d'injection on fixe une « Température extérieure » égale à 12 (°C).

/DEBIT/MAILLE	C=	26L=	1P=	1V=	<b>-12.5;</b>
/DEBIT/MAILLE	C=	51L=	1P=	1V=	<b>12.5;</b>
/TEMPER_EXT/MAILLE	C=	51L=	1P=	1V=	<b>12;</b>

**29.7.2 Résultats de la simulation**

Les calculs se terminent en quelques minutes.

La Figure 110 présente une vue en plan de la température dans l'aquifère après 17.5 ans et après 35 ans. Les forages de pompage et de réinjection sont marqués par un petit carré rouge. On voit nettement une bulle froide (bleue) se développer vers la gauche et commencer à refroidir le puits de pompage après 35 ans. La Figure 111 montre une vue en coupe verticale de la température dans l'axe des puits après 35 ans à travers l'aquifère et les 150 mètres d'éponte inférieure. Cette figure montre le net refroidissement des épontes qui jouent un rôle de tampon.

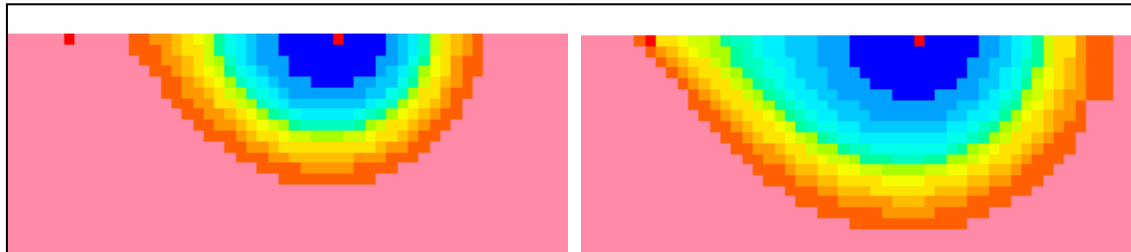


Figure 110 – Vue en plan de la température dans l'aquifère après 17.5 et 35 ans.

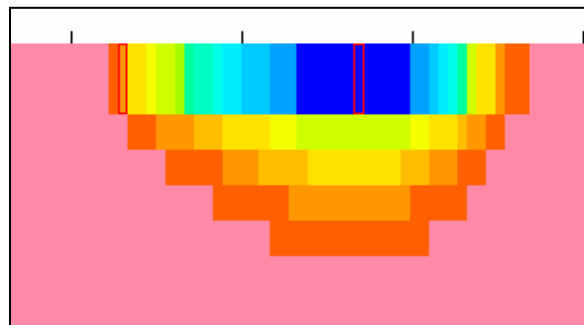


Figure 111 – Vue en coupe verticale de la température dans l'aquifère et les épontes après 35 ans.

On a également réalisé un calcul en négligeant la conduction des épontes, c'est-à-dire en considérant qu'elles sont adiabatiques. Dans ce cas le refroidissement est beaucoup plus rapide (Figure 112)

Un autre calcul a été réalisé en supposant un faible écoulement régional vers l'Est (vers la droite). On a supposé que le gradient de charge hydraulique était égal à 0.25 ‰ ( $2.5 \cdot 10^{-4}$ ). Dans ce but on a imposé une surcharge de 0.755 m au centre de toutes les mailles de la colonne n°1, située à 3020 m à l'Ouest du centre de la colonne la plus à l'Est. La Figure 112 montre que, bien que le gradient soit très faible, le refroidissement est alors significativement plus long.

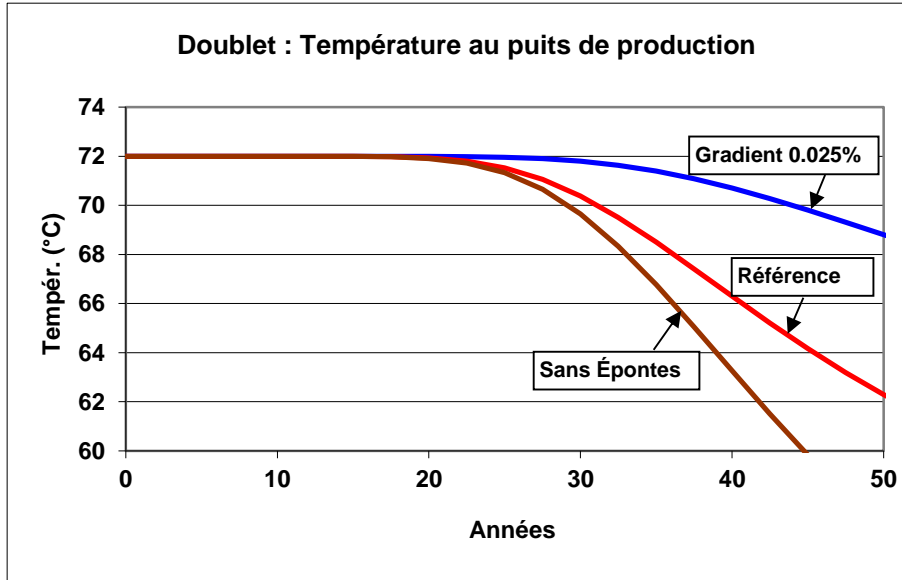


Figure 112 – Évolution de la température au puits de pompage (avec et sans prise en compte des épontes, avec et sans écoulement régional).

### 29.7.3 Simulation avec prise en compte des épontes par la méthode approchée de Vinsome

Dans le cas d'épontes thermiques homogènes de très grandes épaisseurs, le code de calcul MARTHE permet d'utiliser la méthode de Vinsome et Westerveld (1980) pour réaliser beaucoup plus rapidement les calculs. Cette méthode utilise une solution analytique approchée dans les épontes thermiques en supposant une épaisseur infinie. Elle fait intervenir une seule couche d'éponte de chaque côté de l'aquifère.

Pour utiliser cette méthode, accessible avec un « profil d'utilisation avancée », on utilise le même maillage horizontal, mais avec uniquement deux couches :

- La couche aquifère de 50 m (de ½ épaisseur).
- Une couche d'éponte analytique, de 10 m d'épaisseur, située sous l'aquifère.

Les substratums des deux couches sont donc respectivement aux altitudes -50 m et -60 m.

Les modifications à apporter sont :

#### Paragraphe : « Température , effets Thermiques » :

`1` = Épontes thermiques simulées par une solution analytique (Vinsome)  
ou bien, plus lisiblement :  
**Vinsome** = Épontes thermiques simulées par une solution analytique (Vinsome)

Il faut aussi donner un indice d'éponte thermique égal à 1 dans la couche n°2. Ceci peut être fait en sélectionnant le champ « Indice d'éponte thermique (solution analytique) », par exemple dans le paragraphe « Initialisation avant calculs » du fichier des « Paramètres généraux ». (Figure 113).

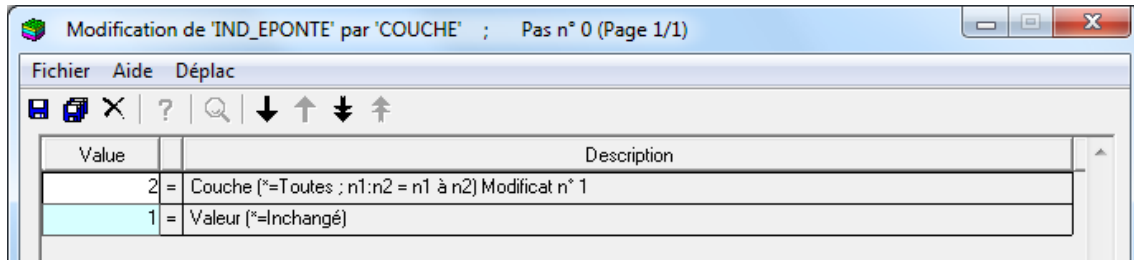


Figure 113 – Définition d'un « indice d'éponte thermique analytique » dans la couche n°2.

Dans le paragraphe « Initialisation avant calculs », on obtient alors la ligne suivante :

/IND_EPONTE/COUCHE	C=	2V=	1;
--------------------	----	-----	----

On lance alors les calculs qui sont 4 fois plus rapides et utilisent nettement moins de mémoire. La Figure 114 montre que les résultats obtenus sont quasiment identiques.

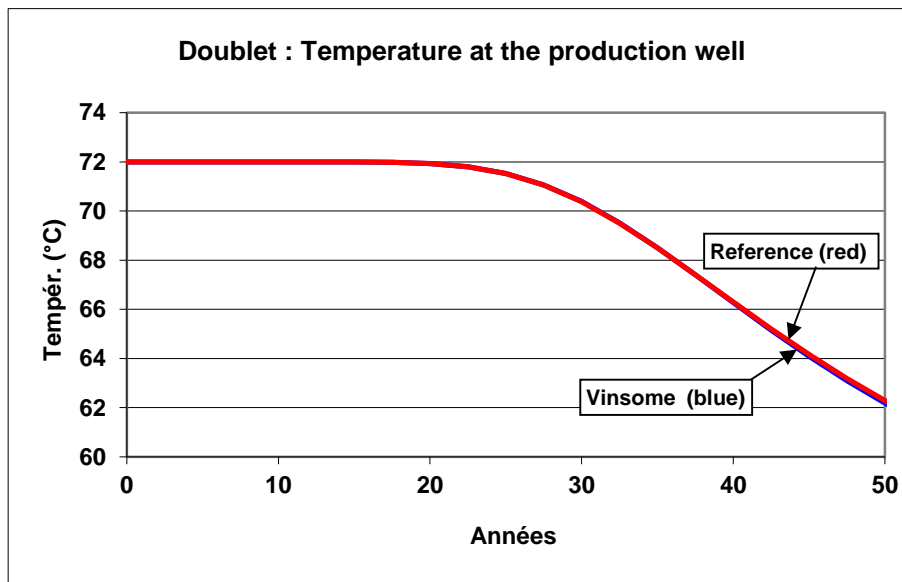



Figure 114 – Évolution de la température au puits de pompage : comparaison de la méthode approchée de Vinsome avec le calcul de référence avec 6 couches d'épentes thermiques.

#### 29.7.4 Asservissement de la température d'injection à la température d'un puits de production

La température d'un puits de réinjection peut être asservie à la température d'un puits de production. En effet, dans le cas d'une pompe à chaleur ou d'un réseau de distribution, la température de l'eau réinjectée est égale à la température de l'eau pompée diminuée d'une constante. La température des puits de production peut évoluer au cours du calcul, elle n'est donc pas connue *a priori*. Il est cependant possible, en régime transitoire, d'asservir la température d'un puits d'injection à la température d'un puits de production, c'est-à-dire d'un puits de pompage.

Pour définir un asservissement de température, on procède de la manière suivante : On appuie sur l'icône , pour arriver au menu des paramètres non maillés. On sélectionne alors « Température pompage => injection ». (Figure 115).

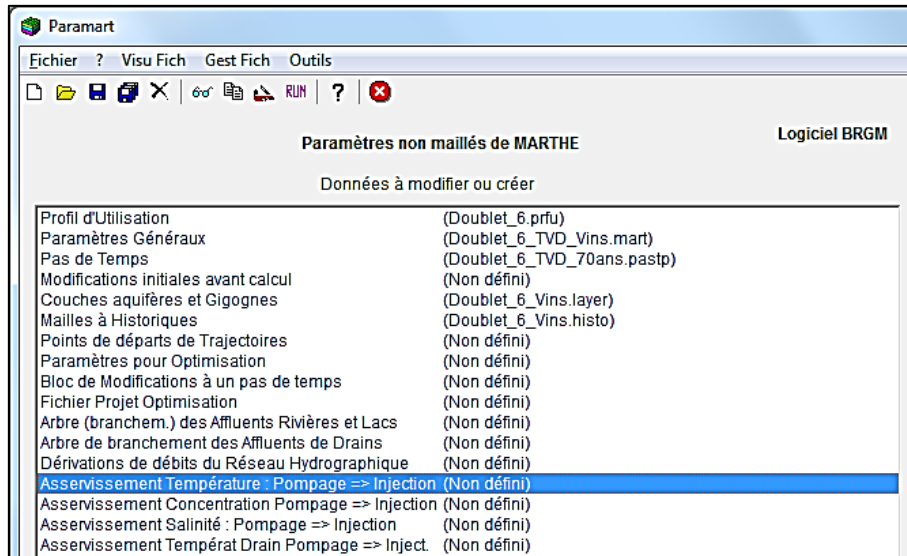


Figure 115 – Création d'un fichier d'asservissements de température.

On clique sur « Préprocesseur » puis « Créer un nouveau fichier « Asservis. Température injection ». On définit alors, Figure 116, les numéros de (colonne, ligne, couche, gigogne) du puits de production (ici colonne n°26, ligne n°1, couche n°1), puis les numéros de (colonne, ligne, couche, gigogne) du puits d'injection (ici colonne n°51, ligne n°1, couche n°1), et enfin la différence de température, ici  $-50^{\circ}\text{C}$ , c'est-à-dire une injection à une température  $50^{\circ}\text{C}$  plus basse que la température du puits de production.

Col_Pro	Lig_Pro	Couch_Pro	Gig_Pro	Col_Inj	Lig_Inj	Couch_Inj	Gig_Inj	Dif_Temp
26	1	1	0	51	1	1	0	-50

Figure 116 – Définition d'asservissements de température entre un puits de production et un puits d'injection.

On sauvegarde alors ce fichier sous le nom « Doublet\_50.t\_reinj ». Le nom de ce fichier sera automatiquement introduit dans le fichier projet. Il n'y a pas d'autre modification à effectuer.

La Figure 117 montre l'évolution de la température au puits de production qui diminue de  $72^{\circ}\text{C}$  au début à  $54^{\circ}\text{C}$  après 100 ans. La température d'injection passe donc de  $72^{\circ}\text{C} - 50^{\circ}\text{C} = 22^{\circ}\text{C}$  au début, à  $4^{\circ}\text{C}$  après 100 ans.

La Figure 118 montre la comparaison de la simulation de référence avec une température d'injection constante de  $72^{\circ}\text{C} - 50 = 22^{\circ}\text{C}$ , avec la simulation avec asservissement. Il apparaît qu'à partir de 60 ans la température obtenue avec la simulation avec asservissement est plus basse. L'écart est de  $2.2^{\circ}\text{C}$  après 100 ans.

À certains pas de temps de modèle, il est également possible de modifier les paramètres de l'asservissement, généralement l'écart de température. On crée alors un autre fichier d'asservissement, par exemple « Asserviss\_apres\_40\_ans.t\_reinj » (non représenté ici). On demande alors une modification de l'objet « TEMPER\_RE-INJ » par « FICHER ». Le nouveau fichier d'asservissement remplace alors l'éventuel fichier d'asservissement existant.

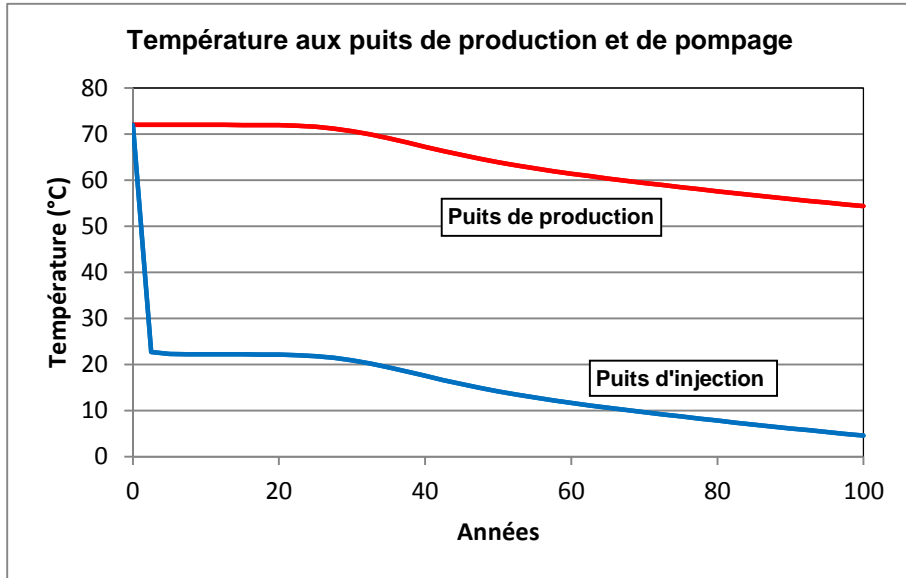


Figure 117 – Asservissements de température : évolution de la température de production et d'injection.

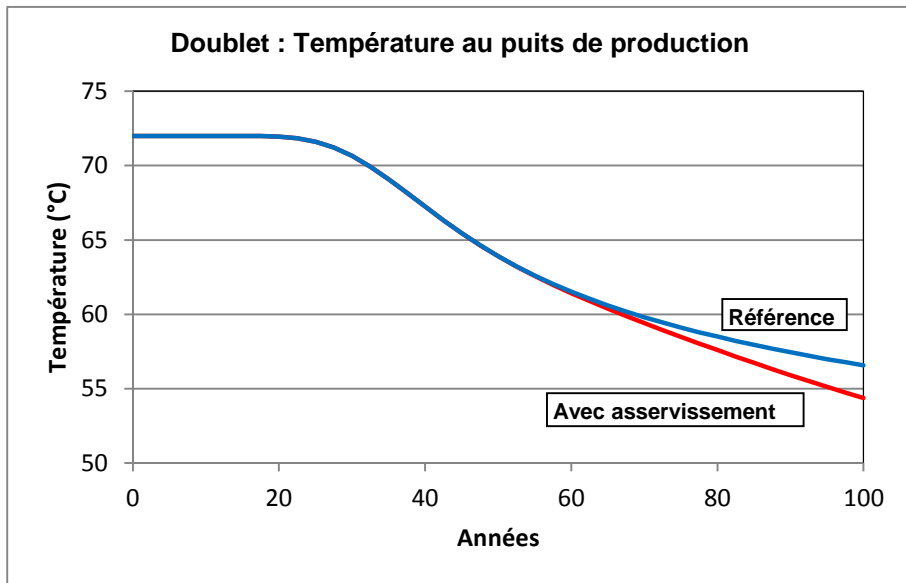


Figure 118 – Mise en évidence de l'influence de l'asservissement de la température d'injection.

## 29.8 Exemple n°8 : Effet de la densité : Injection de chaleur au substratum d'un aquifère en équilibre hydrostatique

Cet exemple montre comment prendre en compte l'influence de la température de l'eau sur sa masse volumique, et donc sur son écoulement. Il présente un écoulement avec couplage entre le calcul de l'hydraulique (charge hydraulique, débit, vitesse) et le calcul de transfert thermique.

### 29.8.1 Description de l'exemple

Dans cet exemple on considère un aquifère initialement au repos. On injecte de la chaleur en un point au fond de l'aquifère. En raison de la température plus élevée, la masse volumique de l'eau est plus faible à l'emplacement de l'injection de chaleur.

On observe alors un déplacement vertical d'eau chaude jusqu'au toit de la formation où l'eau chaude s'étale. La modélisation est effectuée en coupe verticale avec prise en compte d'une loi de densité en fonction de la température. Le domaine étudié est formé d'un parallélépipède de 150 cm de large sur 100 cm de haut (avec 100 cm de tranche de coupe).

#### Maillage :

Le maillage est formé de 20 lignes de 31 colonnes soit 620 mailles carrées de 5 cm de côté. Le maillage s'étend de  $x = -77.5$  cm à  $x = +77.5$  cm, et de  $z = -100$  cm à  $z = 0$  cm. (Figure 119).

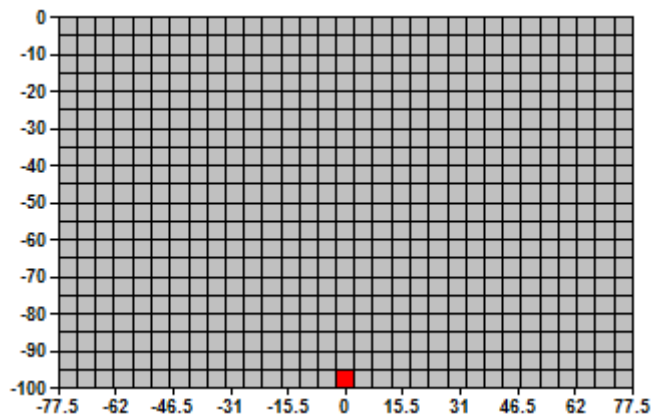


Figure 119 – Maillage avec indication du point d'injection de chaleur (en rouge).

Les caractéristiques du système sont les suivantes :

#### Paramètres hydrodynamiques et hydrodispersifs :

- Perméabilité de l'aquifère :  $K = 1$  cm/s
- Gradient horizontal de charge hydraulique :  $2 \cdot 10^{-4}$  cm sur 150 cm, soit  $1.33 \cdot 10^{-6}$ , c'est-à-dire quasi nul.  
Ce (très faible) gradient de charge hydraulique est nécessaire pour éviter des instabilités dans un système sans aucun écoulement au repos.
- Régime hydraulique : permanent.
- Porosité :  $\omega = 35$  %
- Dispersivités thermique longitudinale = 0.02 m
- Dispersivités thermique transversale = 0.004 m

- Pas de prise en compte de la variation de viscosité avec la température
- Densité de l'eau = fonction de la température : Loi de Schoeller

### Conditions aux limites :

- Limite supérieure et inférieure : Imperméables (et adiabatiques).
- Limites latérales : charge hydraulique imposée (à 0)  
Température imposée.
- Injection d'un flux de chaleur de  $2.197 \cdot 10^5$  Joules par minute dans la maille au centre de la limite inférieure (colonne n°15 de la couche n°20) de coordonnées ( $x= 0$  cm,  $z = -97.5$  cm).

### État initial :

- Charge uniforme = 0, puis un gradient :  $2 \cdot 10^{-4}$  cm de différence de charge d'Ouest en Est (150 cm) soit un débit total de  $1.333 \cdot 10^{-8}$  m<sup>3</sup>/s.
- Température uniforme = 11°C.

### Découpage du temps :

Le calcul couvre une période de 200 minutes, avec 29 pas de temps de durée croissante :

- 2 minutes : de  $t = 0$  à 20 mn.
- 5 minutes : de  $t = 20$  à 30 mn.
- 10 minutes : de  $t = 30$  à 200 mn.

Chaque pas de temps de modèle est découpé en 45 sous-pas de temps, soit 1305 pas de temps de calcul.

Pour ce calcul :

- On néglige l'influence des variations de la température sur la viscosité et donc sur la perméabilité.
- On considère que le coefficient d'emmagasinement captif étant négligeable, l'hydraulique est en régime permanent (à chaque pas de temps).
- On fixe 10 itérations de couplage entre le calcul de l'hydraulique (charge hydraulique, débit, vitesse) qui dépend de la densité et le calcul de transfert thermique qui modifie la densité.

Les paramètres à définir sont les suivants :

### Paragraphe « Pas de Temps et sous-pas de temps »

45 = Nombre de sous-pas de temps de modèle	[Déf=0 => Aucun]
--	------------------

### Paragraphe « Contrôle de la Résolution Hydrodynamique »

2 = Nombre maxi d'itérations par pas de temps calcul suivant le pas n°0
2 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)
1e-8 = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour Convergence
Perman = Régime Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]



**Paragraphe : « Unités des données » :**

**cm/s** = Unité de Perméabilité des aquifères en m/s (ou m2)  
**cm** = Unité de Charge, Altitude, Pression en m  
**minut** = Unité de Temps (des Pas de temps de modèle) (sec, min, heu, jou, moi, ann)  
**cm** = Unité de Coordonnées Horizontales en m  
**%** = Unité de Porosité = Teneur en eau en [-] ['%' si en %]

**Paragraphe : « Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs » :**

**100** = Épaisseur de la tranche de coupe (Unité de Coordonnée de maille ou degrés)  
**Vertic** = Orientation du maillage : 0=Standard ; 1=Coupe verticale : pesanteur sur Oy

**Paragraphe : « Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité » :**

**10** = Nombre maxi. d'itérat. pour \*Couplage\* **Densité**/Pression ou viscos/Températ.  
**0.8** = Coeff de Relaxat. pour Couplage Densité/Pression ou Viscosité/Température  
**0** = Nombre maxi d'itérat \*Transport\* Salinité/Chaleur/Concentr. [Déf=20]  
**TVD** = Schéma de Transport [0=D\_Finies ; 1=Random\_W ; 2=Caract=MOC ; 3=TVD]

**Paragraphe : « Température , effets Thermiques » :**

**1** = Prise en compte des effets de la Température  
**Schoeller** = Loi de Densité de l'eau = F(Températ) (0=Non ; 1=Schoeller ; etc.)  
**0** = Loi de Viscosité de l'eau = F(Température) (0=Non)  
**1e-5** = Variation moyenne de Température entre 2 itérations pour convergence  
**Transit** = Régime des Transferts Thermiques [0=Transitoire ; 1=Permanent]  
**0.02** = Dispersivité Thermique Longitudinale (m) (-1=idem que transport de Masse)  
**0.004** = Dispersivité Thermique Transversale (m) (-1=idem que transport de Masse)  
**1** = Calcul du champ de Température (Transferts thermiques) [0=Non ; 1=Oui]

**Paragraphe : Initialisation avant calculs :**

/POROSITE/GRILLE	N: =35				
/TEMPERAT/GRILLE	N: =11				
/CHARGE/GRILLE	N: =0				
/CHARGE/MAILLE	C=	1L=	1P=	*V=	1e-4;
/CHARGE/MAILLE	C=	31L=	1P=	*V=	-1e-4;
/DEBIT/MAILLE	C=	1L=	1P=	*V=	9999;
/DEBIT/MAILLE	C=	31L=	1P=	*V=	9999;
/TEMPER_EXT/MAILLE	C=	1L=	1P=	*V=	9999;
/TEMPER_EXT/MAILLE	C=	31L=	1P=	*V=	9999;
/Q_ENERGIE/MAILLE	C=	16L=	1P=	20V=	2.197E5; [Flux de chaleur]

**29.8.2 Résultats de la simulation**

Les calculs se terminent en quelques dizaines de secondes. La Figure 120 montre le champ de température après 90 mn et après 200 mn. La Figure 121 montre le champ de la masse volumique. La Figure 122 montre le champ de charge réelle et les vitesses après 90 mn.

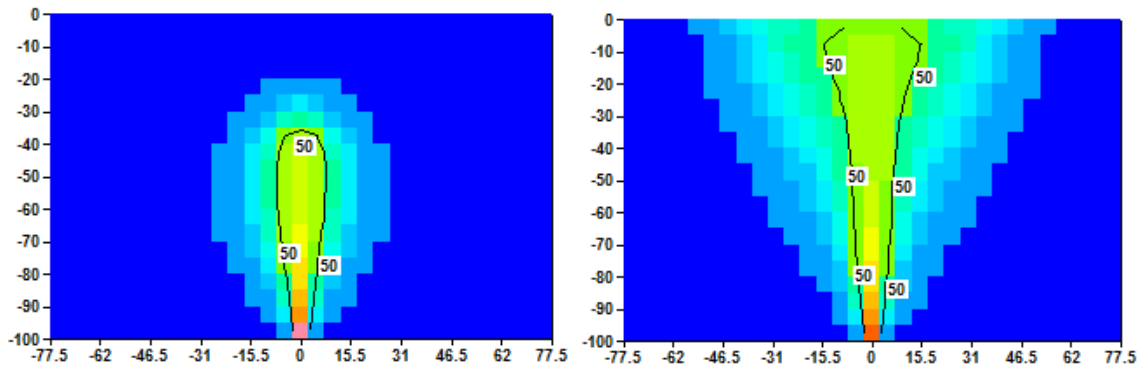


Figure 120 – Température (°C). À gauche : après 90 mn, à droite : après 200 mn.

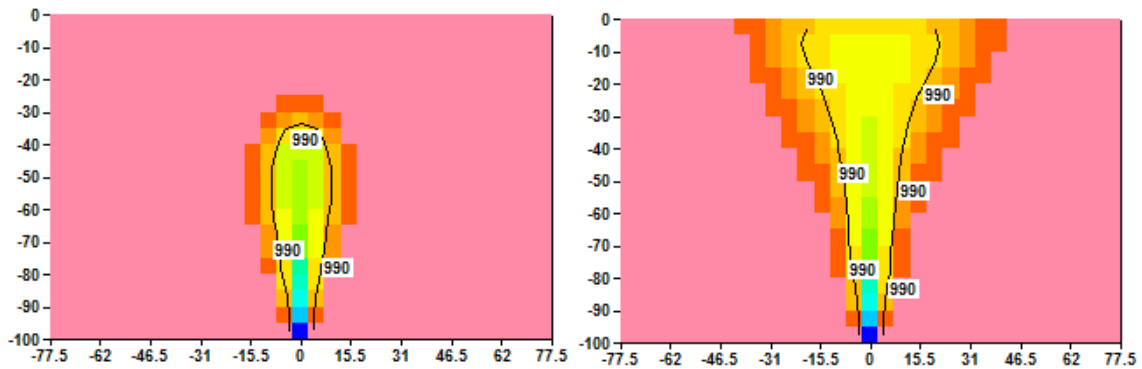


Figure 121 – Masse volumique de l'eau (kg/m<sup>3</sup>). À gauche : après 90 mn, à droite : après 200 mn.

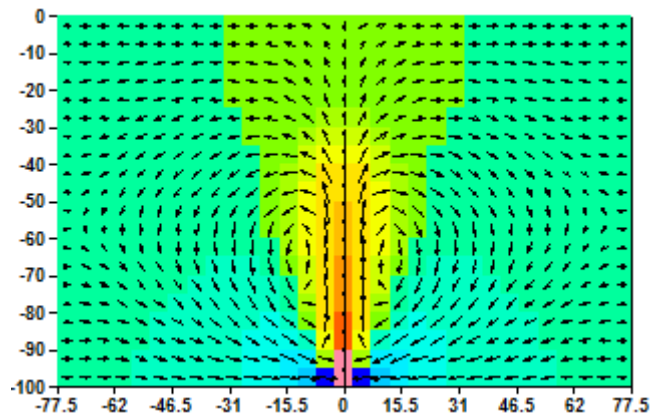


Figure 122 – Charge hydraulique et vitesses après 90 mn.

### 29.9 Exemple n°9 : Effet de la viscosité : Transfert thermique dans une colonne horizontale

Cet exemple montre comment prendre en compte l'influence de la température de l'eau sur sa viscosité, donc sur sa perméabilité. Il présente un écoulement dans une colonne horizontale

avec couplage entre le calcul de l'hydraulique (charge hydraulique, débit, vitesse) et le calcul de transfert thermique.

### 29.9.1 Description de l'exemple

Dans cet exemple on considère une colonne horizontale initialement à la température 0°C. Cette colonne est soumise à un écoulement de la gauche vers la droite. En début de calcul la température est fixée à 100 °C sur la limite amont. Au fur et à mesure que l'eau à 100°C est transportée vers la droite, la viscosité diminue, donc la perméabilité augmente. La différence de charge entre l'amont et l'aval diminue alors fortement.

Comme la viscosité diminue d'environ un facteur 6, la différence de charge diminue elle aussi d'un facteur 6.

#### Maillage :

La colonne horizontale a 101 m de longueur, et une section carrée de 1 m de côté. Le maillage est formé d'une seule ligne de 101 colonnes de mailles carrées de 1 mètre de côté, de  $x=-0.5$  m à  $+100.5$  m.

Pour définir l'altitude du toit et du substratum, on a considéré que la colonne était en coupe. La « largeur » de la ligne de mailles (de  $-0.5$  m à  $+0.5$  m) correspond donc à sa hauteur (axe des  $z$ ), et l'épaisseur de la tranche de coupe correspond à sa largeur (axe des  $y$ ) de 1 mètre.

Les caractéristiques du système sont les suivantes :

#### Paramètres hydrodynamiques et hydrodispersifs :

- Perméabilité de l'aquifère :  $K = 1$  m/J (à 0.01 °C)
- Régime hydraulique : permanent.
- Porosité :  $\omega = 10$  %
- Dispersivités thermique longitudinale et transversale = 0. m
- Pas de prise en compte de la variation de densité avec la température, puisque la colonne est horizontale.
- Viscosité de l'eau = fonction de la température : Loi « exponentielle »

#### Conditions aux limites :

- Limite de gauche :
  - Débit entrant de  $1$  m<sup>3</sup>/J
  - Température imposée à 100 °C
- Limite de droite :
  - Charge hydraulique imposée à 10 m

#### État initial :

- Charge uniforme = 10 m.
- Température uniforme = 0°C. (sauf la première maille à 100 °C)

### Découpage du temps :

Le calcul est fait sur une période de 100 jours, avec 19 pas de temps de durée croissante :

- 2 jours : de t = 0 à 20 jours.
- 5 jours : de t = 20 à 30 jours.
- 10 jours : de t = 30 à 100 jours.

Pour ce calcul :

- On néglige l'influence des variations de la température sur la densité, et donc sur la perméabilité.
- Le coefficient d'emmagasinement captif étant négligeable, on considère que l'hydraulique est en régime permanent (à chaque pas de temps).
- On fixe 5 itérations de couplage entre le calcul de l'hydraulique (charge hydraulique, débit, vitesse) qui dépend de la viscosité et le calcul de transfert thermique qui modifie la viscosité.

Les paramètres à définir sont les suivants :

### Paragraphe « Contrôle de la Résolution Hydrodynamique »

<p><b>2</b> = Nombre maxi d'itérations par pas de temps calcul suivant le pas n°0</p> <p><b>2</b> = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)</p> <p><b>5e-6</b> = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour Convergence</p> <p><b>Perman</b> = Régime Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]</p>
---

### Paragraphe : « Unités des données » :

<p><b>m/J</b> = Unité de Perméabilité des aquifères en m/s (ou m2)</p> <p><b>m3/J</b> = Unité de Débit en m3/s</p> <p><b>m</b> = Unité de Charge, Altitude, Pression en m</p> <p><b>Jour</b> = Unité de Temps (des Pas de temps de modèle) (sec, min, heu, jou, moi, ann)</p> <p><b>m</b> = Unité de Coordonnées Horizontales en m</p> <p><b>%</b> = Unité de Porosité = Teneur en eau en [-] ['%' si en %]</p>
---

### Paragraphe : « Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs » :

<p><b>1</b> = Épaisseur de la tranche de coupe (Unité de Coordonnée de maille ou degrés)</p> <p><b>Vertic</b> = Orientation du maillage : 0=Standard ; 1=Coupe verticale : pesanteur sur Oy</p>
---

### Paragraphe : « Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité » :

<p><b>5</b> = Nombre maxi. d'itérat. pour *Couplage* Densité/Pression ou <b>viscos/Températ.</b></p> <p><b>0</b> = Coeff de Relaxat. pour Couplage Densité/Pression ou Viscosité/Température</p> <p><b>0</b> = Nombre maxi d'itérat *Transport* Salinité/Chaleur/Concentr. [Déf=20]</p> <p><b>TVD</b> = Schéma de Transport [0=D_Finies ; 1=Random_W ; 2=Caract=MOC ; 3=TVD]</p>
--

**Paragraphe : « Température , effets Thermiques » :**

**1** = Prise en compte des effets de la Température

**Expon** = Loi de Viscosité de l'eau = F(Température) (0=Non)

**1e-4** = Variation moyenne de Température entre 2 itérations pour convergence

**Transit** = Régime des Transferts Thermiques [0=Transitoire ; 1=Permanent]

**1** = Calcul du champ de Température (Transferts thermiques) [0=Non ; 1=Oui]

**1e-2** = Température de référence [Viscosité, Gaz, Chimie, Dégrad.] [Déf=0 => 20°C]

**Paragraphe : Initialisation avant calculs :**

/POROSITE/GRILLE	N:	=10			
/CHARGE/GRILLE	N:	=10			
/DEBIT/MAILLE	C=	10	1P=	1V=	9999;
/DEBIT/MAILLE	C=	1	1P=	1V=	1;
/TEMPER_EXT/MAILLE	C=	1	1P=	1V=	9999;
/TEMPERAT/MAILLE	C=	1	1P=	1V=	100;

**29.9.2 Résultats de la simulation**

Les calculs se terminent en une fraction de seconde.

La Figure 123 montre que la différence de charge entre l'amont passe de 99.6 mètres au début du calcul à 15.8 mètres après 70 jours, soit une diminution d'un facteur 6. La Figure 124 montre l'évolution du profil de température.

Il convient de noter que, dans un tel schéma avec un débit imposé, la variation de viscosité influence fortement les valeurs de charge hydraulique. En revanche elle n'influence pas du tout les profils de température car le débit étant fixé, les vitesses sont invariantes. (On obtient exactement la même Figure 124 si on ne prend pas en compte la variation de viscosité). Ce ne serait pas le cas si on imposait la charge hydraulique de la limite amont. On aurait alors une augmentation de la vitesse à mesure que la perméabilité augmente.

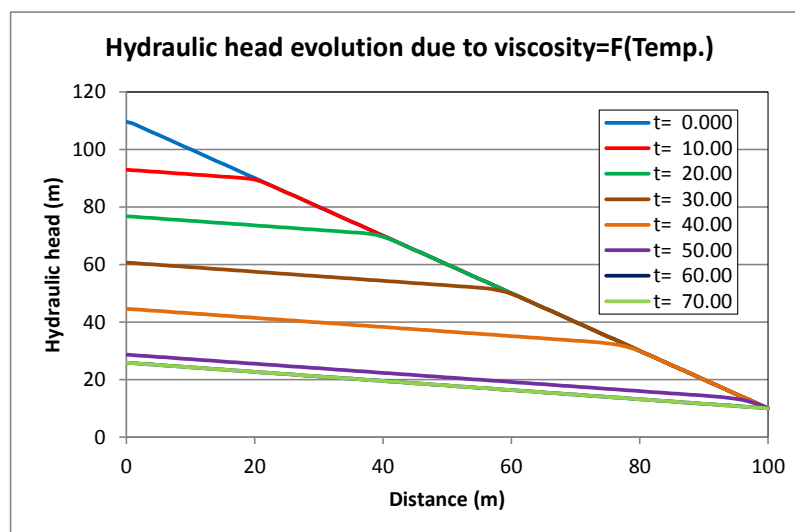


Figure 123 – Évolution du profil de charge hydraulique dans la colonne au cours du temps.

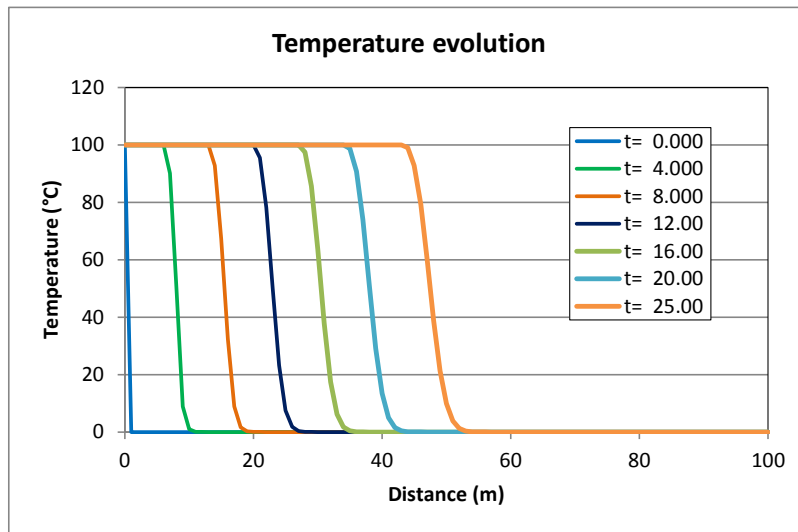


Figure 124 – Évolution du profil de température dans la colonne au cours du temps.

## **30 Vérification du calcul de transport de salinité avec effets densitaires et exemples d'application**

Ce chapitre présente des exemples d'application et de vérification des fonctionnalités de calculs avec effets densitaires du code de calcul MARTHE. Les exemples présentés sont les suivants :

- 1) Biseau salé de Henry en régime permanent ;
- 2) Biseau salé de Henry en régime transitoire ;
- 3) Biseau salé de Henry en régime transitoire sans dispersion. Calcul avec la méthode des caractéristiques MOC ;
- 4) Écoulement plan monocouche en présence d'un chenal (régime transitoire) ;
- 5) Retour à l'équilibre dans un tube en U (en régime transitoire) ;
- 6) Dôme de sel (test international HYDROCOIN, level 1, case 5) ;
- 7) Injection d'un liquide dense en surface d'un milieu poreux saturé
- 8) Fluide léger en Zone Non Saturée ;
- 9) Prise en compte des effets de la densité sans calcul de la salinité ;

D'autres exemples sont présentés dans le [didacticiel de MARTHE v.7.5](#), rapport [BRGM/RP-64997-FR](#) (Thiéry, 2015a).

## 30.1 Exemple d'application n°1 : Biseau salé de Henry en régime permanent

### 30.1.1 But de l'exemple n°1

Cet exemple classique illustre le déroulement du calcul couplé en régime permanent en coupe verticale pour simuler un biseau salé.

### 30.1.2 Description de l'exemple n°1

Il s'agit d'un système aquifère horizontal de 200 cm de large sur 100 cm de haut, modélisé en coupe verticale. La mer est située sur la limite droite, et un débit d'eau douce de  $660 \cdot 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$ , par mètre d'épaisseur de coupe, arrive par la limite gauche.

Les paramètres hydrodynamiques sont les suivants :

Perméabilité	: K	= $1.0 \cdot 10^{-2} \text{ m/s}$
Porosité	: $\omega$	= 35 %
Diffusion	: D	= $6.6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
Dispersivités	: $\alpha$	= 0

#### Maillage :

Il est composé de 41 colonnes et 20 lignes de mailles 5 cm x 5 cm de côté. (La colonne 41, la limite à la mer, a une largeur différente égale à 0.1 cm).

Loi de densité : Loi linéaire :  $\rho = 1000 + 1 \times \text{Salinité}$  ( $\rho = \text{Masse volumique}$ )

#### Conditions aux limites :

Limite ouest : Salinité extérieure = 0, débit d'eau douce =  $33 \cdot 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$  sur chaque maille.  
Limite est : Salinité extérieure =  $25 \text{ kg/m}^3$ , charge imposée = 0 sur chaque maille.

#### État initial :

Salinité : Salinité = 0 uniformément, sauf  $25 \text{ kg/m}^3$  sur la limite est  
Hydrodynamique : Charge = 0 uniformément.

Remarque : Cette loi linéaire de densité a été choisie pour comparaison avec des modélisations réalisées avec d'autres codes de calcul. En principe la salinité de la mer devrait plutôt être égale à  $35 \text{ kg/m}^3$ , (au lieu de  $25 \text{ kg/m}^3$ ) avec une loi de densité :

$$\rho = 1000 + 0.71 \times \text{Salinité} \quad (\rho = \text{Masse volumique})$$

En pratique les résultats sont absolument identiques.



### 30.1.3 Paramètres du modèle

#### a) Description des paramètres

##### *Couplage :*

Itérations de couplage	=	25 itérations de couplage
Sous-relaxation de couplage	=	Pas de sous-relaxation de couplage

##### *Hydrodynamique :*

Régime	=	Régime Permanent
Méthode	=	Gradients Conjugués : en charge d'eau douce
Nombre maximal d'itérations	=	3 (avec 50 itérations internes)

##### *Transport :*

Régime	=	Permanent
Méthode	=	Différences Finies ; Résolution par la méthode Orthomin
Nombre maximal d'itérations	=	Valeur par défaut (20 itérations)

**b) Extrait du fichier des « Paramètres Généraux » du modèle**

La Figure 125 présente un extrait du fichier des « Paramètres Généraux » de MARTHE.

```

Biseau Henry : Maillage Fin : *Permanent*
<< Coefficient de Diffusion = 6.6E-6 : Calcul en Charge d'eau douce >>
#<V7.5># --- Fin du texte libre --- ; Ne pas modifier/retirer cette ligne
*** Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs ***
    100 = Épaisseur de la tranche de coupe (Unité de Coordonnée de maille ou degrés)
    0 = État initial [0=Charge ; 1=Pression ; 2=Saturation ; etc] (Déf=Charge)
Vertic = Orientation du maillage : 0=Standard ; 1=Coupe vertic : pesanteur sur Oy

*** Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité ***
    25 = Nombre maxi d'itérations pour *Couplage* Densité/Pression ou Viscosité/Tempér
    0 = Coefficient de Relaxation pour Couplage Densité/Pression, etc. [Déf=0 => 1]
    0 = Nombre maxi d'itérations pour *Transport* Salinité/Chaleur, etc [Déf=0 => 20]
DF = Méthode de Transport [0=Diff_Finies ; 1=Random_Walk ; 2=MOC ; 3=TVD]
6.6e-6 = Diffusion moléculaire (m2/s) [* = Spatialisée]
    0 = Dispersivité Longitudinale (m) [* = Spatialisée]
    0 = Dispersivité Transversale (m) [* = Spatialisée]
    0 = Solveur pour les calculs de Transport [0=Orthomin ; 2=Autre]

*** Salinité, Densité ***
Douce = Effet de la Densité (0=Non ; 1=Charge ; 2=Pression ; 3=Charge d'eau Douce)
Linéai = Loi de Densité(Salinité) (0=Non ; 1=Linéaire ; 3=Schlumberger_VDB[Salinité])
    1 = Dérivée de la loi Densité = F(Salinité) si loi Linéaire [Déf=0 => 0.7]
    0 = Masse de chaque particule de Salinité (si particules)
1e-4 = Variation moy. de Salinité entre 2 itérat pour convergence [Déf=0 => 1e-8]
Perman = Régime du Transport de Salinité [0=Transitoire ; 1=Permanent]
    1 = Calcul (Transport) de la Salinité

*** Initialisation avant calculs ***
/POROSITE/GRILLE N: =35
/SALINITE/MAILLE C= 41L= 1P= *V= 25;
/SALIN_EXT/MAILLE C= 1L= 1P= *V= 0;
/SALIN_EXT/MAILLE C= 41L= 1P= *V= 25;
/CHARGE/GRILLE N: =0
/DEBIT/MAILLE C= 1L= 1P= *V= 33;
/DEBIT/MAILLE C= 41L= 1P= *V= 9999;
/*****/***** Fin d'Initialisation

*** Fin du fichier des Paramètres Généraux ***

```

Figure 125 – Biseau salé de Henry en régime permanent :  
Extraits du fichier des « Paramètres Généraux ».

### 30.1.4 Résultats de la modélisation

#### a) Récapitulation du couplage

La Figure 126 extraite du fichier de résultats « bilandeb.txt » est un tableau qui résume la convergence des calculs au cours du couplage. Le tableau présente les informations suivantes :

- Col 2 : Somme des débits résiduels avant calcul hydrodynamique ;
- Col 3 : Variation moyenne (en valeur absolue) de charge ;
- Col 4 : Variation moyenne (en valeur absolue) de la salinité ;
- Col 5 : Variation algébrique moyenne de la salinité ;
- Col 6 : Variation maximale de charge ;
- Col 7 : Variation maximale de salinité ;
- Col 8 : Écart de bilan massique global (calculé toutes les 10 itérations).

À la fin de ce tableau apparaît la période de décroissance (pour les dernières itérations) si elle est monotone (texte « Périod »). Dans cet exemple on voit que la somme des débits résiduels est divisée par 2 toutes les 3.1 itérations de couplage.

```

Biseau Salé Henry : Maillage Fin : *Permanent* :
<< Diffusion = 6.6E-6 : Calcul en Charge d'eau douce >>

      Récapitulation Couplage : Variations à la Première Itération
      <----- Moyenne/Maillages -----> <-- Valeur Maxi -->
Passag      V_Absol      V_Algrébr      %
Coupla      Q_Resid      Charge      Salinité      Salinité      Charge      Salinité      Bil_Mass_Gl
1      4.97E+04      1.91      3.92      3.70      2.56      25.00      0.00
2      2.54E+03      4.78E-02      2.41      -1.10      0.449      17.31      0.00
3      1.82E+03      1.57E-02      1.74      1.07      -0.119      15.91      0.00
4      1.37E+03      8.80E-03      1.18      -0.126      0.106      11.05      0.00
5      9.76E+02      9.44E-03      0.846      0.259      9.36E-02      9.08      0.00
6      7.70E+02      4.31E-03      0.526      -3.91E-02      -3.75E-02      5.32      0.00
7      4.75E+02      3.30E-03      0.367      0.101      3.66E-02      3.28      0.00
8      3.58E+02      2.64E-03      0.226      -7.06E-02      2.86E-02      1.96      0.00
9      2.24E+02      2.11E-03      0.151      7.06E-02      -2.37E-02      1.58      0.00
10     1.56E+02      1.81E-03      0.109      -4.51E-02      2.07E-02      1.10      0.711
11     1.17E+02      1.29E-03      9.24E-02      2.44E-02      -1.33E-02      0.848      0.00
..      .      .      .      .      .      .      .
19      17.82      1.99E-04      1.44E-02      3.43E-03      -2.23E-03      0.128      0.00
20      14.33      1.53E-04      1.09E-02      -2.21E-03      1.68E-03      8.92E-02      0.172
21      11.22      1.07E-04      8.34E-03      8.06E-04      -1.08E-03      7.71E-02      0.00
..      .      .      .      .      .      .      .
25      4.46      4.26E-05      3.52E-03      -2.31E-04      4.78E-04      2.56E-02      0.00
Périod      3.1      3.1      3.1      -----      -----
Monot

```

Figure 126 – Biseau salé de Henry en régime permanent : Récapitulation du couplage.

**b) Bilan des débits du fluide**

La Figure 127 présente le bilan des débits en fin de calcul. Le débit est exprimé en  $10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$  (qui est l'unité utilisateur de débit qui a été choisie).

- Bilan en unités de Débit : Pas de temps n° 0 - t= 0.000 -----		
Débits Entrant /Charges Impos. =	158.998	
Débits Sortant /Charges Impos. =		-818.997
Débits Entrant dans les Mailles=	660.159	(660.000 Imposé)
Débits Sortant des Mailles =		-0.1606
-----		
Bilan de Contrôle =	-5.679E-11	(Somme de tous les débits)
Débit Résiduel d'Erreur =	0.3240	(Somme des valeurs absolues des débits résiduels)
Bilan Global =	4.728E-03	
Débit Résiduel Maximal =	4.091E-03	Col: 28 , Lig: 1 , Cou: 19
soit un Écart de Charge de :	1.023E-06	
Hauteur Résiduelle d'Erreur Maximale =	1.023E-06	Col: 28 , Lig: 1 , Cou: 19
Somme abs (Débits résiduels) =	0.3240	Flux Total maxi = 818.998
d'où une convergence interne à :	3.957E-02 %	(d'erreur)
Écart de bilan global =	4.728E-03	(bouclage entrées/sorties)

Figure 127 – Biseau salé de Henry en régime permanent : Bilan des débits en fin de calcul.

**c) Bilan Massique du soluté**

La Figure 128 présente le bilan des flux massiques en fin de calcul. Les masses sont en  $10^{-3} \text{ kg}$  et les temps sont en minutes. Les flux massiques sont donc en  $10^{-3}/60 = 1.667 \cdot 10^{-5} \text{ kg/s}$

=====			
Bilan du Transport de la Salinité - Nappe :			
=====			
Bilan en unité de Masse/unité de Temps : Pas de temps n° 0 - t= 0.000			
(c'est à dire en : 1.667E-05 kg/s)			
	Entrant	Sortant	Net
par les Limites =	23.850	-23.859	-9.813E-03
Mailles Internes Rési=	5.810E-02	-4.829E-02	9.813E-03
-----			
Bilan de Contrôle =	-1.618E-13	(Somme totale y compris résidus)	
Somme Résidus Intern =	0.1064	(Somme val. absolues des résidus)	
Somme val abs des résidus =	0.1064	Plus grande composante = 23.859	
=> Converg. Interne Masse à :	0.4459 %	(d'erreur)	
Écart de bilan Masse global =	-9.813E-03	(Entrées/sorties)	
=> Converg. Masse globale à :	4.113E-02 %	(d'erreur)	
Résidu Interne Maximal =	1.403E-03	Col: 40 , Lig: 1 , Cou: 10	
Soit un écart de Concen de :	-1.613E-03		
Nombre de Péclet moyen=	0.991	(820 valeurs)	
Nombre de Péclet =	1.225	(Pondéré par le débit massique)	

Figure 128 – Biseau salé de Henry en régime permanent : Bilan des flux massiques en fin de calcul.

#### d) Dessins (en coupe verticale)

La Figure 129 présente les iso-salinités ( $\text{kg/m}^3$ ) qui forment un biseau salé avec une bande de mélange due à la diffusion. Les flèches indiquent la direction et l'intensité de la vitesse locale. On voit que l'eau douce provenant de la gauche, étant plus légère, s'écoule en passant au-dessus du biseau. On voit apparaître un mouvement de circulation de l'eau salée qui rentre en bas à droite et se mélange à l'eau douce. La Figure 130 présente le champ de charge hydraulique réelle (en cm). Elle montre nettement que la vitesse n'est pas perpendiculaire aux courbes d'iso-charge réelle.

La Figure 131 présente le champ de charge hydraulique calculée, exprimée en hauteur d'eau douce (en cm). Elle montre que la vitesse n'est pas non plus perpendiculaire aux courbes d'iso-charge d'eau douce. La Figure 132 présente le champ de pression hydraulique calculée (en cm). Les courbes d'iso-pressions sont quasi-horizontales, bien que l'écoulement soit lui aussi globalement horizontal.

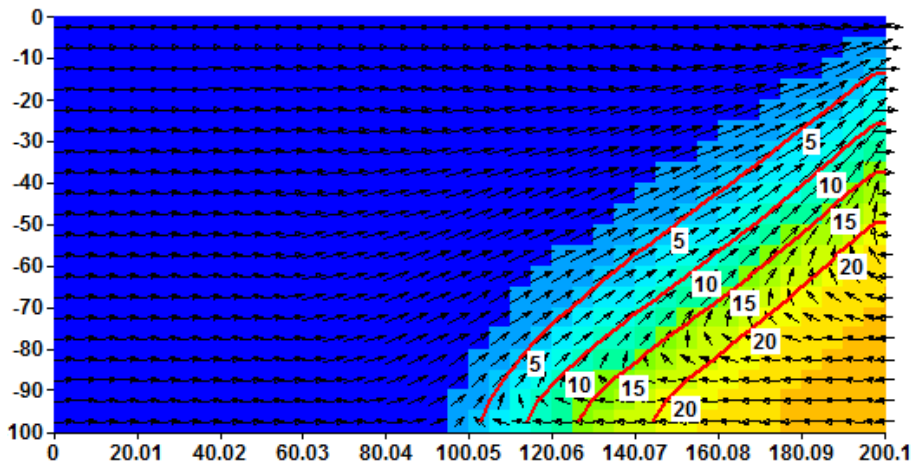


Figure 129 – Biseau salé de Henry modélisé en coupe : salinité calculée ( $\text{kg/m}^3$ ).

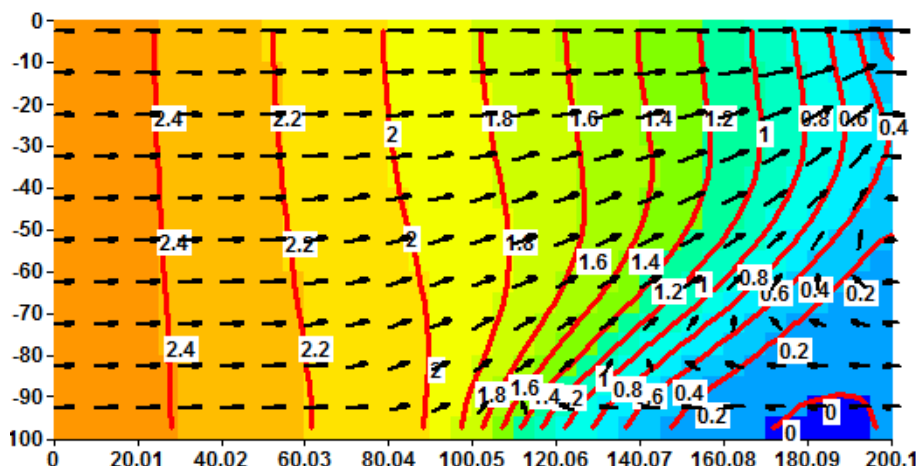


Figure 130 – Biseau salé de Henry modélisé en coupe : charge hydraulique réelle calculée (cm).

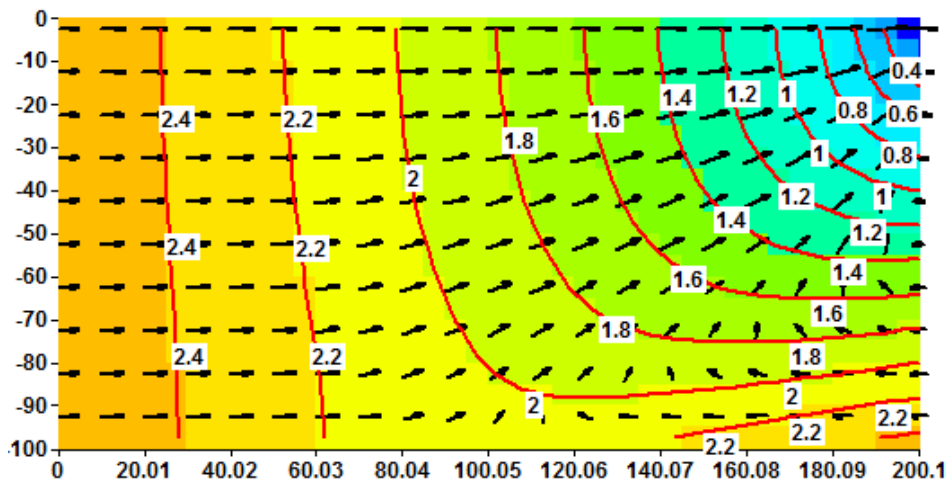


Figure 131 – Biseau salé de Henry : charge en eau douce calculée (cm).

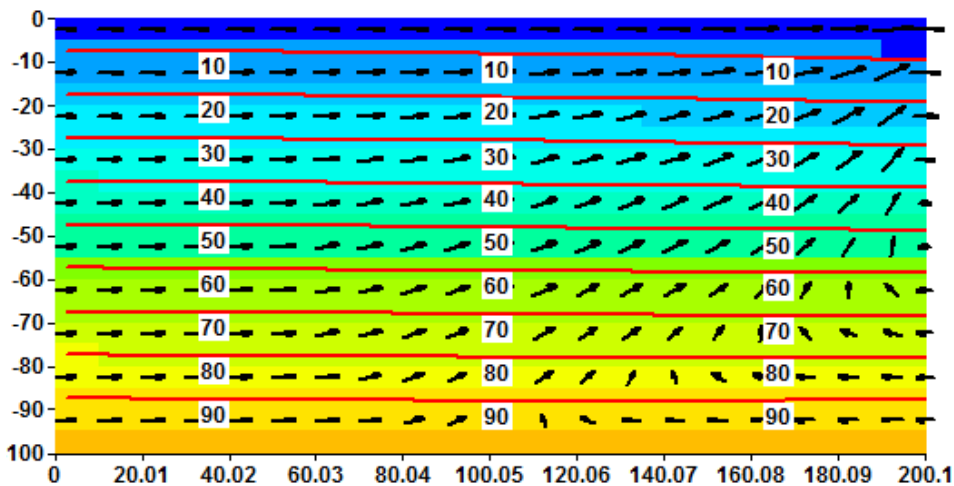


Figure 132 – Biseau salé de Henry : pression hydraulique calculée (cm).

### 30.1.5 Variante avec une salinité plus forte

On a réalisé la même simulation mais avec de l'eau salée de masse volumique  $1080 \text{ kg/m}^3$  au lieu de  $1025 \text{ kg/m}^3$ , donc avec un couplage plus fort. Un calcul sans sous-relaxation ne peut alors pas converger. La Figure 133 présente :

- La récapitulation du couplage
  - ⇒ Le débit massique résiduel ne diminue pas et est très élevé.
- Le bilan des flux massiques.
  - ⇒ Le bilan n'est pas équilibré.

Biseau Salé Henry : Maillage Fin : \*Permanent\* :

<< Diffusion = 6.6E-6 : Calcul en Charge d'eau douce >>

<< Masse volumique de l'eau de mer =1080 kg/m<sup>3</sup> - Calcul sans sous-relaxation

Récapitulation Couplage : Variations à la Première Itération

<----- Moyenne/Maillages -----> <-- Valeur Maxi -->

Passag	Q_Resid	Charge	V_Absol Salinité	V_Algebr Salinité	Charge	Salinité	Bil_Mass_Gl	%
Coupla								
1	1.58E+05	4.66	25.27	25.09	7.38	80.00	0.00	0.00
2	1.40E+04	0.405	19.30	-4.21	2.17	58.53	0.00	0.00
3	1.37E+04	0.231	16.52	4.36	0.903	56.75	0.00	0.00
4	1.36E+04	0.162	14.04	3.52	0.639	51.29	0.00	0.00
5	1.32E+04	0.180	13.56	7.97E-02	0.992	39.23	0.00	0.00
6	1.36E+04	0.157	12.22	1.72	-0.610	45.76	0.00	0.00
7	1.26E+04	0.182	13.44	-0.900	0.650	40.00	0.00	0.00
8	1.33E+04	0.210	14.40	-3.34	0.742	42.96	0.00	0.00
9	1.35E+04	0.241	14.96	2.53	-1.04	50.09	0.00	0.00
10	1.39E+04	0.217	14.46	-2.23	1.01	42.60	50.86	0.00
11	1.37E+04	0.175	13.20	3.97	-0.877	51.30	0.00	0.00
..	..	..	..	..	..	..	..	..
19	1.27E+04	0.196	14.12	-1.54	0.734	41.84	0.00	0.00
20	1.36E+04	0.224	14.90	-2.99	0.759	42.17	31.44	0.00
21	1.37E+04	0.248	15.37	2.25	-1.05	50.14	0.00	0.00
..	..	..	..	..	..	..	..	..
25	1.35E+04	0.194	13.33	-0.651	-0.655	43.16	0.00	0.00
Péριο								
Monot	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

=====  
Bilan du Transport de la Salinité - Nappe :  
=====

Bilan en unité de Masse/unité de Temps : Pas de temps n° 0 - t= 0.000  
(c'est à dire en : 1.667E-05 kg/s)

	Entrant	Sortant	Net
par les Limites =	125.188	-195.793	-70.605
Mailles Internes Rési=	339.862	-269.258	70.605

-----

Bilan de Contrôle = -1.528E-12 (Somme totale y compris résidus)  
Somme Résidus Intern = 609.120 (Somme val. absolues des résidus)

Somme val abs des résidus = 609.120 Plus grande composante = 195.793  
=> Converg. Interne Masse à : 311.105 % (d'erreur)  
Écart de bilan Masse globale = -70.605 (Entrées/sorties)  
=> Converg. Masse globale à : 36.061 % (d'erreur)

Figure 133 – Biseau salé de Henry en régime permanent :  
Récapitulation du couplage et bilan des débits massiques.  
Calcul avec une densité élevée sans sous-relaxation.

On a alors refait ce même calcul avec un coefficient de sous-relaxation égal à 0.50. La Figure 134 montre alors une convergence régulière.

```

Biseau Salé Henry : Maillage Fin : *Permanent* :
<< Diffusion = 6.6E-6 : Calcul en Charge d'eau douce >>
<< Masse volumique de l'eau de mer =1080 kg/m3 - Sous-relaxation = 0.50

      Récapitulation Couplage : Variations à la Première Itération
<----- Moyenne/Maillages -----> <-- Valeur Maxi -->
Passag      V_Absol      V_Algebr      %
Coupla      Q_Résid      Charge      Salinité      Salinité      Charge      Salinité      Bil_Mass_Gl
1      1.58E+05      4.66      25.27      25.09      7.38      80.00      0.00
2      7.00E+03      0.207      11.18      9.72      1.13      74.44      0.00
3      7.04E+03      0.234      11.17      3.86      0.967      67.23      0.00
4      6.48E+03      0.177      7.80      -0.817      0.780      51.12      0.00
5      5.07E+03      8.30E-02      4.54      -1.27      0.529      24.02      0.00
6      3.33E+03      3.03E-02      2.64      0.636      0.208      13.16      0.00
7      2.22E+03      2.24E-02      1.50      0.180      0.108      7.46      0.00
8      1.04E+03      1.38E-02      1.01      -0.535      8.84E-02      5.89      0.00
9      5.54E+02      6.07E-03      0.661      0.202      2.18E-02      3.40      0.00
10     3.77E+02      4.54E-03      0.446      9.15E-02      1.74E-02      2.11      0.107
11     2.04E+02      2.92E-03      0.276      -0.137      1.77E-02      1.62      0.00
..     . . . . .
19     4.49      6.41E-05      7.92E-03      1.20E-03      1.79E-04      3.63E-02      0.00
20     3.14      4.97E-05      5.46E-03      -1.27E-03      2.18E-04      2.94E-02      7.92E-03
21     2.21      2.55E-05      3.74E-03      1.14E-04      -1.05E-04      1.70E-02      0.00
..     . . . . .
25     5.15      8.25E-05      8.99E-03      3.97E-03      -3.45E-04      3.89E-02      0.00
Péριο
Monot     -----
    
```

```

=====
      Bilan du Transport de la Salinité      - Nappe :
=====
Bilan en unité de Masse/unité de Temps      : Pas de temps n° 0 - t= 0.000
(c'est à dire en : 1.667E-05 kg/s)
      Entrant      Sortant      Net
par les Limites      =      182.718      -182.702      1.628E-02
Mailles Internes Rési=      8.138E-02      -9.766E-02      -1.628E-02
-----
Bilan de Contrôle      = -1.540E-12      (Somme totale y compris résidus)
Somme Résidus Intern =      0.1790      (Somme val. absolues des résidus)

Somme val abs des résidus      =      0.1790      Plus grande composante = 182.718
=> Converg. Interne Masse à : 9.799E-02 %      (d'erreur)
Écart de bilan Masse global = 1.628E-02      (Entrées/sorties)
=> Converg. Masse globale à : 8.908E-03 %      (d'erreur)
    
```

Figure 134 – Biseau salé de Henry en régime permanent :  
 Récapitulation du couplage et bilan des débits massiques.  
 Calcul avec une densité élevée, avec une sous-relaxation égale à 0.50.



## 30.2 Exemple d'application n°2 : Biseau salé de Henry en régime transitoire

### 30.2.1 But de l'exemple n°2

Cet exemple classique illustre le déroulement du calcul couplé en régime transitoire en coupe verticale pour simuler un biseau salé.

### 30.2.2 Description de l'exemple n°2

Il s'agit du même système aquifère que précédemment mais les calculs sont réalisés en régime transitoire. Le transport est calculé en régime transitoire. En revanche les calculs hydrodynamiques sont réalisés en régime permanent puisque le système étant captif, les coefficients d'emménagement captifs sont négligeables.

La simulation est réalisée pendant 15 pas de temps de durées croissantes qui représentent une durée cumulée égale à 80 minutes.

Les paramètres hydrodynamiques, le maillage et les conditions aux limites sont identiques à ceux de l'exemple précédent. Les conditions initiales sont identiques c'est-à-dire que le système est initialement rempli d'eau douce. Un biseau salé se développe progressivement vers la gauche.

### 30.2.3 Paramètres du modèle

#### a) Description des paramètres

##### *Couplage :*

Itérations de couplage = 15 itérations de couplage  
Sous-relaxation de couplage = Pas de sous-relaxation de couplage

##### *Hydrodynamique :*

Régime = Régime Permanent  
Méthode = Gradients Conjugués : en charge d'eau douce  
Nombre maximal d'itérations = 3 itérations à chaque pas de temps  
Nombre d'itérations internes = 50

##### *Transport :*

Régime = Régime Transitoire  
Méthode = Différences Finies ;  
Résolution matricielle par la méthode Orthomin  
Nombre maximal d'itérations = valeur par défaut (20 itérations).

## b) Extrait du fichier des « Paramètres Généraux » du modèle

La Figure 135 présente un extrait du fichier des « Paramètres Généraux » de MARTHE.

<pre> Biseau Henry : Maillage Fin : Transport Transitoire : &lt;&lt; Diffusion = 6.6E-6 : Calcul en Charge d'eau douce &gt;&gt; #&lt;V7.5&gt;# --- Fin du texte libre --- ; Ne pas modifier/retirer cette ligne                 </pre>
<pre> *** Contrôle de la Résolution Hydrodynamique ***     3 = Nombre maxi d'itérations pour pas de temps suivant pas n°0 [Régime Transit.]     1 = Nombre maximal d'itérations pour le pas de temps n°0 (régime permanent init.)     5e-6 = Variation moyenne de charge entre 2 itérations pour convergence     50 = Nombre d'itérations internes pour le solveur [Déf=0 =&gt; 10] Perman = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]                 </pre>
<pre> *** Unités des données ***     cm/s = Unité de Perméabilité des aquifères en m/s (ou m2)     1e-7 = Unité de Débit en m3/s (ou kg/s si Gaz)     cm = Unité de Charge, Altitude, Pression en m Minut = Unité de Temps (des Pas de temps) (sec, min, heu, jou, déca, moi, ann)     cm = Unité de Coordonnée Horizontale en m     0 = Unité de Salinité en kg/m3     % = Unité de Porosité = Teneur en eau en [-] ['%' si en %]     G = Unité de Masse en kg                 </pre>
<pre> *** Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs ***     0 = Référence de Charge (Charge modèle = Charge lue + Référence)     0 = Référence du Substratum (Substratum modèle = Substratum lu + Référence)     100 = Épaisseur de la tranche de coupe (Unité de Coordonnée de maille ou degrés)     0 = État initial [0=Charge ; 1=Pression ; 2=Saturation ; etc] (Déf=Charge) Vertic = Orientation du maillage : 0=Standard ; 1=Coupe vertic : pesanteur sur Oy                 </pre>
<pre> *** Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité ***     15 = Nombre maxi d'itérations pour *Couplage* Densité/Pression ou Viscosité/Tempér     0 = Coefficient de Relaxation pour Couplage Densité/Pression, etc. [Déf=0 =&gt; 1]     0 = Nombre maxi d'itérations pour *Transport* Salinité/Chaleur, etc [Déf=0 =&gt; 20]     DF = Méthode de Transport [0=Diff_Finies ; 1=Random_Walk ; 2=MOC ; 3=TVD]     6.6e-6 = Diffusion moléculaire (m2/s) [* = Spatialisée]                 </pre>
<pre> *** Salinité, Densité ***     Douce = Effet de la Densité (0=Non ; 1=Charge ; 2=Pression ; 3=Charge d'eau Douce)     Linéai = Loi de Densité(Salinité) (0=Non ; 1=Linéaire ; 3=Schlumberger_VDB[Salinité])     1 = Dérivée de la loi Densité = F(Salinité) si loi Linéaire [Déf=0 =&gt; 0.7]     0 = Masse de chaque particule de Salinité (si particules)     1e-4 = Variation moy. de Salinité entre 2 itérat pour convergence [Déf=0 =&gt; 1e-8]     Transit = Régime du Transport de Salinité [0=Transitoire ; 1=Permanent]     1 = Calcul (Transport) de la Salinité                 </pre>

Figure 135 – Biseau salé de Henry en régime transitoire :  
Extraits du fichier des « Paramètres Généraux ».

### 30.2.4 Résultats de la modélisation

#### a) Pas de temps n°1 (t = 0.5 mn)

La Figure 136 est extraite du fichier de résultat « bilandeb.txt » au pas de temps n°1, après 0.5 minute. Elle présente le résumé de la convergence des calculs au cours du couplage, le bilan des débits d'eau et le bilan des débits massiques.

Biseau salé Henry : Maillage Fin : Transport Transitoire :  
Diffusion = 6.6E-6 : Calcul en Charge d'eau douce

Pas de temps de modèle n°15 Début : 0.000 Fin : 0.500 minutes							
=====							
Récapitulation Couplage : Variations à la Première Itération							
<----- Moyenne/Maillages ----->				<-- Valeur Maxi -->			
Passag	Q_Résid	Charge	V_Absol	V_Algrébr	Charge	Salinité	%
Coupla			Salinité	Salinité			Bil_Mass_Gl
1	0.00	0.00	0.514	-0.373	0.00	24.55	0.00
2	1.43E+02	2.50E-04	1.07E-02	4.58E-03	1.63E-02	1.30	0.00
3	12.42	1.17E-05	7.63E-04	2.87E-06	-8.57E-04	0.139	0.00
4	0.945	2.70E-06	6.26E-05	-3.22E-05	-4.85E-05	1.14E-02	0.00

=====		
Bilan Global : Pas de temps n° 1		
=====		
- Bilan en unités de Débit : Pas de temps n° 1 - t= 5.000E-01 -----		
Débits Entrant /Charges Impos. =	629.444	
Débits Sortant /Charges Impos. =		-1289.444
Débits Entrant dans les Mailles=	660.091	(660.000 Imposé)
Débits Sortant des Mailles =		-9.042E-02
-----		
Bilan de Contrôle	= -3.001E-11	(Somme de tous les débits)
Débit Résiduel d'Erreur	= 0.1854	(Somme des valeurs absolues des débits résiduels)
Bilan Global = -2.327E-03		
Somme abs (Débits résiduels) = 0.1854 Flux Total maxi = 1289.444		
d'où une convergence interne à : 1.438E-02 % (d'erreur)		
d'où une convergence globale à : -1.805E-04 % (d'erreur)		

=====			
Bilan du Transport de la Salinité - Nappe :			
=====			
Bilan en unité de Masse/unité de Temps : Pas de temps n° 1 - t= 5.000E-01			
(c'est à dire en : 1.667E-05 kg/s)			
	Entrant	Sortant	Net
par les Limites =	94.417	-6.927	87.489
Mailles Internes Rési=	7.639E-04	-7.855E-04	-2.165E-05
-----			
Stockage =	100.062	-12.573	87.489
Bilan de Contrôle =	-3.274E-14	(Somme totale y compris résidus)	
Somme Résidus Intern =	1.549E-03	(Somme val. absolues des résidus)	
Somme val abs des résidus = 1.549E-03 Plus grande composante = 100.062			
=> Converg. Interne Masse à : 1.548E-03 % (d'erreur)			
Écart de bilan Masse global = 2.165E-05 (Entrées/sorties)			
=> Converg. Masse globale à : 2.164E-05 % (d'erreur)			

Figure 136 – Biseau salé de Henry en régime transitoire : Résultats au pas de temps n°1, après 0.5 mn.

**b) Pas de temps n°15 (t = 80 mn)**

La Figure 137 extraite du fichier de résultat « bilandeb.txt » au pas de temps n°15, après 80 minutes. Elle présente le résumé de la convergence des calculs au cours du couplage et le bilan des débits d'eau. La Figure 138 présente le bilan des débits massiques.

Pas de temps de modèle n°15 Début : 70.000 Fin : 80.000 minutes							
=====							
Récapitulation Couplage : Variations à la Première Itération							
<----- Moyenne/Maillages ----->				<-- Valeur Maxi -->			
Passag	V_Absol		V_Algébr				%
Coupla	Q_Résid	Charge	Salinité	Salinité	Charge	Salinité	Bil_Mass_Gl
1	0.00	0.00	0.161	0.161	0.00	1.40	0.00
2	1.64E+02	2.99E-03	2.65E-02	-1.95E-02	2.27E-02	0.305	0.00
3	26.61	3.64E-04	6.39E-03	3.92E-03	-2.41E-03	6.23E-02	0.00
4	6.73	6.82E-05	1.84E-03	-1.11E-03	3.92E-04	1.98E-02	0.00
5	1.90	1.67E-05	6.09E-04	3.79E-04	8.05E-05	8.07E-03	0.00
6	0.669	5.06E-06	1.93E-04	-1.08E-04	-2.20E-05	2.01E-03	0.00
7	0.280	2.07E-15	1.34E-04	-2.63E-05	7.11E-15	2.26E-03	0.00
8	0.392	2.14E-15	1.78E-04	-5.03E-07	7.11E-15	4.09E-03	0.00
9	0.621	2.99E-06	1.94E-04	1.64E-05	-2.05E-05	4.39E-03	0.00
10	0.546	2.16E-15	3.17E-04	-7.05E-06	7.11E-15	7.38E-03	1.18E-04
11	1.19	5.02E-06	3.05E-04	1.87E-05	2.73E-05	6.60E-03	0.00
12	1.01	3.10E-06	1.12E-04	1.43E-05	3.17E-05	2.47E-03	0.00
13	0.329	2.13E-15	1.62E-04	1.77E-06	7.33E-15	3.88E-03	0.00
14	0.562	1.45E-06	1.55E-04	-5.83E-06	-1.36E-05	3.70E-03	0.00
15	0.506	2.06E-15	2.94E-04	5.49E-07	7.11E-15	7.03E-03	0.00

=====			
Bilan Global : Pas de temps n° 15			
=====			
- Bilan en unités de Débit : Pas de temps n° 15 - t= 80.000 -----			
Débits Entrant /Charges Impos. =	204.548		
Débits Sortant /Charges Impos. =		-864.548	
Débits Entrant dans les Mailles=	660.059		(660.000 Imposé)
Débits Sortant des Mailles =		-5.891E-02	
-----			
Bilan de Contrôle	= -5.481E-11		(Somme de tous les débits)
Débit Résiduel d'Erreur	= 0.1197		(Somme des valeurs absolues des débits résiduels)
Bilan Global = -4.816E-04			
Somme abs (Débits résiduels) = 0.1197 Flux Total maxi = 864.548			
d'où une convergence interne à :	1.385E-02 %		(d'erreur)
d'où une convergence globale à :	-5.570E-05 %		(d'erreur)

Figure 137 – Biseau salé de Henry en régime transitoire : Résultats au pas de temps n°15, après 80 mn : Récapitulation du couplage et bilan des débits d'eau.

Bilan du Transport de la <u>Salinité</u> - Nappe :			
Bilan en unité de Masse/unité de Temps : Pas de temps n° 15 - t= 80.000 (c'est à dire en : 1.667E-05 kg/s)			
	Entrant	Sortant	Net
par les Limites =	30.682	-20.549	10.133
Mailles Internes Rési=	2.819E-02	-2.813E-02	6.868E-05
-----			
Stockage =	10.134	-2.267E-04	10.133
Bilan de Contrôle =	8.595E-14	(Somme totale y compris résidus)	
Somme Résidus Intern =	5.632E-02	(Somme val. absolues des résidus)	
Somme val abs des résidus = 5.632E-02 Plus grande composante = 30.682			
=> Converg. Interne Masse à : 0.1836 % (d'erreur)			
Écart de bilan Masse global = -6.868E-05 (Entrées/sorties)			
=> Converg. Masse globale à : 2.239E-04 % (d'erreur)			

Pas de temps n° 15 - t= 80.000		
----- Cumul des masses ' <u>Salinité</u> '	Dans le pas	Depuis le début de la simulation
Entrant par les Limites =	306.8	3637.
Sortant par les Limites =	-205.5	-1217.
Stockage =	101.3	2420.
[Stockage Positif (Entrant)] =	101.3	2427.
[Stockage Négatif (Sortant)] =	-2.2674E-03	-6.757
Écart de bilan de masse ou de chaleur=	-6.8684E-04	-2.6757E-02
(%) =	2.2386E-04	7.3569E-04

Figure 138 – Biseau salé de Henry en régime transitoire : Résultats au pas de temps n°15, après 80 mn : Bilan massique du transport de la salinité.

### c) Dessins (en coupe verticale)

La Figure 139 présente les iso-salinités ( $\text{kg/m}^3$ ) calculées à la date 3 mn (à droite, en traits interrompus) et à la date 80 mn (en trait continu). La Figure 140 présente l'évolution au cours du temps, calculée à pas de temps fin, du pied de l'interface. Le pied de l'interface est défini ici comme le point ayant une salinité égale à la moyenne entre l'eau douce et l'eau salée. Une comparaison avec des calculs réalisés par Frind (1982) et par Galeati *et al.* (1992) montre que les résultats de MARTHE sont tout à fait comparables, ce qui constitue une vérification de la fonctionnalité de calculs densitaires.

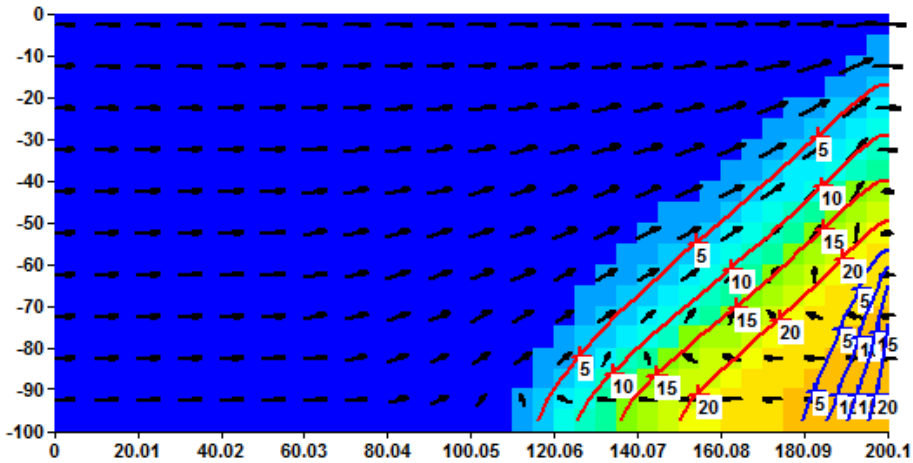


Figure 139 – Biseau salé de Henry en régime transitoire : salinité calculée : après 3 mn (isovaleurs bleues) et après 80 mn (isovaleurs rouges).

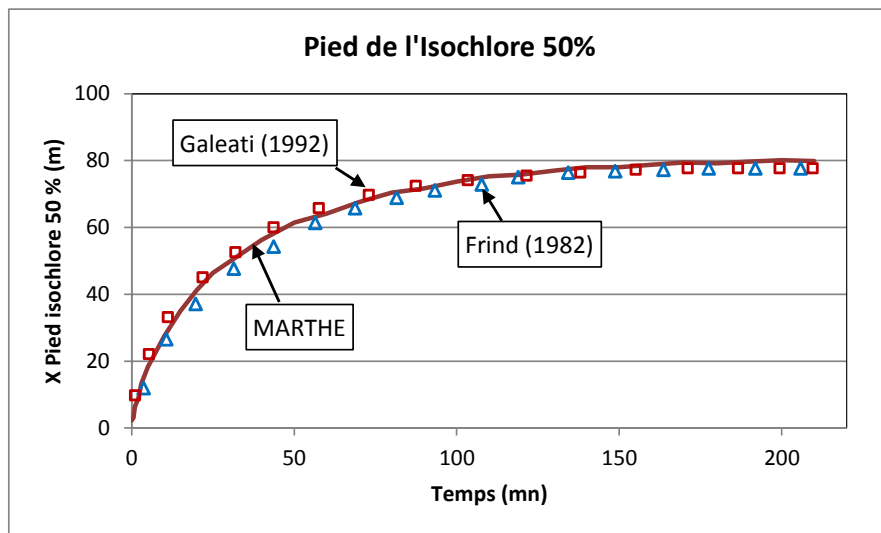


Figure 140 – Biseau salé de Henry en régime transitoire : évolution au cours du temps du pied de l'interface. Comparaison avec des calculs réalisés par Frind (1982) et Galeati et al. (1992).

### 30.3 Exemple d'application n°3 : Biseau salé de Henry en régime transitoire sans dispersion. Calcul avec la méthode des caractéristiques MOC

#### 30.3.1 But de l'exemple n°3

Cet exemple illustre le déroulement du calcul couplé en régime transitoire en coupe verticale pour simuler un biseau salé abrupt sans dispersion, avec la méthode des caractéristiques (MOC) pour le transport.

#### 30.3.2 Description de l'exemple n°3

Il s'agit du même système aquifère que précédemment mais sans dispersion ni diffusion. Les calculs de transport sont réalisés par la méthode des caractéristiques (MOC) au lieu de la méthode des différences finies.

#### 30.3.3 Paramètres du modèle

Diffusion :  $D = 0$   
 Dispersivités :  $= 0$   
 Nombre de pas de temps :  $= 15$ , chacun découpé en 4 sous-pas de modèle)

*Couplage :*

Itérations de couplage :  $= 1$  seule itération (valeur imposée pour la méthode MOC)  
 Sous-relaxation de couplage  $=$  Pas de sous-relaxation de couplage

*Remarque :* Il y a une seule itération de couplage, mais les pas de temps de calculs sont 4 fois plus petits que dans l'exemple précédent car il y a 4 sous-pas de modèle.

*Hydrodynamique :* identique au calcul par la méthode DF

*Transport :*

Régime  $=$  Régime Transitoire  
 Méthode  $=$  MOC (**M**ethod **O**f **C**haracteristics)  
 Masse d'une particule  $= 10^{-4}$  kg.

#### 30.3.4 Résultats de la modélisation

##### a) Déroulement des calculs

À la date 3 mn (16<sup>ème</sup> pas de temps de calcul) le champ de salinité est représenté par 2800 particules. À la date 80 mn (pas de temps de calcul n°60) il y a 31 700 particules.

On a réalisé un 2<sup>ème</sup> calcul avec des particules de masse  $10^{-5}$  kg, et un maillage régulier avec 40 colonnes égales de 5 cm (au lieu de 41<sup>ème</sup> colonne beaucoup plus fine, avec donc beaucoup moins de particules). Les résultats sont légèrement plus réguliers. À la fin du calcul il y a 331 729 particules.

**b) Dessins (en coupe verticale)**

La Figure 141 présente les iso-salinités (en  $\text{kg/m}^3$ ) à la date 3 mn (à droite) et à la date 80 mn (à gauche) pour la 2<sup>ème</sup> simulation. On voit que le biseau est abrupt, sans aucune dispersion numérique, puisque la salinité passe de 0 à 25  $\text{kg/m}^3$  dans la largeur d'une maille. C'est ce que permet la méthode MOC.

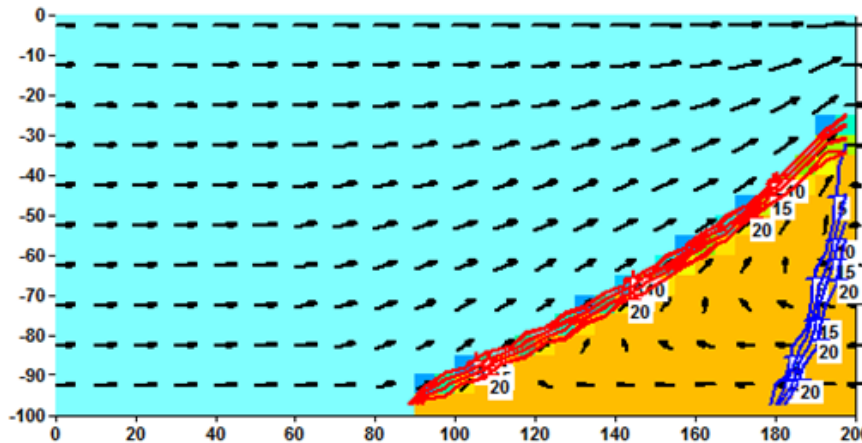


Figure 141 – Biseau salé de Henry en régime transitoire sans dispersion : salinité calculée par la méthode MOC : après 3 mn (isovaleurs bleues) et après 80 mn (isovaleurs rouges).

**30.3.5 Variante : Calcul du transport par la méthode TVD (Total Variation Diminishing) à limiteur de flux**

Pour illustrer l'intérêt de la méthode TVD (Total Variation Diminishing) par le calcul du transport, le même calcul a été réalisé avec cette méthode. Pour ce calcul on a choisi de découper les 15 pas de temps de modèle en 20 sous-pas. On a également pris un maillage régulier avec 40 colonnes égales de 5 cm (au lieu de 41 colonnes avec la 41<sup>ème</sup> colonne de 0.1 cm). En effet, la méthode TVD serait pénalisée par les très petites mailles.

Pour ce calcul on a choisi 10 itérations de couplage avec un coefficient de sous-relaxation de couplage égal à 0.7

La Figure 142 montre la position du biseau après 3 mn et après 80 mn. Les isovaleurs tracées sont les isovaleurs de salinité 5, 10, 15 et 20  $\text{kg/m}^3$ . Cette figure montre des résultats proches de ceux obtenus avec la méthode MOC, avec un front abrupt bien représenté par la méthode TVD qui génère extrêmement peu de dispersion numérique.



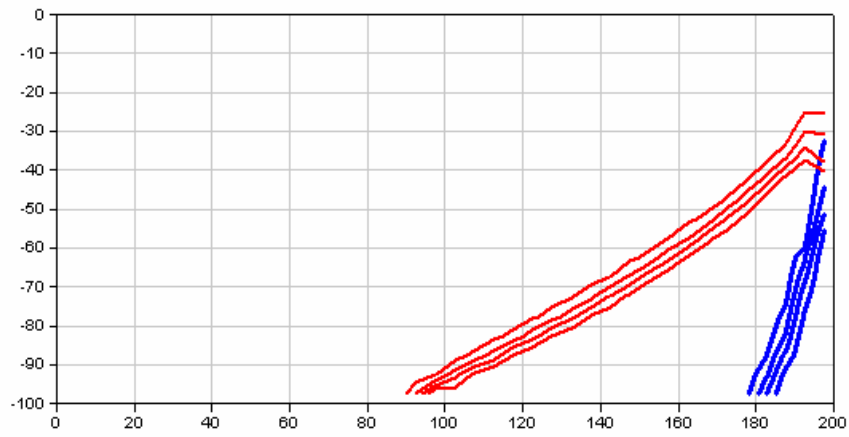


Figure 142 – Biseau salé de Henry en régime transitoire sans dispersion : salinité calculée par la méthode : TVD après 3 mn (isovaleurs bleues) et après 80 mn (rouges).

### 30.4 Exemple d'application n°4 : Écoulement plan monocouche en présence d'un chenal (régime transitoire)

#### 30.4.1 But de l'exemple n°4

Cet exemple montre qu'il est possible de faire un calcul avec prise en compte des effets de densité dans un domaine en monocouche horizontal, à condition que le système présente des variations latérales d'altitude (Toit, Substratum). Cet exemple est traité en régime transitoire.

#### 30.4.2 Description de l'exemple n°4

Il s'agit d'un système aquifère plan de 200 cm de long sur 100 cm de large et d'épaisseur 100 cm. À mi-ordonnée du système, un chenal de 10 cm de large parcourt le système d'ouest en est sur toute la largeur. Le substratum est alors à une profondeur de 200 cm au lieu de 100 cm. Un débit d'eau salée arrive par la gauche (sur toute la largeur). Ce débit est égal à  $260 \cdot 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$  par mètre d'ordonnée et par mètre d'épaisseur d'aquifère, soit un débit total de  $286 \cdot 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$ . Les calculs sont réalisés en régime transitoire : le transport est calculé en régime transitoire mais les calculs hydrodynamiques sont réalisés en régime permanent.

La simulation est réalisée pendant 15 pas de temps, de durées croissantes, qui représentent une durée cumulée égale à 80 minutes.

Les paramètres hydrodynamiques, et le maillage sont identiques à ceux de l'exemple n°2 mais l'aquifère est horizontal au lieu d'être en coupe verticale. La condition limite aval, à l'Est, est à charge imposée. Sa salinité extérieure est égale à 0 mais cette salinité ne joue pas. Le système est initialement rempli d'eau douce (salinité = 0). L'eau salée injectée à gauche se propage et, étant plus dense s'accumule dans le chenal.

#### 30.4.3 Paramètres du modèle

##### a) Description des paramètres

###### *Couplage :*

Itérations de couplage = 15 itérations de couplage  
Sous-relaxation de couplage = Pas de sous-relaxation de couplage

###### *Hydrodynamique :*

Régime = Régime Permanent  
Méthode = Gradients Conjugués : en charge d'eau douce  
Nombre maximal d'itérations = 3 itérations à chaque pas de temps  
Nombre d'itérations internes = 50

###### *Transport :*

Régime = Régime Transitoire  
Méthode = Différences Finies ;  
Résolution matricielle par la méthode Orthomin  
Nombre maximal d'itérations = Valeur par défaut (20 itérations)

### b) Extrait du fichier des « Paramètres Généraux » du modèle

La Figure 143 présente un extrait du fichier des « Paramètres Généraux » de MARTHE.

```
<< Écoulement Monocouche Horizontal : Transport Transitoire >>
<< Diffusion = 6.6E-6 : Calcul en Charge d'eau douce >>
#<V7.5># --- Fin du texte libre --- ; Ne pas modifier/retirer cette ligne
*** Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs ***
  0 = Épaisseur de la tranche de coupe (Unité de Coordonnée ou degrés)
  0 = État initial [0=Charge ; 1=Pression ; 2=Saturat ; etc] (Déf=Charge)
  = Orientation du maillage : 0=Standard ; 1=Coupe vertic

*** Initialisation avant calculs ***
/POROSITE/GRILLE N: =35
/H_TOPOGR/GRILLE N: =0
/H_SUBSTRAT/GRILLE N: =-100
/H_SUBSTRAT/MAILLE C= *L= 10:11 P= 1V= -200;
/CHARGE/GRILLE N: =0
/SALINITE/GRILLE N: =0
/SALIN_EXT/MAILLE C= 1L= *P= 1V= 25;
/SALIN_EXT/MAILLE C= 41L= *P= 1V= 0;
/CHARGE/GRILLE N: =0
/DEBIT/MAILLE C= 1L= *P= 1V= 13;
/DEBIT/MAILLE C= 1L= 10:11 P= 1V= 26;
/DEBIT/MAILLE C= 41L= *P= 1V= 9999;
/***** Fin d'Initialisation

*** Fin du fichier des Paramètres Généraux ***
```

Figure 143 – Écoulement plan monocouche avec un chenal :  
Extraits du fichier des « Paramètres Généraux ».

#### 30.4.4 Résultats de la modélisation

La Figure 144 et la Figure 145 présentent les iso-salinité ( $\text{kg/m}^3$ ) à la date 80 mn avec et sans effets de densité. On voit que sous l'effet de la densité l'eau salée, plus dense s'accumule dans le chenal où elle se déplace en priorité. On observe donc une avancée de la salinité nettement plus rapide dans le chenal.

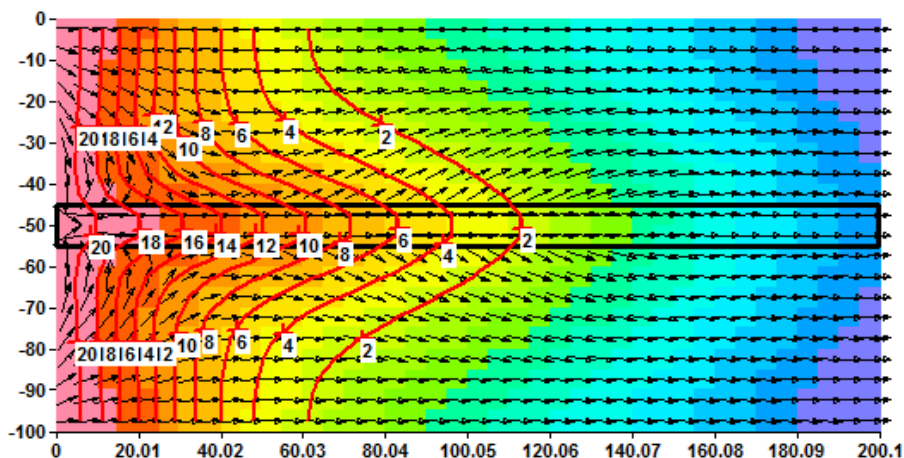


Figure 144 – Écoulement monocouche horizontal en présence d'un chenal. Salinité calculée après 80 mn : avec effets de densité.

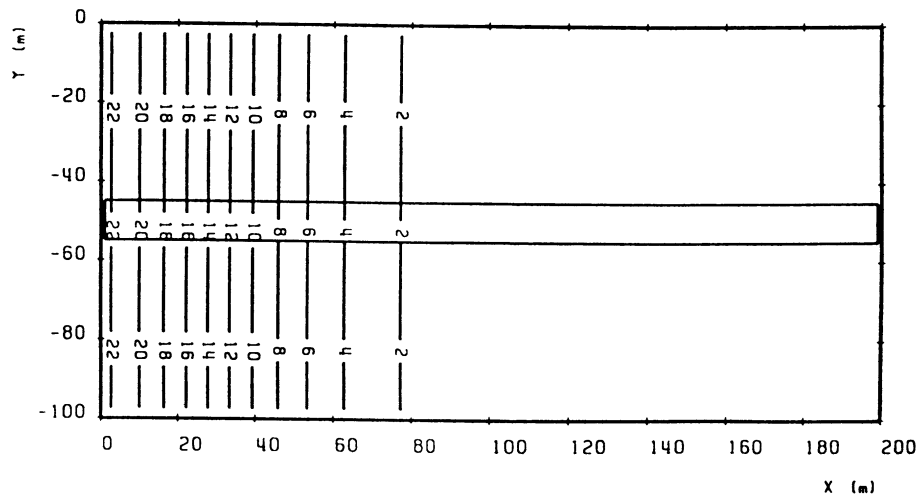


Figure 145 – Écoulement monocouche horizontal en présence d'un chenal. Salinité calculée après 80 mn : sans effets de densité.

### 30.5 Exemple d'application n°5 : Retour à l'équilibre dans un tube en U (en régime transitoire)

#### 30.5.1 But de l'exemple n°5

Cet exemple monodimensionnel compare les résultats du code MARTHE en régime transitoire à une solution analytique sans diffusion (Henry, 1962) citée par Pinder et Cooper (1970).

#### 30.5.2 Description de l'exemple n°5

Il s'agit d'un tube en U vertical, dont on ne modélise qu'une branche de 100 mètres de haut, par exemple la branche de gauche. La branche de droite est remplie d'eau salée jusqu'à son niveau supérieur qui est à l'altitude 0 où la charge est imposée. La branche de gauche, celle qui est calculée, présente initialement une surcharge d'eau douce **H0** de +2 mètres. Le tube est en équilibre hydrostatique avec donc une interface entre l'eau douce et l'eau salée située à la cote **ZI**.

À l'instant initial la surcharge d'eau douce baisse de **DH** = 1.5 mètre. Un nouvel équilibre est alors progressivement atteint.

Les *paramètres hydrodynamiques* sont les suivants :

Perméabilité	: K	=	1.0 10 <sup>-3</sup> m/s
Porosité	: ω	=	10 %
Diffusion	: D	=	0
Dispersivités	:	=	0
Hauteur de la colonne	:	=	100 m

*Maillage* :

Il est composé de 102 mailles de 1 m de haut (excepté les 2 mailles de chaque extrémité qui ont pour dimension respectivement 0.1 m et 0.95 m).

*Loi de densité* : Loi linéaire  $\rho = 1000 + 1 \cdot C$

*Conditions aux limites* :

Limite Haut: Salinité extérieure = 0, Charge imposée = 0.5 m

Limite Bas : Salinité extérieure = 25 kg/m<sup>3</sup>,  
Charge imposée = 0 m

Initialement l'altitude de l'interface **ZI0** est définie par :

$$ZI0 = - H0 / (d_S - 1) \quad \text{avec : } d_S = 1.025 ; \quad \text{soit } ZI = -80 \text{ m.}$$

Puis progressivement l'interface tend vers la nouvelle valeur :

$$ZI = - (H0 - DH) / (d_S - 1) \quad \text{soit : } ZI = -20 \text{ m.}$$

*Solution analytique :*

On peut montrer facilement, en écrivant l'équation de continuité du fluide que les charges réelles en tous points sont données par les expressions suivantes :

L'altitude **ZI** de l'interface est donnée par :

$$ZI = ZI0 + DH \cdot \frac{1}{ds - 1} \cdot [1 - \exp(-t/CT)] = -\frac{H0 - DH}{ds - 1} \cdot [1 - \exp(-t/CT)]$$

$$\text{Avec : } CT = \omega \cdot \frac{L}{K} \cdot \frac{1}{ds - 1}$$

L'expression du débit **Q**, obtenue à partir de la dérivée de ZI par rapport au temps, s'écrit :

$$Q = K \cdot \frac{DH}{L} \cdot \exp(-t/CT)$$

La charge **H** dans la zone où l'eau est douce est donnée par :

$$H = H0 - DH - z \cdot \frac{DH}{L} \cdot \exp(-t/CT)$$

La charge **H** dans la zone où l'eau est salée est donnée par :

$$H \cdot ds = -(z + L) \cdot \frac{DH}{L} \cdot \exp(-t/CT)$$

*Conditions initiales :*

La salinité initiale a été fixée d'après la position de l'interface.

Initialement le système est en équilibre hydrostatique avec la surcharge d'eau douce **H0**.

La charge est donc égale à **H0** jusqu'à l'interface, c'est-à-dire jusqu'à la profondeur -80 m. En dessous de cette profondeur la charge hydraulique réelle est constante et égale à 0.

Pour la modélisation, on a décalé l'altitude et la charge hydraulique de -2 m.

On obtient alors :

- Une charge uniforme égale à 0 m au-dessus de l'interface
- Et une charge uniforme, égale à -2 m, en dessous de l'interface.

À l'instant initial la surcharge est diminuée brutalement de DH, soit une charge  $H = -DH = -1.5$  dans la seule maille supérieure, ce qui provoque un choc brutal.

Les calculs sont réalisés en régime transitoire : transport en régime transitoire et calculs hydrodynamiques en régime permanent. La durée totale de simulation a été choisie égale à 5 fois la constante de temps **CT**. Cette durée a été découpée en 62 pas de temps de durées croissantes de 6667 s à 423 000 s.

### 30.5.3 Paramètres du modèle

Trois modélisations ont été réalisées : une modélisation en Différences Finies, une modélisation par la méthode des caractéristiques (MOC) adaptée à une interface abrupte et une modélisation par la méthode TVD adapté aux systèmes peu dispersifs.

*Hydrodynamique :*

Régime	=	Régime Permanent.
Méthode	=	Gradients Conjugués en charge d'eau douce.
Nombre maximal d'itérations	=	3 itérations à chaque pas de temps.
Nombre d'itérations internes	=	50

#### **a) Description des paramètres : Différences Finies**

*Couplage :*

Itérations de couplage	=	9 itérations de couplage.
Sous-relaxation de couplage	=	0.6

*Transport :*

Régime	=	Régime Transitoire.
Nombre de sous-pas de calcul	=	0
Méthode	=	Différences Finies ; Résolution matricielle par la méthode Orthomin.
Nombre maximal d'itérations	=	Valeur par défaut (20 itérations).

#### **b) Description des paramètres : Méthode MOC**

*Couplage :*

Itérations de couplage	=	1 itération (valeur imposée pour la méthode MOC)
Sous-relaxation de couplage	=	Pas de sous-relaxation de couplage

*Transport :*

Régime	=	Régime Transitoire
Nombre de sous-pas de calcul	=	4 sous-pas de calcul
Méthode	=	MOC
Masse d'une particule	=	0.003 kg

#### **c) Description des paramètres : Méthode TVD**

*Couplage :*

Itérations de couplage	=	5 itérations de couplage
------------------------	---	--------------------------

Sous-relaxation de couplage = Pas de sous-relaxation de couplage

*Transport :*

Régime = Régime Transitoire

Nombre de sous-pas de calcul = 4 sous-pas

Méthode = TVD ;  
Résolution matricielle par la méthode Orthomin

Nombre maximal d'itérations = Valeur par défaut (20 itérations)

### 30.5.4 Résultats de la modélisation

La Figure 146 et la Figure 147 présentent les résultats des calculs obtenus avec la méthode des Différences Finies. La Figure 146 présente l'évolution de la position de l'interface sur 3 modules logarithmiques du temps. La Figure 147 présente l'évolution du débit d'eau salée entrant en bas de la colonne et du débit d'eau douce sortant par le haut. La comparaison avec la solution analytique de Henry (1962) (symboles) montre que la simulation avec le code de calcul MARTHE (trait continu) est extrêmement précise. La comparaison des profils de salinité (non représentée) montre une assez forte dispersion numérique, ce qui est inévitable avec la méthode de transport en différences finies amont (schéma « donor cell »). En effet le nombre de Péclet est infini puisque la dispersion et la dispersivité sont toutes deux égales à 0.

La Figure 148 et la Figure 149 présentent les résultats des calculs obtenus avec la méthode MOC. La Figure 148 présente l'évolution de la charge à la profondeur 38.5 mètres. La Figure 149 présente l'évolution de la salinité au même point. La comparaison avec la solution analytique (trait continu) montre que la simulation avec le code de calcul MARTHE (trait interrompu) est extrêmement précise et ne présente aucune dispersion numérique.

Dans cet exemple, les calculs par la méthode MOC débutent avec 17 000 particules et se terminent avec 66 000 particules. Si le nombre de particules est significativement réduit la simulation fait apparaître beaucoup plus de fluctuations autour de la solution analytique.

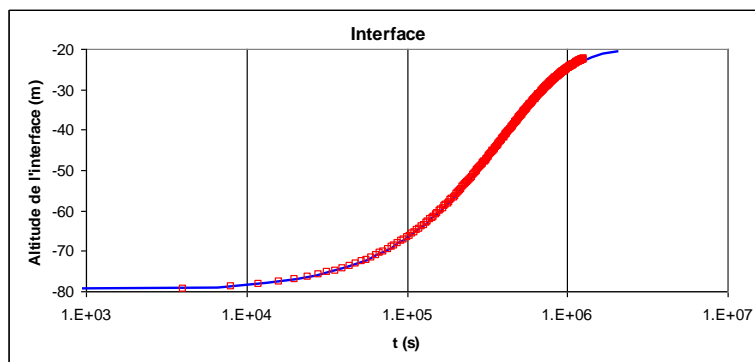


Figure 146 – Retour à l'équilibre dans un tube en U : Évolution de la position de l'interface (Symboles = solution analytique ; Trait continu = MARTHE Différences Finies).



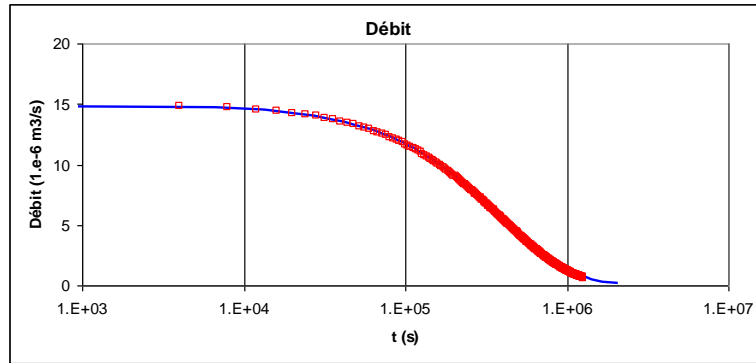


Figure 147 – Retour à l'équilibre dans un tube en U :  
Évolution du débit entrant en bas de la colonne, et sortant par le haut.  
(Symboles= solution analytique ; Trait continu = MARTHE Méthode Différences Finies).

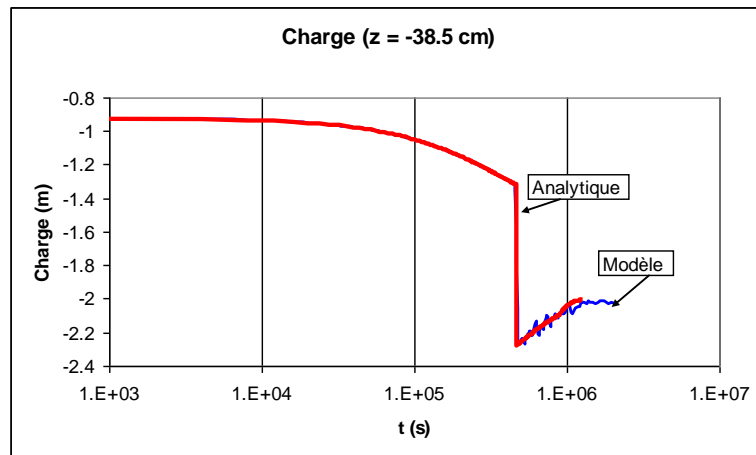


Figure 148 – Retour à l'équilibre dans un tube en U : Évolution de la charge à 38.5 m de profondeur.  
(Trait continu = Solution analytique ; - - - = MARTHE Méthode MOC).

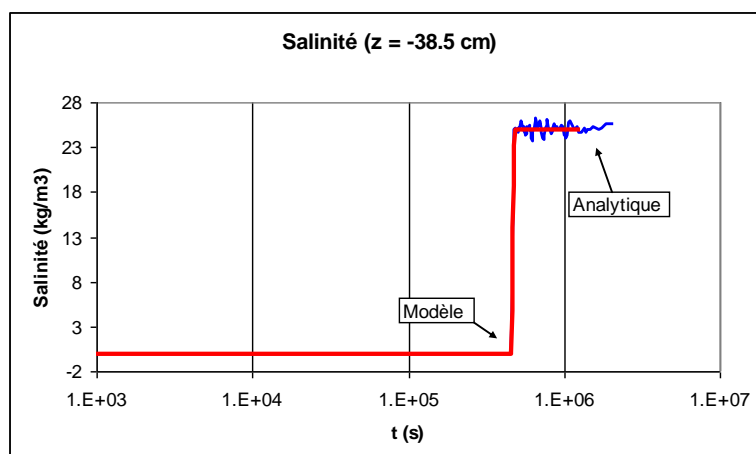


Figure 149 – Retour à l'équilibre dans un tube en U :  
Évolution de la salinité à 38.5 m de profondeur.  
(Trait continu = Solution analytique ; - - - = MARTHE Méthode MOC).

La Figure 150 et la Figure 151 présentent les résultats des calculs obtenus avec la méthode TVD. La Figure 150 présente l'évolution de la charge à la profondeur 38.5 mètres. La Figure 151 présente l'évolution de la salinité au même point. La comparaison avec la solution analytique (trait continu) montre une simulation précise avec MARTHE par la méthode TVD (trait interrompu), avec peu dispersion numérique, malgré un nombre de Péclet infini.

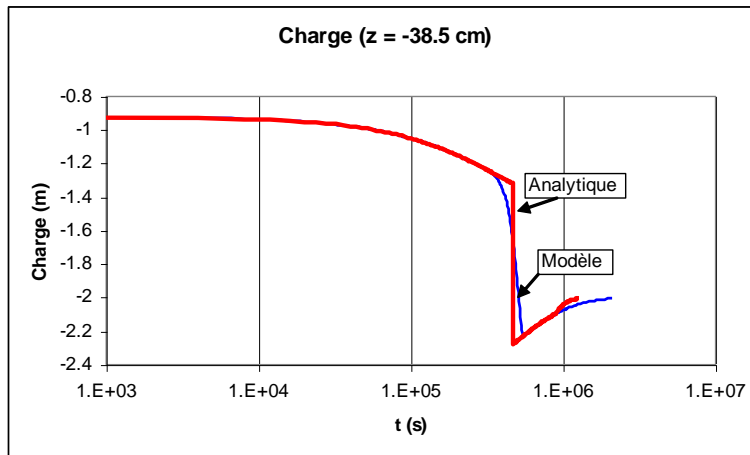


Figure 150 – Retour à l'équilibre dans un tube en U : évolution de la charge à 38.5 mètres de profondeur. (Trait continu = Solution analytique ; - - - = MARTHE Méthode TVD).

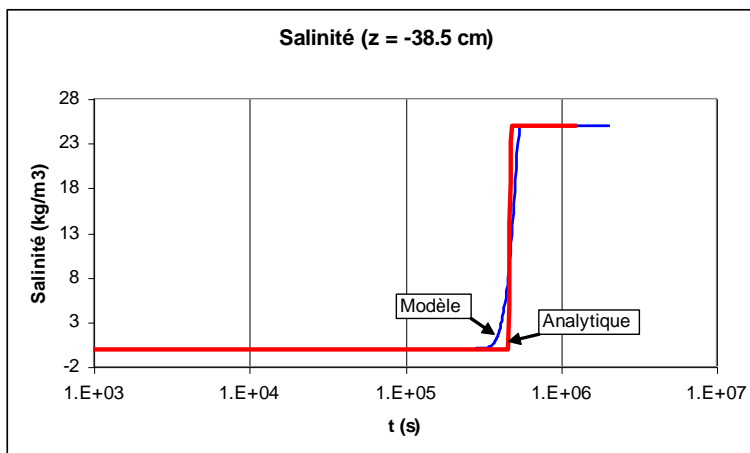


Figure 151 – Retour à l'équilibre dans un tube en U : Évolution de la salinité à 38.5 m de profondeur (Trait continu = Solution analytique ; - - - = MARTHE Méthode TVD).

### 30.6 Exemple d'application n°6 : Dôme de sel (test international HYDROCOIN)

#### 30.6.1 But de l'exemple n°6

Cet exemple en coupe verticale présente la modélisation des écoulements au-dessus d'un dôme de sel générant de très fortes densités donc un couplage très fort. Cet exemple fait partie du test international HYDROCOIN, level 1, case 5 (OECD, 1988). Il est inspiré du site de Gorleben situé en Allemagne. Les résultats de MARTHE dans ce cas complexe sont comparés à ceux obtenus par d'autres laboratoires étrangers.

#### 30.6.2 Description de l'exemple n°6

Il s'agit d'un système aquifère, de 900 m de large sur 300 m de profondeur, modélisé en coupe verticale. Au fond du système, sur le tiers central ( $x=300$  m à  $x=600$  m), se trouve un dôme de sel qui engendre une saumure sursaturée de masse volumique imposée à  $1200 \text{ kg/m}^3$  (densité 1.2). Les limites ouest et est sont imperméables. Sur la limite supérieure, de l'eau douce rentre sous l'effet d'une pression imposée variant linéairement de  $10^{+5}$  Pa (10.19 m d'eau) à l'ouest jusqu'à 0 Pa à l'Est. Sous l'effet de l'écoulement, le fluide dense remonte, et si la diffusion est suffisamment forte on observe des courants de convection. Deux variantes sont simulées : une variante avec une forte diffusion et une variante avec une faible dispersion.

Les paramètres *hydrodynamiques et hydrodispersifs* sont les suivants :

Perméabilité	: K	=	$9.81 \cdot 10^{-6} \text{ m/s}$
Porosité	: $\omega$	=	20 %

*Exemple avec une forte diffusion :*

Diffusion	: D	=	$5 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
	: Soit : $D \cdot \omega$	=	$10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
Dispersivités	:	=	0

*Exemple avec une faible dispersion :*

Diffusion	: D	=	0
Dispersivités	: $\alpha_L$	=	20 mètres.
	: $\alpha_T$	=	2 mètres.

Pas d'entraînement de la salinité par convection sur la limite du bas.

*Maillage :*

Il est composé de 45 lignes de 45 colonnes. Les colonnes du maillage ont toutes 20 mètres de dimension. Les lignes ont des hauteurs variables, croissantes de 1 m en haut et en bas, jusqu'à 8 mètres pour les 27 lignes centrales.

*Loi de densité* : Loi linéaire  $\rho = 1000 + 1 \times C$

Salinité maximale :  $200 \text{ kg/m}^3$ , soit une densité de 1.2

*Conditions aux limites :*

Limite Haut : Salinité extérieure = 0  
: Salinité : 0 imposée de  $x = 0$  m à  $x = 200$  m  
: Pression imposée :  $10^{+5}$  Pa à l'Ouest -> 0 Pa à l'Est.

Limite Bas : Charge : limite étanche  
: Salinité imposée :  $200 \text{ kg/m}^3$  de  $x = 300$  à  $x = 600$   
: Pour le schéma avec faible dispersion, on a divisé par 100 la perméabilité dans la zone à salinité imposée pour ne pas avoir d'entraînement par convection.

### 30.6.3 Paramètres du modèle

#### Couplage :

- Forte diffusion :

Nombre d'itérations de couplage = 240 itérations de couplage  
Sous-relaxation de couplage = 0.1  
Méthode de résolution = En charge hydraulique réelle

- Faible dispersion :

Nombre d'itérations de couplage = 160 itérations de couplage  
Sous-relaxation de couplage = 0.02  
Méthode de résolution = En charge hydraulique d'eau douce

Remarque : Il est nécessaire d'utiliser un nombre d'itérations de couplage beaucoup grand que dans les exemples précédents : d'une part puisque le calcul est en régime permanent mais surtout parce que la densité maximale de 1.2 induit un très fort couplage, ce qui n'était pas le cas avec la densité de 1.025 de l'eau de mer des autres exemples.

#### Hydrodynamique :

Régime = Régime Permanent  
Méthode = Gradients Conjugués  
Nombre maximal d'itérations = 3 itérations à chaque pas de temps  
Nombre d'itérations internes = 50

#### Transport :

Régime = Régime Permanent  
Méthode = Différences Finies ;  
Résolution matricielle par la méthode Orthomin  
Nombre maximal d'itérations = 60 itérations

### 30.6.4 Résultats de la modélisation

- Forte diffusion :

Les calculs en régime permanent convergent parfaitement ; le flux massique sortant du système est égal à  $4.66 \cdot 10^{-4}$  kg/s par mètre de tranche de coupe.

- Faible dispersion :

Les calculs en régime permanent convergent un peu plus difficilement. Avec les paramètres choisis le bilan global est obtenu à 1.1 % près. Le flux massique sortant est égal à  $5.43 \cdot 10^{-4}$  kg/s par m de tranche de coupe.

La Figure 152 et la Figure 153 présentent le profil de salinité calculée. Les isovaleurs sont normées par rapport à la salinité maximale (c'est-à-dire que l'isovaleur 0.2 correspond à une salinité de  $40 \text{ kg/m}^3$ ). La Figure 152 correspond au schéma avec une forte diffusion. Le champ de salinité calculé avec le code de calcul MARTHE (trait continu) est comparé à celui obtenu (traits interrompus) par Herbert (1988) avec une méthode totalement différente. Il apparaît que la correspondance entre les 2 simulations est très bonne.

Cette figure montre que l'écoulement fait apparaître 2 cellules de convection tournant en sens opposés.

La Figure 153 correspond au schéma avec une faible dispersion. Le champ de salinité calculé avec le code MARTHE (trait continu), est comparé à celui obtenu (traits interrompus) par Oldenburg et Pruess (1995), en régime transitoire avec le code de calcul TOUGH2. On note une bonne correspondance entre les 2 simulations. Cet écoulement, avec une faible dispersion ne fait pas apparaître de cellules de convection.

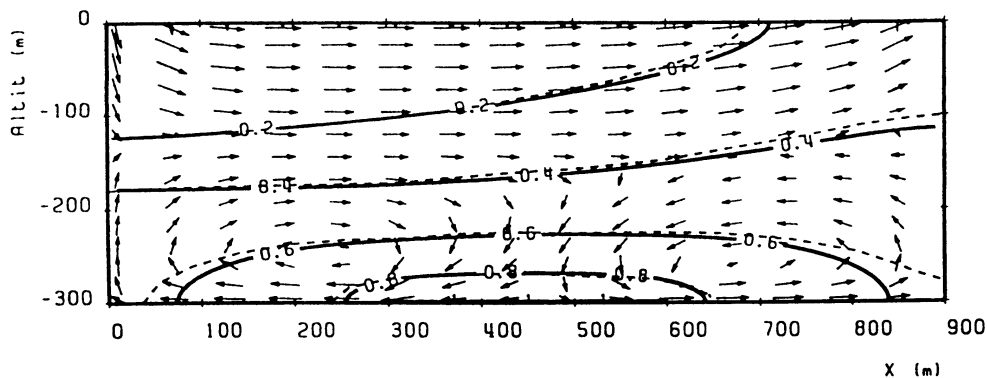


Figure 152 – Dôme de sel avec forte diffusion : Salinité calculée avec le code de calcul MARTHE (trait continu) comparée à celle obtenue (traits interrompus) par Herbert (1988).

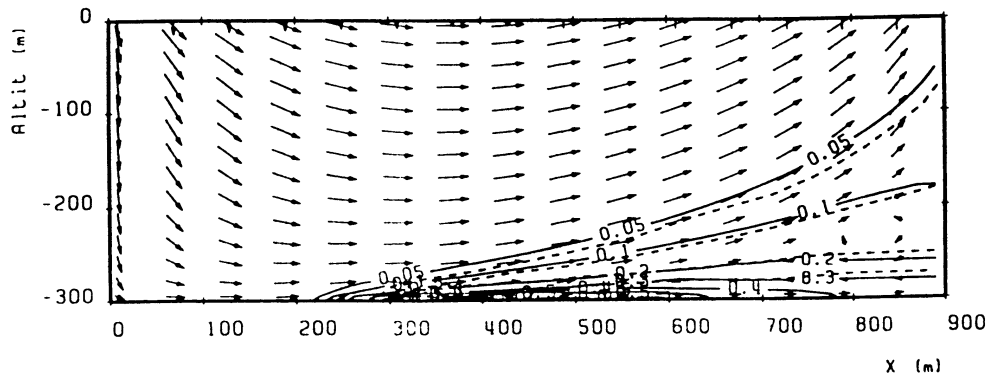


Figure 153 – Dôme de sel avec faible dispersion : Salinité calculée avec le code MARTHE (trait continu) comparée à celle obtenue (traits interrompus) par Oldenburg et Pruess (1995).

### 30.7 Exemple de transport n°7 : Injection d'un liquide dense en surface d'un milieu poreux saturé.

#### 30.7.1 But de l'exemple n°7

Cet exemple permet d'illustrer les possibilités du code en simulation de transport avec effets densitaires.

#### 30.7.2 Description de l'exemple n°7

On injecte un produit plus dense que l'eau en surface d'un aquifère initialement au repos.

Le produit dense descend verticalement, en se mélangeant peu à l'eau, et s'étale sur le substratum. La modélisation est effectuée en coupe verticale avec prise en compte de la densité. Le domaine étudié est formé d'un parallélépipède de 150 cm de large sur 100 cm de haut (avec 100 cm de tranche de coupe).

- Paramètres hydrodynamiques
  - Perméabilité  $K = 10^{-2}$  m/s.
  - Gradient horizontal de charge hydraulique : 0.01 cm sur 145 cm, soit  $6.9 \cdot 10^{-5}$ , c'est-à-dire quasi nul.
  - Régime hydraulique : permanent.
- Paramètres de transport
  - Porosité :  $\omega = 35$  %
  - Dispersion :  $D_m = \alpha_L = \alpha_T = 0$
  - Débit massique (dense) :  $QM = 5.25 \cdot 10^{-2}$  kg/mn (sur une surface de 5 cm de large par 100 cm de profondeur, soit  $0.05 \text{ m}^2$ ).
  - Lieu d'injection : en surface du domaine à l'abscisse  $x = 72.5$  cm.
  - Densité : la masse volumique  $\rho$  du fluide injecté est calculée à partir de la salinité  $S$  du fluide dense, selon la relation  $\rho = 1000 + S$  (en  $\text{kg/m}^3$ ).

#### 30.7.3 Modélisation avec le code de calcul MARTHE

##### **a) Maillage et découpage du temps**

Le maillage est formé de 600 mailles carrées de 5 cm de côté. Le transport se fait pendant 16 pas de temps : les 10 premiers de 2 mn, le 11<sup>ème</sup> et le 12<sup>ème</sup> de 5 mn, et les 4 suivants de 10 mn, soit au total 70 mn.

Le champ de salinité a été calculé par la méthode TVD, par la méthode MOC et par la méthode DF.

Avec les méthodes TVD et DF, on réalise à chaque pas de temps 15 itérations de couplage de calcul de la densité et de calcul de la charge hydraulique.

Avec la méthode MOC, les pas de temps sont découpés en 15 sous-pas de temps et on réalise uniquement 1 seule itération de couplage.

Avec la méthode MOC, la masse de chaque particule est égale à  $10^{-4}$  kg. Au cours des 10 premiers pas de temps (20 mn), la masse totale injectée est de 1.05 kg, soit 10500 particules.

### b) Résultat des simulations

Le champ de salinité après 50 mn est représenté sur la Figure 154. Les tracés représentent les isovalues de salinité 10, 20 et 30  $\text{kg/m}^3$ .

Pour chacune des méthodes de calcul, ces 3 isovalues sont très proches les unes des autres, ce qui montre que le liquide dense se mélange peu à l'eau.

Les calculs par la méthode TVD et la méthode MOC montrent des comportements assez proches (plus abrupts avec la méthode MOC, mais avec des oscillations). Le calcul par la méthode DF montre un certain mélange dû à la dispersion numérique. Un calcul a également été fait, en injectant au fond de l'aquifère un liquide plus léger (analogue à un LNAPL). Les résultats obtenus sont absolument symétriques.

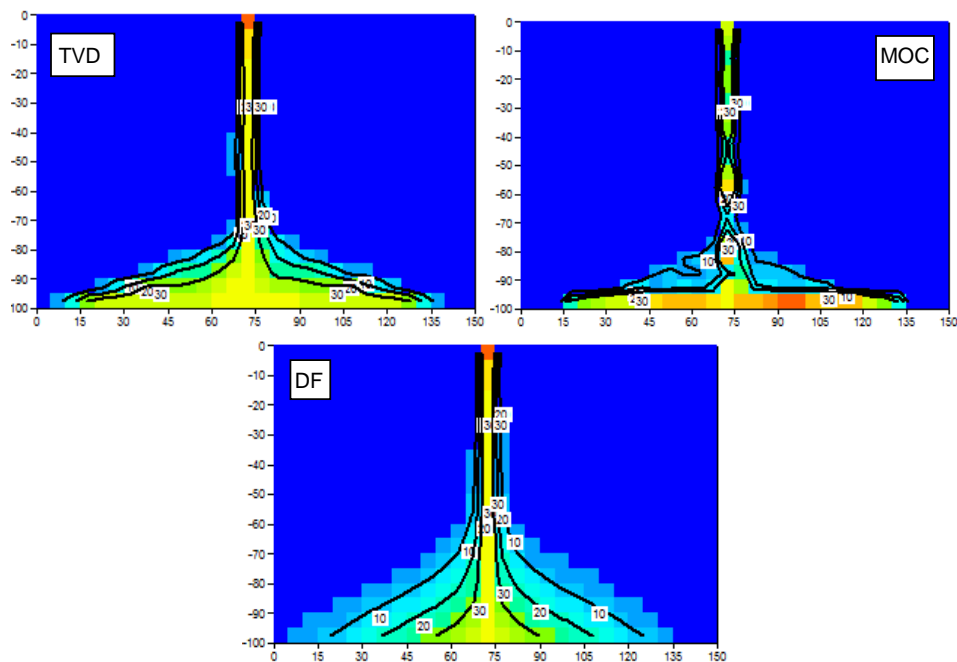


Figure 154 – Injection d'un liquide dense non miscible.  
Salinité calculée après 50 minutes d'injection : Méthodes TVD, MOC et DF.



### 30.8 Exemple d'application n°8 : Fluide léger en Zone Non Saturée

#### 30.8.1 But de l'exemple n°8

Cet exemple en coupe verticale présente la modélisation d'un épandage d'un fluide plus léger que l'eau à la surface d'un sol Non Saturé situé au-dessus d'une nappe souterraine. L'intérêt de cet exemple est de montrer comment modéliser un fluide léger en Zone Non Saturée (ZNS). Cet exemple ressemble à un écoulement diphasique, mais il en diffère cependant, d'une part puisque l'eau et le fluide plus léger ont les mêmes perméabilités, d'autre part parce qu'il n'y a pas de « suction » entre les 2 fluides (pas de différence de pression).

#### 30.8.2 Description de l'exemple n°8

Il s'agit d'un système aquifère peu profond, de 50 mètres de large avec une zone non saturée de 0.5 à 0.8 mètres d'épaisseur. Le système est modélisé en coupe verticale sur une épaisseur de 1 mètre. À 18 mètres en aval de la limite ouest, se produit un épandage d'un fluide de densité 0.8 (masse volumique  $800 \text{ kg/m}^3$ ). Sous l'effet de la suction de la ZNS ce fluide est entraîné vers le bas ou il tend à flotter à la surface de la zone saturée, c'est-à-dire à la surface de la nappe.

Les paramètres *hydrodynamiques et hydrodispersifs* sont les suivants :

Perméabilité à saturation :  $K = 10^{-2} \text{ m/s}$

Diffusion :  $D = 0$

Dispersivités :  $= 0$

*Lois en Zone Non Saturée :*

Porosité :  $\omega = 25 \%$

Teneur en eau résiduelle :  $\theta_r = 5 \%$

Loi de perméabilité :  $K(\text{saturation})$  de type « Puissance » ; exposant = 4

Loi de rétention : Loi Homographique; exposant = 0.25

: Suction à  $\frac{1}{2}$  saturation = 0.3 m.

*Maillage :*

C'est un maillage carré de 11 lignes de 0.1 m de haut et 21 colonnes de 2.5 m de large. L'altitude décroît de 0 m à -1 m.

*Loi de densité* : Loi linéaire  $\rho = 1000 - 1 \times C$

Salinité injectée :  $200 \text{ kg/m}^3$ , soit une densité de 0.8

*Conditions aux limites :*

Limite Gauche : Charge imposée à -0.5 m (amont).

Limite Droite : Charge imposée à -0.8 m (aval) : altitude -0.8 m à -1 m.

: Surface de suintement au-dessus.

Limite Bas : Limite étanche.

Limite Haut : Initialement étanche.

: Après l'initialisation en régime permanent, on impose une charge hydraulique égale à -0.55 m et une salinité extérieure égale à  $200 \text{ kg/m}^3$  donc une densité égale à 0.8.

*Conditions initiales :*

Le système a été initialisé en régime permanent (avant injection de fluide). La limite de saturation est alors située entre -0.5 m et -0.8 m de profondeur.

On a alors fixé la succion à -0.55 dans la maille d'injection ce qui correspond à un débit injecté (variable au cours du temps) de l'ordre de  $2 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$  (par mètre de coupe verticale). Le débit amont est de l'ordre de  $2.4 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$ .

Les calculs sont réalisés en régime transitoire : transport en régime transitoire et calculs hydrodynamiques en régime permanent. La simulation est réalisée sur une période totale de 5000 mn (3.5 jours environ). Comme les calculs sont réalisés en Zone Non Saturée, les pas de temps de calcul du code MARTHE sont calculés automatiquement pour assurer une convergence hydrodynamique optimale. Le pas de temps est contraint à être compris entre 0.05 mn et 1 mn.

### 30.8.3 Paramètres du modèle

*Couplage :*

Itérations de couplage = 1 itération (valeur imposée pour la méthode MOC)  
Sous-relaxation de couplage = Pas de sous-relaxation de couplage.  
Méthode de résolution = En charge hydraulique d'eau douce.

*Hydrodynamique :*

Régime = Régime Transitoire.  
Méthode = Gradients Conjugués.  
Nombre maximal d'itérations : (50 itérations internes).  
Permanent pour l'état Initial = 20 itérations.  
Régime transitoire suivant = 3 itérations.

*Transport :*

Régime = Régime Transitoire.  
Méthode = Méthode MOC.  
Masse d'une particule = 0.01 kg.

### 30.8.4 Résultats de la modélisation

La Figure 155 présente les isovaleurs de la salinité calculée après 5000 mn. Les isovaleurs sont exprimées en % de la salinité maximale (c'est-à-dire que l'isovaleur 50 % correspond à une salinité de  $100 \text{ kg/m}^3$ , densité = 0.9). Il apparaît que l'interface est abrupte, comme le permet la méthode choisie. On voit bien que le fluide léger s'écoule en flottant à la surface de la limite de saturation en eau de la nappe.

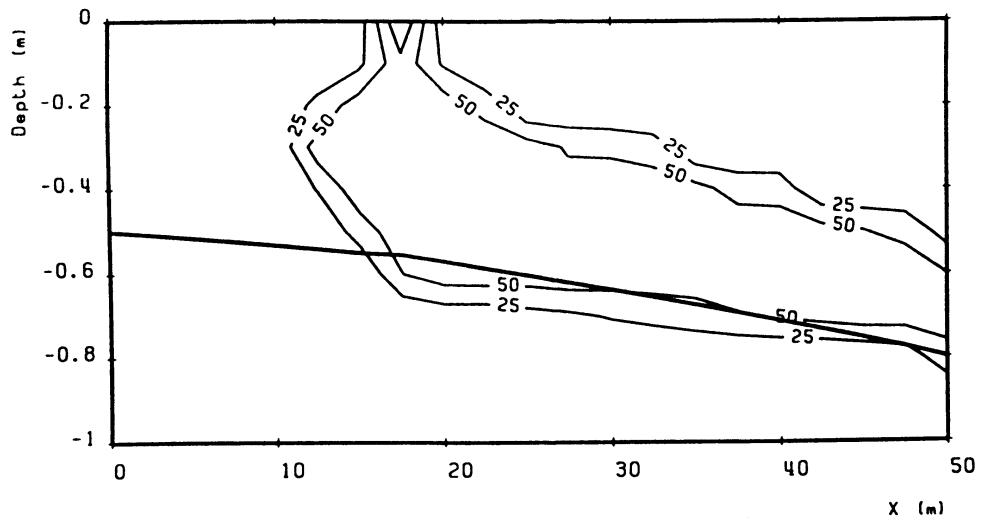


Figure 155 – Épannage d'un fluide léger et percolation à travers la Zone Non Saturée.  
Salinité calculée après 5000 mn.

### 30.9 Exemple d'application n°9 : Prise en compte des effets de la densité sans calcul de la salinité

#### 30.9.1 But de l'exemple n°9

Cet exemple en coupe verticale montre comment on peut prendre en compte les effets d'un champ de salinité connu, sans calcul de ce champ. Dans un schéma sans prise en compte du champ de salinité il n'est pas possible avec MARTHE de fixer dans des conditions aux limites en pression. Des conditions aux limites en pression peuvent cependant être utiles, par exemple dans un système de galeries à la pression atmosphérique. Un calcul hydrodynamique avec prise en compte des effets de la densité, sans calcul de la salinité, peut être une manière détournée d'introduire des conditions initiales, ou des conditions limites, en pression.

#### 30.9.2 Description de l'exemple n°9

Il s'agit du même système en coupe que dans l'exemple n°1 : le biseau salé de Henry en régime permanent. La salinité est supposée connue. On lui donne une répartition approximation triangulaire, un peu similaire à un biseau salé. Pour illustrer l'utilisation d'une autre loi, c'est la relation de Schlumberger qui a été choisie pour relier la densité à la salinité.

Les paramètres *hydrodynamiques* sont les suivants :

*Loi de densité* : Relation de Schlumberger (Vandenbeusch 1976, révisée)

*Conditions aux limites* :

Limite ouest : Débit d'eau douce =  $33 \cdot 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$  sur chaque maille  
Limite est : Charge imposée = 0 sur chaque maille

*État initial* :

Salinité : 0 uniformément, sauf  $30 \text{ kg/m}^3$  dans un triangle situé à l'Est  
Hydrodynamique : Charge hydraulique = 0 uniformément.

#### 30.9.3 Paramètres du modèle

##### a) Description des paramètres

*Couplage* : Pas de couplage  
*Hydrodynamique* : Régime Permanent (identique à l'exemple n°1)  
*Transport* : Pas de transport

## b) Extrait du fichier des « Paramètres Généraux » du modèle

La Figure 156 présente un extrait du fichier des « Paramètres Généraux » de MARTHE.

```
<< Prise en compte des Effets de la Densité sans calcul de la salinité >>
#<V7.5># --- Fin du texte libre --- ; Ne pas modifier/retirer cette ligne
```

```
*** Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité ***
  0 = Nombre maxi d'itérations pour *Couplage* Densité/Pression ou Viscosité/Tempér
  0 = Coefficient de Relaxation pour Couplage Densité/Pression, etc. [Déf=0 => 1]
  0 = Nombre maxi d'itérations pour *Transport* Salinité/Chaleur, etc [Déf=0 => 20]
    = Méthode de Transport [0=Diff_Finies ; 1=Random Walk ; 2=MOC ; 3=TVD]
    = Diffusion moléculaire (m2/s) [* = Spatialisée]
```

```
*** Salinité, Densité ***
  Douce = Effet de la Densité (0=Non ; 1=Charge ; 2=Pression ; 3=Charge d'eau Douce)
  Schlumb = Loi de Densité(Salinité) (0=Non ; 1=Linéaire ; 3=Schlumberger_VDB[Salinité])
  0 = Dérivée de la loi Densité = F(Salinité) si loi Linéaire [Déf=0 => 0.7]
  0 = Variation moy. de Salinité entre 2 itérat pour convergence [Déf=0 => 1e-8]
    = Régime du Transport de Salinité [0=Transitoire ; 1=Permanent]
=> 0 = Calcul (Transport) de la Salinité
```

```
*** Initialisation avant calculs ***
/POROSITE/GRILLE N: =35
/CHARGE/GRILLE N: =0
/SALINITE/GRILLE N: =0
/SALINITE/MAILLE C= 39:41 L= 1P= 11V= 30;
/SALINITE/MAILLE C= 38:41 L= 1P= 12V= 30;
/SALINITE/MAILLE C= 37:41 L= 1P= 13V= 30;
/SALINITE/MAILLE C= 36:41 L= 1P= 14V= 30;
/SALINITE/MAILLE C= 35:41 L= 1P= 15V= 30;
/SALINITE/MAILLE C= 34:41 L= 1P= 16V= 30;
/SALINITE/MAILLE C= 33:41 L= 1P= 17V= 30;
/SALINITE/MAILLE C= 31:41 L= 1P= 18V= 30;
/SALINITE/MAILLE C= 29:41 L= 1P= 19V= 30;
/SALINITE/MAILLE C= 26:41 L= 1P= 20V= 30;
/CHARGE/GRILLE N: =0
/DEBIT/MAILLE C= 1L= 1P= *V= 33;
/DEBIT/MAILLE C= 41L= 1P= *V= 9999;
/*****/*****/ Fin d'Initialisation
```

Figure 156 – Prise en compte de la salinité, sans transport de la salinité  
Extraits du fichier des « Paramètres Généraux ».

### 30.9.4 Résultats de la modélisation

Le calcul s'effectue instantanément. On demande la sauvegarde des champs :

- De charge réelle
- De masse volumique de l'eau
- De salinité (pour contrôle)
- D'amplitude de la vitesse.

La masse volumique calculée par la relation de Schlumberger, correspondant à la salinité de 30 kg/m<sup>3</sup>, est égale à 1020.72 kg/m<sup>3</sup>.

La Figure 157 montre le fichier des pas de temps avec la sélection de ces sauvegardes

La Figure 158 montre le champ de charge réelle calculée, avec visualisation des trajectoires.

```

Biseau Henry : Maillage Fin : *Permanent* : Diffus = 6.6E-6 : H Douce
#<V7.5># --- Fin du texte libre --- ; Ne pas modifier/retirer cette ligne
*** Début de la simulation à la date : 0; ***
/CHARGE/EDITION I= 1;
/SALINITE/EDITION I= 1;V= 0;R= 0;M= 0;
/MASSE_VOLUMIQ/EDITION I= 1;
/VITESS_AMPLIT/EDITION I= 1;
/*****/*****/ Fin de ce pas
*** : : Fin de la simulation : ; ***
    
```

Figure 157 – Utilisation d’un champ de salinité, sans transport. Fichier des pas de temps.

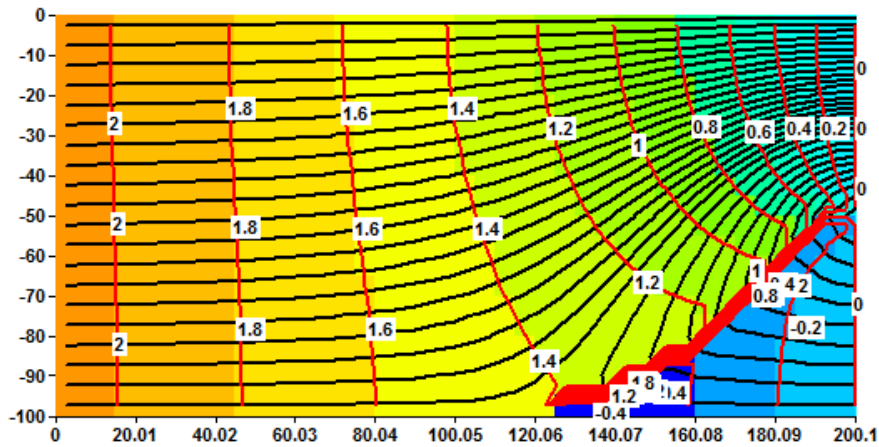


Figure 158 – Salinité imposée, sans transport : visualisation du champ de charge calculée  
 En rouge : les isovaleurs de charge réelle, en noir les trajectoires calculées.

## 31 Incompatibilités

Un certain nombre d'options ou d'actions sont incompatibles, impossibles ou fortement déconseillées. La liste de ces incompatibilités ou impossibilités est la suivante :

- Utilisation de la méthode TVD ou MOC en régime permanent : ces méthodes sont disponibles uniquement pour le transport en régime transitoire. En régime permanent utiliser la méthode DF (Différences Finies).
- Utilisation de la méthode TVD dans un maillage contenant des sous-maillages gigognes : cette méthode de transport nécessite de déterminer la maille amont, ce qui n'est pas possible avec les maillages gigognes. En effet avec des maillages gigognes, une maille peut avoir plusieurs mailles amont.
- Faire du transport dans un maillage comportant des « Zones Équipotentielles ». Dans une Zone Équipotentielle les différentes mailles qui sont au même potentiel (à la même charge hydraulique) sont isolées les unes des autres. Dans ce cas il ne faut pas utiliser de « Zone Équipotentielle » mais introduire une forte perméabilité pour avoir une charge hydraulique quasi uniforme dans toute la zone.
- Faire du transport dans un maillage comportant des « épontes semi-perméables » (fonctionnalité obsolète). Dans les mailles d'une éponte semi-perméable on ne calcule pas de charge hydraulique. Par ailleurs il n'y a pas de porosité définie dans ces zones. Il n'est donc pas possible d'avoir de transport dans ces épontes semi-perméables qui sont donc « court-circuitées ». (Ceci ne concerne pas les « épontes thermiques »).
- Faire du transfert thermique, ou du transport de salinité, dans un domaine à double porosité. La porosité immobile est utilisée uniquement pour le transport de masse classique (variable « CONCENTR »).
- Faire du transport avec un coefficient de retard avec un schéma de calcul en « Zone Non Saturée ». Il faut alors utiliser un coefficient «  $Rho \cdot kd$  ».
- Faire un calcul de transport de masse en régime permanent, sans aucune maille à concentration imposée : le résultat peut être indéfini.
- Faire un calcul de transfert thermique en régime permanent, sans aucune maille à température imposée : le résultat peut être indéfini.
- Faire un calcul de transfert thermique dans une phase de gaz. Les calculs de transfert thermique sont effectués uniquement dans la phase eau.

## 32FAQ

Colloïdes ? : Est-il possible de simuler le transport de colloïdes ? Non.

Gaz ? : Est-il possible de simuler du transport de masse, ou de chaleur dans les gaz ? Non.  
Dans cette version de MARTHE le transport de masse ou de chaleur est simulé uniquement dans la phase liquide. Dans la phase aqueuse uniquement dans les calculs diphasiques.

Transport en maillage radial ? : Oui le calcul de transport est possible en maillage radial.

Transport réactif ? : Oui, dans certaines versions de MARTHE, il est possible de simuler du transport réactif couplé avec les moteurs géochimiques PHREEQC (USGS) ou REACT (de TOUGHREACT du LBNL Berkeley). Un rapport spécifique décrit cette fonctionnalité.

Transport en ZNS ? : Oui le transport est possible avec un schéma de « Zone Non Saturée » ZNS.

Viscosité en fonction de la salinité ? : Non. Il est possible uniquement de prendre en compte l'influence de la température sur la viscosité du fluide. Cependant excepté pour des solutions très salines, l'influence de la salinité sur la viscosité est faible (environ 5 % pour de l'eau de mer avec 35 g/L de NaCl).



## 33 Conclusions

Ce rapport a montré la capacité du code de calcul MARTHE à modéliser en 3D :

- Le transport de masse en milieu poreux saturé ou non saturé, en régime permanent ou transitoire.
- Le transport de masse à double porosité avec cinétique d'échange entre une phase mobile et une phase immobile.
- Le transfert thermique avec influence de la température sur la densité et la viscosité de l'eau.
- Le transport de salinité avec prise en compte des effets densitaires.

D'autres fonctionnalités du code de calcul MARTHE sont disponibles, en particulier :

- La calibration automatique des paramètres avec analyse de sensibilité ;
- Les écoulements de fluide gazeux ;

Les fonctionnalités suivantes sont également disponibles :

- Écoulements en Zone Non Saturée ; Rapport [BRGM/RP-64495-FR](#) (Thiéry 2015c)
- Écoulements diphasiques Eau - Gaz ;
- Écoulements diphasiques Eau - Hydrocarbure ;
- Couplage géochimique (dans certaines versions), [Rapport BRGM/RP-65010-FR](#) (Thiéry, 2015d).

Pour mettre en œuvre ces fonctionnalités, il est conseillé de lire le « [Didacticiel du code de calcul MARTHE v7.5](#) », rapport [BRGM/RP-64997-FR](#) (Thiéry, 2015a).



## 34 Références bibliographiques

- Avdonin, N.A. (1964) – Some formulas for calculating the temperature field of a stratum subject to thermal injection: *Meft'i Gaz*, Vol. 7, n°3, pp. 37-43 (*in Russian*).
- Butler, R.M. (1983) – Lectures on thermal recovery. Course notes, EMCH-647 Thermal Recovery, Chemical Engineering, University of Calgary, Sept.-Dec. 1983.
- Cleary, R.W. (1978) – Analytical models for groundwater pollution and hydrology. Rep. 78-WR-15 Dep. of Civ. Eng. Princeton Univ., Princeton N.J.
- Coats, K.H. and Smith, B.D. (1964) - Dead-end pore volume and dispersion in porous media. *SPEJ* 4, pp. 73–84.
- Cooley, R.L. (1983) - Some new procedures for numerical solution of variably saturated flow problems. *Water Resour. Res.*, vol. 19, 5, p. 1271-1285.
- Fletcher, C.A.J. (1991) - Computational techniques for fluid dynamics, volume 1, 2d ed.: New York, Springer-Verlag, 401 p.
- Frind E. O. (1982) - Simulation of long-term transient density dependent transport in groundwater. *Adv. Water Resources*, vol. 5 pp 73-97.
- Galeati G., Gambolati G., Neuman S. P. (1992) - Coupled and partially coupled Eulerian-Lagrangian model of freshwater-seawater mixing. *Water Resour. Res.*, vol. 28 n°1 pp 149-165.
- Gelhar L.W. and Collins M.A. (1971) - General analysis of longitudinal dispersion in non-uniform flow. *Water Resour. Res.*, vol. 7 (6), p. 1511-1521.
- Grove D.B. and Stollenwerk K.G. (1984) - Computer model of one-dimensional equilibrium-controlled sorption processes. US Geological Survey Water Resource Investigations Report 84-4059, 58 p.
- Henry H. R. (1962) - Transitory movements of the saltwater front in an extensive artesian aquifer. Effects of dispersion on salt encroachment in coastal aquifers. *U.S. Geol. Surv. Prof. Pap.*, 450-B, B87-B88.
- Henry H. R. (1964) - Effects of dispersion on salt encroachment in coastal aquifers. *U.S. Geol. Surv. Water Supply Pap.*, 1613-C, pp. C71-C84.
- Herbert A. W., Jackson C. P., Lever D. A. (1988) - Coupled Groundwater Flow and Solute Transport with Fluid Density strongly dependent upon Concentration. *Water Resour. Res.*, vol. 24, 2, 1781-1795.
- Kolditz, O. et Shao, H. (2010) – OpenGeoSys, Developer-Benchmark-Book OGS-DBB 4.10.07.
- Lauwerier, H. A. (1955) - The transport of heat in an oil layer caused by the injection of hot fluid, *Appl. Sci. Res. Sect. A.*, 5(2-3), 145–151, 1955.

- Lefebvre, R. (2006) – Écoulements multiphasiques en milieu poreux. Chap. 5, pp. 161-200.
- Leismann, H.M. and Frind, E.O. (1989) - A symmetric matrix time integration scheme for the efficient solution for advection-dispersion problems. *Water Resour. Res.*, vol. 25 n°6, p. 1133-1139.
- Leonard, B.P. (1988) - Universal Limiter for transient interpolation modeling of the advective transport equations: the ULTIMATE conservative difference scheme, *NASA Technical Memorandum 100916 ICOMP-88-11*.
- OECD (1988) - The international HYDROCOIN project-Level 1: Code verification. Organization for Economic Co-operation and Development, Nuclear Energy Agency, Paris.
- Oldenburg C., Pruess K. (1995) - Dispersive transport dynamics in a strongly coupled groundwater-brine flow system. *Water Resources Res.*, Vol. 31 n°2 pp 289-302.
- Parkhurst, D.L. and Wissmeier, L. (2015) - PhreeqcRM: A reaction module for transport simulators based on the geochemical model PHREEQC. *Advances in Water Resources* 83(2015) 176-189.  
<http://dx.doi.org/10.1016/j.advwatres.2015.06.001>
- Pinder G. F., Cooper H. H. (1970) - A numerical technique for calculating the transient position of the saltwater front. *Water Resources Res.*, Vol. 6 n°3 pp 875-882.
- Pollock, D.W. (1988) - Semi-analytical computation of path lines for finite-difference models. *Groundwater*, vol. 26, n°6.
- Theis, C.V. (1935) - The relation between the lowering of the piezometric surface and the rate and duration of discharge of a well using groundwater storage, *Amer. Geophys. Union Transactions*, 16th Annual Meeting, V. 16, pt. 2, P 519-524.
- Thiéry, D. (1991) - Modelling contaminant transport through the unsaturated zone in transient date with a random walk particles scheme. *Proceeding of the Internat. Conf. on Groundwater, Flow and Pollution*, Nanjing Univ. Press, China, p. 311-316.
- Thiéry, D. (1993) - Modélisation des aquifères complexes. Prise en compte de la zone non saturée et de la salinité. Calcul des intervalles de confiance. *Hydrogéologie*, 1993, n°4, p. 325-336.  
<https://hal-brgm.archives-ouvertes.fr/hal-01062466> (Accès Décembre 2015).
- Thiéry, D. (2006) – Didacticiel du préprocesseur WinMarthe v4.0. Rapport final. BRGM/RP-54652-FR, 83 p., 48 fig.  
<http://infoterre.brgm.fr/rapports/RP-54652-FR.pdf>. (Accès Décembre 2015).
- Thiéry, D. (2007) - Tutorial for the WinMarthe v4.0 pre-processor. BRGM/RP-54652-EN, 89 p., 48 fig.
- Thiéry, D. (2009) – Modèles d'hydrogéologie. *in Traité d'hydraulique environnementale - Volume 3 - Modèles mathématiques en hydrologie et en hydraulique fluviale*. Tanguy J.M. (Ed.) - Éditions Hermès - Lavoisier. Chapitre 4 pp. 95-117. ISBN 978-2-7462-1838-3.

- Thiéry, D. (2010a) – Modélisation des écoulements souterrains en milieu poreux avec MARTHE. *in Traité d'hydraulique environnementale – Volume 9 – Logiciels d'ingénierie du cycle de l'eau*. Tanguy J.M. (Ed.) - Éditions Hermès - Lavoisier. Chapitre 4 pp. 77-94. ISBN 978-2-7462-2339-4.
- Thiéry, D. (2010b) – Hydrogeologic Models. *in "Mathematical Models Volume 2, chapter 4, pp. 71-92 • Environmental Hydraulics Series"*. Tanguy J.M. (Ed.) – Éditions Wiley/ISTE London. ISBN: 978-1-84821-154-4.
- Thiéry, D. (2010c) – Groundwater Flow Modeling in Porous Media Using MARTHE. *in "Modeling Software Volume 5, Chapter 4, pp. 45-60 • Environmental Hydraulics Series"*. Tanguy J.M. (Ed.) – Éditions Wiley/ISTE London. ISBN: 978-1-84821-157-5.
- Thiéry, D. (2015a) – Didacticiel du code de calcul MARTHE v7.5. Exploration des fonctionnalités de modélisation des hydrosystèmes. Rapport BRGM/RP-64997-FR. 275 p., 168 fig.
- Thiéry, D. (2015b) – Code de calcul MARTHE - Modélisation 3D des écoulements dans les hydrosystèmes - Notice d'utilisation de la version 7.5. BRGM/RP-64554-FR, 304 p., 147 fig.
- Thiéry, D. (2015c) – Modélisation 3D des écoulements en Zone Non Saturée avec le code de calcul MARTHE – version 7.5. BRGM/RP-64495-FR. 87 p., 32 fig.
- Thiéry, D. (2015d) – Modélisation 3D du Transport Réactif avec le code de calcul MARTHE v7.5 couplé aux modules géochimiques de PHREEQC. Rapport BRGM/RP-65010-FR, 164 p., 88 fig.
- Thiéry, D. (2015e) - Validation du code de calcul GARDÉNIA par modélisations physiques comparatives. BRGM/RP-64500-FR, 48 p., 28 fig.  
<http://infoterre.brgm.fr/rapports/RP-64500-FR.pdf>. (Accès Décembre 2015).
- Thiéry, D. and lung, O. (1990) - Continuous modelisation of contaminant transport through the unsaturated zone with a random walk particles model. Internat. Conf. on Hydrological research basins and the environment. Wageningen (The Netherlands). Proceeding of the conference, pp. 271-282.
- Thiéry, D. and lung, O. (1991) - Modélisation hydrodynamique et hydrobiologique avec un schéma à particules d'un bassin pilote de géoépuration. 21<sup>e</sup> journées de l'Hydraulique de la SHF, Sophia-Antipolis (France), p. 1.3.1/1.3.6.
- Updegraff, C.D. (1989) - Comparison of strongly heat driven flow codes for unsaturated media. NUREG/CR-5367. TI89016246. Division of Engineering, Office of Nuclear Regulatory Research, U.S. Nuclear Regulatory Commission. 102 p.
- Vandenbeusch, M. (1976) - Essai et mise en production des aquifères profonds. Rapport n°2. Correction de salinité, pression et température sur les mesures piézométriques. *Rapport BRGM 76 SGN 482 AME*.
- Vanderborght, J., Kasteel, J., Herbst, M., Javaux, M., Thiéry, D., Vanclooster, M., Mouvet, C., Vereecken, H. (2005) - A set of Numerical Models for Simulating Flow and Transport in Soils Using Analytical Solutions. *Vadose Zone J* 2005 4(1): p. 206-221.

- Van Genuchten, M.T. (1980) - A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Amer. J.*, 44, p. 892-898.
- Van Genuchten, M.T. (1982) - A comparison of numerical solutions of the one-dimensional unsaturated-saturated flow and mass transport equations. *Advances in Water Resour.*, vol. 5, 1, p. 47-55. doi : 10.1016/0309-1708(82)90028-8  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0309170882900288> (Accès Déc. 2015).
- Vinsome, P.K.W., Westerveld, J. (1980) - A simple method for predicting cap and base rock heat losses in thermal reservoir simulators. *J. Canadian Pet. Tech.*, 19(3), 87-90.  
<http://dx.doi.org/10.2118/80-03-04>
- Voss, C. (1984) - SUTRA, a finite element simulation model for saturated unsaturated fluid density dependent groundwater flow with energy transport or chemically reactive single species solute transport. USGS National Center. Reston, Virginia.
- Warrick, A.W., Biggar, J.W., Nielsen, D.R. (1971) - Simultaneous solute and water transfer for an unsaturated soil. *Water Resour. Res.*, vol. 7, 5, p. 1216-1225.



**Centre scientifique et technique**  
**Direction Eau, Environnement et Écotechnologies**  
3, avenue Claude-Guillemin  
BP 36009 – 45060 Orléans Cedex 2 – France – Tél. : 02 38 64 34 34  
[www.brgm.fr](http://www.brgm.fr)