

Didacticiel du code de calcul MARTHE v7.5

Exploration des fonctionnalités de modélisation des hydrosystèmes

Rapport final

BRGM/RP-64997-FR
Novembre 2015

Dominique THIÉRY

Didacticiel du code de calcul MARTHE v7.5

Exploration des fonctionnalités de modélisation des hydrosystèmes

Rapport final

BRGM/RP-64997-FR
Novembre 2015

Dominique THIÉRY

Vérifié par :

Nom : Y. Barthélemy



Date : 26/11/2015

Approuvé par :

Nom : S. Lallier



Date : 07/01/2016

Mots clés : Code de calcul MARTHE, Modélisation des hydrosystèmes, Nappes souterraines, Didacticiel, Préprocesseur, Manuel d'utilisation, WinMarthe

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

Thiéry D. (2015) - Didacticiel du code de calcul MARTHE v7.5. Exploration des fonctionnalités de modélisation des hydrosystèmes. Rapport BRGM/RP-64997-FR. 277 p., 170 fig.

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

Synthèse

Le code de calcul MARTHE (**Modélisation d'Aquifères par maillage Rectangulaire en régime Transitoire pour le calcul Hydrodynamique des Ecoulements**) du BRGM permet le calcul de l'écoulement de fluides, de transfert de masse et de transfert thermique en milieux poreux tridimensionnels. Les schémas peuvent être simples ou complexes (zone non saturée, écoulements multiphasiques, prise en compte de la densité du fluide, prise en compte de la végétation, interaction avec des cours d'eau, etc.). La mise en œuvre de ces différentes fonctionnalités est décrite par Thiéry (1990, 1993, 2006, 2007, 2009, 2010a, b et c, 2015a, 2015b, 2015c et 2015d), Thiéry et Golaz (2002).

L'objet de ce rapport est de présenter, d'explorer et de mettre en œuvre la plupart des fonctionnalités du code de calcul MARTHE version 7.5 sous forme d'un didacticiel appliqué à un certain nombre d'exemples de difficultés croissantes, mais pour des géométries simples. Ce didacticiel a pour but de permettre à l'utilisateur une première prise en main autonome du code de calcul, éventuellement en amont d'une formation sur les fonctionnalités avancées sous forme de stages organisés. La présentation des fonctionnalités du code MARTHE *sensu stricto* (le moteur de calculs) n'est pas l'objet de ce didacticiel. Elle fait l'objet de rapports spécifiques décrits dans la liste des références bibliographiques.

(Ce didacticiel est une mise à jour étendue du didacticiel de MARTHE version 7.4 de 2014.)

Par ailleurs le rapport « Didacticiel du préprocesseur WinMarthe v4.0. Rapport final. [BRGM/RP-54652-FR](#) » (Thiéry 2006) présente en détail le préprocesseur WinMarthe.

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

Sommaire

1. Introduction.....	15
2. Organisation des données du code de calcul MARTHE	21
3. Description de l'exemple d'application n°1	25
4. Définition du maillage.....	27
5. Définition des paramètres pour le calcul de l'hydrodynamique.....	33
6. Lancement du calcul et examen des résultats	39
7. Calcul de la charge hydraulique en régime transitoire	49
8. Simulation du transfert de masse.....	55
9. Lancement du calcul de transport et examen des résultats.....	63
10. Insertion d'un maillage gigogne	71
11. Calibration automatique des paramètres	75
12. Exemple n°2 : Écoulement sous un barrage.....	81
13. Exemple n°3 : Écoulement à surface libre à travers un barrage avec surface de suintement	85
14. Exemple n°4 : Simulation fine en radial d'une remontée de la surface libre résultant d'une recharge locale à travers la zone non saturée.....	89
15. Exemple n°5 : Écoulement avec effets de densité à proximité de la mer. Biseau salé de Henry	95
16. Exemple n°6 : Simulation d'un doublet géothermique	103
17. Exemple n°7 : Écoulement sous un cours d'eau, à travers la Zone Non Saturée 113	
18. Exemple n°8 : Écoulement à travers la Zone Non Saturée en milieu hétérogène à surfaces libres multiples	121
19. Exemple n°9 : Aquifère côtier avec intrusion saline.....	127
20. Exemple n°10 : Hydrosystème multicouche avec rivières	133
21. Exemple n°11 : Hydrosystème simple avec bilan hydroclimatique GARDÉNIA 157	
22. Exemple n°12 : Simulation en radial d'un puits à pénétration partielle ..	169

23.	Exemple n°13 : Simulation d'écoulement de gaz pour réaliser du « venting »	177
24.	Exemple n°14 : Transport avec adsorptions de Langmuir et de Freundlich	183
25.	Exemple n°15 : Transport multicomposant avec dégradation en chaîne	189
26.	Exemple n°16 : Écoulement et transport dans un aquifère parcouru par un drain-conduit pouvant être en charge	205
27.	Exemple n°17 : Effet de la densité dans les transferts thermiques : Injection de chaleur au substratum d'un aquifère en équilibre hydrostatique	217
28.	Exemple n°18 : Effet de la viscosité dans les transferts thermiques : Écoulement dans une colonne horizontale	221
29.	Exemple n°19 : Écoulement et transport en Zone Non saturée dans une colonne verticale contenant un macropore	225
30.	Exemple n°20 : Écoulement multiphasique. Infiltration de tétrachloréthylène dans un milieu sableux stratifié initialement saturé en eau	235
31.	Exemple n°21 : Écoulement dans un aquifère contenant un lac	243
32.	Exemple n°22 : Dissolution de Calcite par transport réactif	255
33.	Références bibliographiques	267

Liste des annexes

Annexe 1	Icônes et boutons du préprocesseur WinMarthe	271
----------	--	-----

Liste des illustrations

Figure 1 – Vue 3D du modèle nord-aquitain montrant la succession des 15 couches aquifères modélisées (Saltel et Pédron, 2012).....	15
Figure 2 – Vue 3D du modèle Jurassique de Poitou-Charentes, 8 couches, 4 aquifères (Doez et al. 2011).	16
Figure 3 – Vue 3D du système à modéliser.	25
Figure 4 - Boîte de dialogue pour la création du dossier de travail.....	27
Figure 5 – Boîte de dialogue de création du maillage.....	28
Figure 6 – Premières lignes du fichier projet Didact2.rma.	29
Figure 7 – Boîte de dialogue de sélection d'un champ.	30
Figure 8 – Visualisation en coupe des épaisseurs.....	31
Figure 9 – Menu des « Paramètres non maillés ».	35
Figure 10 – Menu du fichier des « Paramètres généraux ».	36
Figure 11 – Affectation d'une recharge de 252.46 mm/an dans la zone climatique n°1 (c'est-à-dire ici dans la zone de sol n°1).	38
Figure 12 – Dernières lignes du fichier des paramètres Didact2.mart.....	38
Figure 13 – Bilan global des 3 couches.	39
Figure 14 – Débits échangés entre les 3 couches.	40
Figure 15 – Champ de la charge hydraulique calculée (couche n°1).	40
Figure 16 – Boîte de dialogue pour le calcul des isovaleurs.....	41
Figure 17 – Isovaleurs de la charge hydraulique calculée (couche n°1).	42
Figure 18 – Sélection du fichier des départs de trajectoires.	43
Figure 19 – Définition des départs de trajectoires.....	43
Figure 20 – Trajectoires (régime permanent).....	44
Figure 21 – Trajectoires pendant une durée de 100 jours.	45
Figure 22 – Recherche de l'objet « Anisotropie verticale ».	46
Figure 23 – Affectation d'une anisotropie verticale égale à 500 dans les 3 couches de la maille de pompage.	47
Figure 24 – Charge hydraulique dans la couche n°3 : À gauche : en régime permanent sans pompage ; à droite : après 500 jours de pompage.....	52
Figure 25 – Pourcentage de saturation en eau après 500 jours de pompage. À gauche : dans la couche n°1 ; à droite : dans la couche n°2. La couleur bleu foncé indique les mailles quasi-dénoyées.....	53
Figure 26 – Évolution du débit de déstockage de la nappe.	53
Figure 27 – Évolution de la charge hydraulique dans la couche n°1 à l'aplomb du puits central (en rouge) et d'un des deux puits voisins.	54
Figure 28 – Création d'une « Action » ou « Modification » au pas de temps n°1.	57
Figure 29 – Sélection de l'objet « Débit Massique Concentration » au pas de temps n°1.	57
Figure 30 – Définition de la valeur du Débit Massique Concentration au pas de temps n°1.....	58

Figure 31 – Changement de pas de temps.	59
Figure 32 – Définition des mailles à historiques.	59
Figure 33 – Type de définition d'un historique.	60
Figure 34 – Définition des coordonnées d'un emplacement d'historique.	60
Figure 35 – Fichier des «Mailles à Historiques ».	61
Figure 36 – Bilan de masse cumulé après 3 ans.	63
Figure 37 – Choix du champ et du pas de temps à visualiser.	64
Figure 38 – Concentration après 3 ans dans la couche n°3.	65
Figure 39 – Isovaleurs de la concentration après 3 ans dans la couche n°3.	65
Figure 40 – Concentration après 3 ans en coupe verticale dans l'axe du puits.	65
Figure 41 – Évolution temporelle de la concentration dans les 6 points à historiques.	66
Figure 42 – Concentration après 3 ans dans la couche n°3, Méthode de transport MOC.	67
Figure 43 – Évolution temporelle de la concentration dans les 6 points à historiques. Méthode de transport MOC.	67
Figure 44 – Définition de la Concentration de la Recharge au pas de temps n°1.	69
Figure 45 – Évolution temporelle de la concentration aux 6 points. À gauche $Rho \times kd = 0.25$; à droite $Rho \times kd = 0.50$	70
Figure 46 – Définition de l'extension du maillage gigogne.	72
Figure 47 – Définition des dimensions des sous-colonnes et sous-lignes.	72
Figure 48 – Sous-maillage gigogne au voisinage du puits de pompage.	73
Figure 49 – Départs de trajectoires inverses à partir du puits.	74
Figure 50 – Isovaleurs et lignes de courant : calcul avec un sous-maillage gigogne au voisinage du puits de pompage.	74
Figure 51 – Choix des variables à optimiser.	78
Figure 52 – Paramètres de la perméabilité de la zone n°3.	79
Figure 53 – Mise à jour du « fichier Projet » Optimisation.	80
Figure 54 – Définition des départs de trajectoires sous le barrage.	82
Figure 55 – Écoulement sous un barrage : équipotentielles (en bleu), et lignes de courant (en rouge).	83
Figure 56 – Écoulement à surface libre à travers un barrage avec surface de suintement : isovaleurs de charge hydraulique et surface libre (en rouge).	87
Figure 57 – Remontée de la surface libre : régime permanent. Champ du taux de saturation avec profil de la surface libre en rouge.	91
Figure 58 – Remontée de la surface libre : régime transitoire. Champ du taux de saturation en fin de calcul et profils successifs de la surface libre de bas en haut.	93
Figure 59 – Champ de Salinité calculée.	99
Figure 60 – Champ de la charge hydraulique réelle calculée.	100
Figure 61 – Champ de Salinité calculée après 15 minutes.	101
Figure 62 – Champ de Salinité calculée après 80 minutes.	102
Figure 63 – Vue en plan de la température dans l'aquifère après 17.5 et 35 ans.	106

Figure 64 – Vue en coupe verticale de la température dans l'aquifère et les épontes après 35 ans.	106
Figure 65 – Vue en plan de la température dans l'aquifère après 17.5 et 35 ans en supposant des épontes adiabatiques.	107
Figure 66 – Évolution de la température au puits de pompage (avec ou sans prise en compte des épontes, avec ou sans écoulement régional).	107
Figure 67 – Définition d'un « indice d'éponte thermique analytique » dans la couche n°2.	108
Figure 68 – 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. .	108
Figure 69 – Création d'un fichier d'asservissements de température.	110
Figure 70 – Définition d'asservissements de température entre un puits de production et un puits d'injection.	110
Figure 71 – Asservissements de température : évolution de la température de production et d'injection.	110
Figure 72 – Mise en évidence de l'influence de l'asservissement de la température d'injection.	111
Figure 73 – Profil de teneur en eau après 10, 50, 100 et 300 heures (maillage de 0.5 m).	116
Figure 74 – Profil de teneur en eau après 10, 50, 100 et 300 heures (maillage de 0.125 m). .	116
Figure 75 – Évolution au cours du temps de la surface libre (pression = 0).	116
Figure 76 – Profil de teneur en eau après 100 heures : à gauche canal, à droite bassin circulaire.	117
Figure 77 – Concentration après 300 heures : à gauche avec dispersivité, à droite sans dispersivité.	118
Figure 78 – Maillage en « Pseudo-coupe verticale » : c'est la ligne n°1, en rose, qui correspond à la couche n°0. C'est dans cette ligne qu'il faut définir les numéros de zone de sol et les numéros de zone météo.	119
Figure 79 – Maillage en « Pseudo-coupe verticale » : Définition de flux de recharge par « maille ». Seuls les flux de recharge définis dans les mailles affleurantes (en rouge) sont pris en compte.	119
Figure 80 – Écoulement en zone non saturée dans un milieu hétérogène.	121
Figure 81 – Teneur en eau. La ligne noire représente la limite de pression nulle, donc la surface libre.	125
Figure 82 – Champ de la charge hydraulique et isovaleurs tous les 1 m de charge.	125
Figure 83 – À gauche : charge d'eau douce. À droite : altitude de l'interface salée.	130
Figure 84 – Vue en coupe Ouest-Est de l'altitude de l'interface d'eau salée (ordonnée = 0 km).	130
Figure 85 – Altitude de l'interface eau douce-eau salée à t=0, t=50 ans et t=300 ans.	131
Figure 86 – Hydrosystème multicouche avec rivières.	134
Figure 87 – Géométrie de l'hydrosystème multicouche avec rivières. En haut : vue en plan ; en bas : vue en coupe verticale.	135
Figure 88 – Description du réseau hydrographique et des zones de sol.	136
Figure 89 – Création d'un fichier d'arbre de branchement des affluents de rivière.	139
Figure 90 – Définition de l'arbre de branchement des affluents de rivière.	139
Figure 91 – Hydrosystème multicouche avec rivières : charge hydraulique calculée.	144

Figure 92 – Hydrosystème multicouche avec rivières : Paragraphe « Initialisation avant calcul » à la fin du fichier des « Paramètres généraux » [.mart].	146
Figure 93 – Hydrosystème multicouche avec rivières : Fichier des pas de temps (extrait).	147
Figure 94 – Hydrosystème multicouche avec rivières : Bilan hydroclimatique.	148
Figure 95 – Hydrosystème multicouche avec rivières : Bilan global de la nappe.	149
Figure 96 – Hydrosystème multicouche avec rivières : Historiques de débit dans 4 tronçons de rivières.	149
Figure 97 – Hydrosystème multicouche avec rivières. Historiques de l'altitude de l'eau dans 4 tronçons de rivière.	150
Figure 98 – Hydrosystème multicouche avec rivières : Historiques de niveau de nappe.	150
Figure 99 – Profil en long du débit dans l'affluent n°10 à la date 10 jours.	151
Figure 100 – Profil en long du débit d'échange Nappe-> Rivière de l'affluent n°10 à la date 10 jours.	151
Figure 101 – Pollution dans un affluent de rivière : Fichier des pas de temps (extrait).	154
Figure 102 – Pollution dans un affluent de rivière : Concentration dans la nappe après 5 ans.	154
Figure 103 – Pollution dans un affluent de rivière : Évolution de la concentration dans la rivière au cours des 5 premiers jours.	155
Figure 104 – Pollution dans un affluent de rivière : Évolution de la concentration dans la nappe en quelques points proches de la rivière pendant 5 ans (1800 jours).	155
Figure 105 – Géométrie de l'hydrosystème, avec un cours d'eau orienté Nord-Sud au milieu du domaine.	157
Figure 106 – Hydrosystème avec bilan hydroclimatique GARDÉNIA : Fichier temporel de données climatiques (extrait).	162
Figure 107 – Hydrosystème avec bilan hydroclimatique GARDÉNIA. Création d'un nouveau fichier de pas de temps de durée 1 mois.	162
Figure 108 – Au pas de temps n°0 : Définition du flux de pluie avec lecture des données dans la colonne n°1 d'un fichier externe.	163
Figure 109 – Au pas de temps n°0 : Définition du flux d'ETP avec lecture des données dans la colonne n°2 d'un fichier externe.	164
Figure 110 – Définition du format d'écriture des dates dans le fichier des pas de temps résultant.	164
Figure 111 – Hydrosystème avec bilan hydroclimatique GARDÉNIA. Extrait du fichier pas de temps «Didact_Chennetr.pastp» résultant.	165
Figure 112 – Simulation avec le code MARTHE du débit de la Voulzie à Jutigny et du niveau du piézomètre Saint Martin Chennetron.	166
Figure 113 – Flux de ruissellement et flux d'infiltration résultant du bilan hydroclimatique GARDÉNIA couplé.	166
Figure 114 – Pourcentage de flux de ruissellement résultant du bilan hydroclimatique GARDÉNIA couplé.	167
Figure 115 – Puits en coupe verticale : charge hydraulique calculée au voisinage du puits jusqu'à une distance radiale de 3 mètres. Le puits est situé à gauche, en bleu foncé, et l'échelle radiale est dilatée d'un facteur 10. Les courbes sont les isovaleurs de charge hydraulique.	172
Figure 116 – Charge hydraulique calculée au voisinage du puits jusqu'à une distance radiale de 25 mètres. Isovaleurs de charge hydraulique et trajectoires.	172

Figure 117 – Profils de débit dans le puits. à gauche : débit vertical dans le puits ; à droite débit venant de la nappe.	173
Figure 118 – Introduction d'une liaison étanche à l'Est de la maille supérieure du puits.	174
Figure 119 – Puits en coupe verticale, en rose, avec liaisons étanches à l'Est des quatre mailles supérieures.	174
Figure 120 – Charge hydraulique au voisinage du puits. Dessin de gauche : jusqu'à une distance radiale de 3 mètres (échelle radiale dilatée). Dessin de droite : jusqu'à une distance radiale de 25 mètres avec visualisation des trajectoires.	175
Figure 121 – Profils de débit dans un puits crépiné de 10 m à 20 m de profondeur : à gauche : débit vertical dans le puits ; à droite débit venant de la nappe.	175
Figure 122 – Venting en régime permanent : pression du gaz calculée en kPa.	179
Figure 123 – Venting : masse volumique du gaz calculée en kg/m ³	179
Figure 124 – Venting : amplitude relative de la vitesse du gaz.	180
Figure 125 – Venting avec un maillage radial : pression du gaz calculée en kPa. (Distances radiales en abscisses et angles, de 0° à 120° en ordonnées).	182
Figure 126 – Venting avec un maillage radial : profils de pression du gaz jusqu'au voisinage du puits.	182
Figure 127 – Transport avec adsorption selon l'isotherme de Langmuir.	187
Figure 128 – Transport avec adsorption selon l'isotherme de Freundlich.	187
Figure 129 – Définition d'une concentration ou d'une concentration extérieure en précisant le composant.	193
Figure 130 – Introduction de fichiers de données non maillées : fichier de temps de ½ dégradation multicomposant, de temps de retard multicomposant, de noms des composants.	194
Figure 131 – Nitrification : Concentrations simulées par MARTHE (trait continu) comparées à la solution analytique (symboles).	195
Figure 132 – Injection instantanée d'une masse en milieu infini : dégradation en chaîne à 4 composants. Comparaison des concentrations simulées (en rouge) avec la solution analytique (en bleu).	199
Figure 133 – Réaction en chaîne Uranium ->Thorium-> Radium en milieu semi infini Concentration simulées par MARTHE (trait continu) comparées à la solution analytique (symboles).	203
Figure 134 – Aquifère parcouru par un Drain-Conduit : Maillage (en couleur la position du drain).	205
Figure 135 – Aquifère parcouru par un Drain-Conduit : Charge hydraulique en régime permanent.	209
Figure 136 – Aquifère parcouru par un Drain-Conduit : Profil de charge hydraulique dans le drain.	209
Figure 137 – Aquifère parcouru par un Drain-Conduit : Profil de débit d'échange (débit négatif => De la nappe vers le drain).	210
Figure 138 – Aquifère parcouru par un Drain-Conduit : Profil de débit dans le drain.	210
Figure 139 – Aquifère parcouru par un Drain-Conduit : évolution de la concentration dans le drain.	214
Figure 140 – Aquifère parcouru par un Drain-Conduit : Profil de débit et de débit d'échange dans le drain.	214

Figure 141 – Aquifère parcouru par un Drain-Conduit Champ de concentration dans la nappe et dans le drain après 30000 jours. (Le drain a été élargi pour une meilleure visibilité).	215
Figure 142 – Maillage avec indication du point d'injection de chaleur (en rouge).	217
Figure 143 – Température (°C). À gauche : après 90 mn, à droite : après 200 mn.	220
Figure 144 – Masse volumique de l'eau (kg/m ³). À gauche : après 90 mn, à droite : après 200 mn.	220
Figure 145 – Charge hydraulique et vitesses après 90 mn.	220
Figure 146 – Évolution du profil de charge hydraulique dans la colonne au cours du temps.	224
Figure 147 – Évolution du profil de température dans la colonne au cours du temps.	224
Figure 148 – Profil de pression et de teneur en eau dans la matrice poreuse et dans le macropore (à gauche et au centre). À droite : Profil de débit dans le macropore.	231
Figure 149 – Profil de concentration. À gauche : dans le macropore de 1 à 1.8 jour). À droite : dans la matrice de 1 à 15 jours.	232
Figure 150 – Évolution de la concentration à la base de la colonne : dans le macropore et dans la matrice poreuse.	232
Figure 151 – Concentration pondérée dans le flux à la base de la colonne.	233
Figure 152 – Écoulement diphasique dans un massif hétérogène. Géométrie du domaine (dimensions en cm) et numéros des zones de sable.	235
Figure 153 – Écoulement diphasique dans un massif hétérogène. À gauche : modélisation MARTHE ; à droite observation (expérience de Kueper & Frind) En haut après 30 secondes (simulé) et 34 s. (observé). En bas après 180 s. (simulé) et 184 s (observé).	241
Figure 154 – Système aquifère contenant un lac. Vue en coupe verticale.	243
Figure 155 – Système aquifère contenant un lac. Vue du dessus.	243
Figure 156 – Niveau d'eau dans le lac après 5 jours et après 30 jours Les lignes en traits interrompus sont les profils de charge. (en bas : vue de dessus obtenue avec un maillage 2D non décrit ici).	250
Figure 157 – En haut : évolution du débit de pluie et du débit d'évaporation ; en bas : évolution du niveau d'eau dans le lac et du niveau en un point de la nappe.	251
Figure 158 – Évaporation de la nappe.	252
Figure 159 – En haut : évolution comparée du niveau du lac et du débit d'échange global vers la nappe. En bas : évolution du volume d'eau dans le lac et de sa superficie.	252
Figure 160 – Niveau d'eau dans le lac en régime permanent avec un flux de pluie de 6 mm/j Le profil de charge est représenté par la ligne en traits interrompus.	254
Figure 161 – Dissolution de Calcite : Fichier PHREEQC (Début).	257
Figure 162 – Dissolution de Calcite : Fichier PHREEQC (Fin).	258
Figure 163 – Dissolution de Calcite : Extraits du fichier des paramètres de MARTHE.	260
Figure 164 – Dissolution de Calcite : Fichier « nomchim.txt » généré.	262
Figure 165 – Dissolution de Calcite : Fichier « List_Initial_Conc.prn » généré lors de l'initialisation.	262
Figure 166 – Concentration en Calcium après 2 heures.	263
Figure 167 – Champ du pH après 2 heures : de 8.3 à l'extérieur à 5.7 près des points d'injection.	264

Figure 168 – Concentration en CO ₂ après 2 heures : $3 \cdot 10^{-2}$ mol/kgw près des points d'injection.	264
Figure 169 – Variation de concentration en Calcite après 2 heures : $-8 \cdot 10^{-2}$ mol/L de terrain près des points d'injection.	265
Figure 170 – Fenêtre principale du préprocesseur graphique WinMarthe.	271

Liste des tableaux

Tableau 1 – Liste des exemples qui utilisent chaque fonctionnalité.	19
Tableau 2 – Dates des 36 pas de temps de la simulation de l'hydrodynamique en régime transitoire.	50
Tableau 3 – Calibration automatique de 4 paramètres hydrauliques et hydrodispersifs.	80
Tableau 4 – Coordonnées en km des extrémités des 6 affluents, et largeurs en m.	135
Tableau 5 – Début, fin et durée en jours des pas de temps.	146
Tableau 6 – Transport avec rivières : dates de fin des pas de temps en jours.	153
Tableau 7 – Largeurs en mètres des 37 colonnes du maillage radial.	181
Tableau 8 – Paramètres hydrodynamiques des 4 sables (des 4 zones).	236
Tableau 9 – Altitude de la topographie (en cm) dans les 60 colonnes (couronnes) du modèle.	244

1. Introduction

Le code de calcul MARTHE (**M**odélisation d'**A**quifères par maillage **R**ectangulaire en régime **T**ransitoire pour le calcul **H**ydrodynamique des **E**coulements) du BRGM permet le calcul de l'écoulement de fluides, de transfert de masse et de transfert thermique en milieux poreux tridimensionnels avec une approche en volumes finis. Les schémas peuvent être simples ou complexes (zone non saturée, écoulements multiphasiques, prise en compte de la densité du fluide, prise en compte de la végétation, interaction avec des cours d'eau, transfert thermique, etc.).

La mise en œuvre de ces différentes fonctionnalités est décrite par Thiéry (1990, 1993, 2006, 2007, 2009, 2010a, b et c, 2015a, 2015b, 2015c et 2015d), Thiéry et Golaz (2002). Cette schématisation en volumes finis fait intervenir des mailles organisées en couches empilées, chaque couche étant formée de mailles organisées en lignes et colonnes (comme dans un tableur). La gestion des couches permet de modéliser des systèmes géologiques complexes (Figure 1) : des couches peuvent disparaître localement, ce qui peut provoquer des courts-circuits, des couches profondes peuvent affleurer en surface, etc.

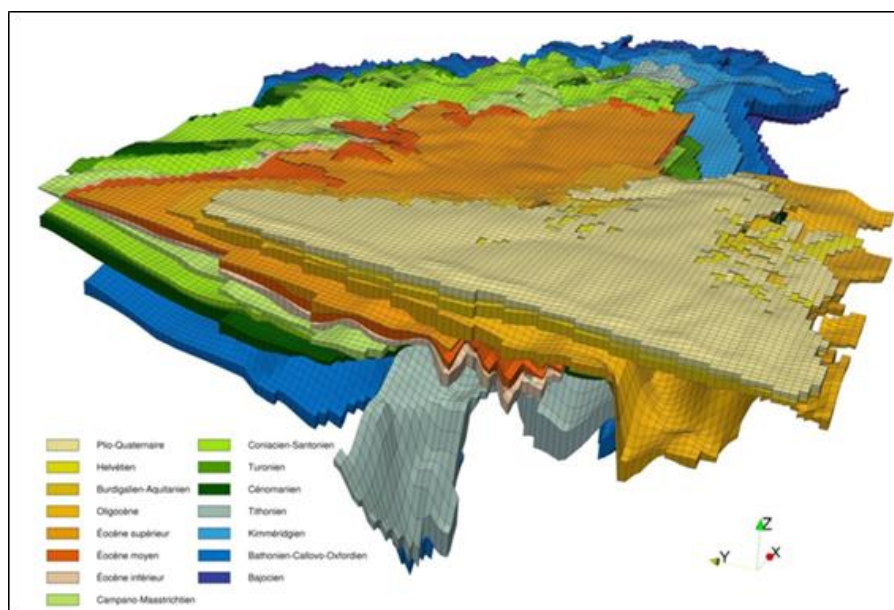


Figure 1 – Vue 3D du modèle nord-aquitain montrant la succession des 15 couches aquifères modélisées (Saltel et Pédrón, 2012).

L'objet de ce rapport est de présenter, d'explorer et de mettre en œuvre la plupart des fonctionnalités du code de calcul MARTHE version 7.5 sous forme d'un didacticiel appliqué à un certain nombre d'exemples de difficultés croissantes. On a volontairement choisi des exemples avec des géométries simples, mais MARTHE permet également de modéliser de grands systèmes aquifères (Figure 1 et Figure 2) de plus d'un million de mailles. Ce didacticiel a pour but de permettre à l'utilisateur une première prise en main autonome du code de calcul, éventuellement en amont d'une formation sur les fonctionnalités avancées sous forme de stages organisés. La présentation des fonctionnalités du code MARTHE *sensu stricto* (le moteur de calculs) n'est pas l'objet de ce didacticiel. Elle fait l'objet de rapports spécifiques, en particulier la [notice d'utilisation de MARTHE](#), rapport [BRGM/RP-](#)

[64554-FR](#) (Thiéry, 2015a) décrits dans la liste des [références bibliographiques](#) et disponibles sur le site : <http://marthe.brgm.fr/>.

Le rapport « [Préprocesseur WinMarthe v4.0](#). Rapport final. [BRGM/RP-54652-FR](#) » (Thiéry 2006) présente en détail le préprocesseur WinMarthe.

Merci à Yves Barthélémy pour sa relecture attentive de ce rapport et pour ses suggestions d'améliorations.

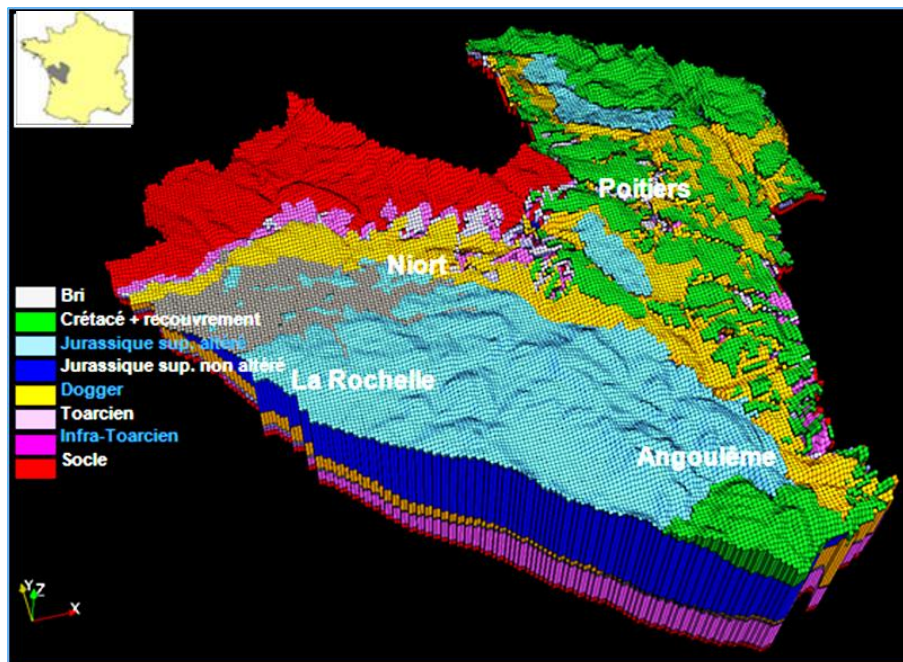


Figure 2 – Vue 3D du modèle Jurassique de Poitou-Charentes, 8 couches, 4 aquifères (Doez et al. 2011).

L'organisation des données du code MARTHE est décrite dans le 1^{er} chapitre.

Des exemples d'application sont alors présentés dans les chapitres suivants :

- Exemple d'application n°1 : [Écoulement et transport de masse dans un système aquifère formé de 3 couches.](#)
 - Anisotropie verticale de perméabilité.
 - Trajectoires.
 - Recharge par la pluie.
 - Calcul hydrodynamique en régime transitoire.
 - Transfert de masse : méthode TVD et méthode MOC.
 - Définition d'une zone contaminée.
 - Coefficient de partage k_d .
 - Insertion d'un maillage gigogne.
 - Calibration (calage) automatique des paramètres.
- Exemple d'application n°2 : [Écoulement sous un barrage, en coupe verticale.](#)
 - Calcul en coupe verticale.
 - Trajectoires et isovaleurs.

- Exemple d'application n°3 : [Écoulement à surface libre à travers un barrage avec surface de suintement.](#)
 - Coupe verticale.
 - Coefficient de sous-relaxation.
 - Surface libre
 - Surface de suintement.
- Exemple d'application n°4 : [Simulation fine en radial d'une remontée de la surface libre](#) résultant d'une recharge locale à travers la zone non saturée.
 - Maillage radial.
 - Coupe verticale.
 - Surface libre
 - Dénoyage - ennoyage en régime transitoire.
 - Coefficient de sous-relaxation
- Exemple d'application n°5 : [Écoulement avec effets de densité à proximité de la mer.](#) Biseau salé de Henry.
 - Calculs avec effets densitaires (variations de salinité).
 - Diffusion.
- Exemple d'application n°6 : [Simulation d'un doublet géothermique.](#)
 - Transfert thermique.
 - Calcul de la température, conduction, convection.
 - Doublet géothermique.
 - Solution approchée de Vinsome (épontes thermiques analytiques).
 - Asservissement de la température d'injection à la température d'un puits de production.
- Exemple d'application n°7 : [Écoulement sous un cours d'eau, à travers la Zone Non Saturée.](#)
 - Écoulement en Zone Non Saturée en régime transitoire.
 - Pseudo-coupe verticale
 - Sous-relaxation.
 - Maillage radial
 - Transfert de masse en Zone Non Saturée
 - Infiltration en Pseudo-coupe verticale
- Exemple d'application n°8 : [Écoulement à travers la Zone Non Saturée en milieu hétérogène à surfaces libres multiples.](#)
 - Écoulement en Zone Non Saturée en régime permanent.
 - Écoulement en Zone Non Saturée en milieu hétérogène.
 - Pseudo-coupe verticale
 - Surface de suintement.
 - Surfaces libres multiples.
- Exemple d'application n°9 : [Aquifère côtier avec intrusion saline.](#)
 - Aquifère côtier.
 - Biseau salé.
 - Écoulement diphasique eau douce-eau salée.
 - Régime permanent et transitoire.
- Exemple d'application n°10 : [Hydrosystème multicouche avec rivières.](#)
 - Système multicouche à couches biseautées.
 - Réseau hydrographique (réseau de rivières).
 - Loi hauteur-débit par la formule de Manning-Strickler.
 - Crue en rivière en régime transitoire.

- *Transfert de masse dans les rivières et dans les rivières.*
- Exemple d'application n°11 : [Hydrosystème simple avec bilan hydroclimatique GARDÉNIA](#).
 - *Bilan hydroclimatique GARDÉNIA couplé.*
 - *Couplage Pluie, Évapotranspiration, Ruissellement, Recharge, Échanges Nappe-Rivière.*
- Exemple d'application n°12 : [Simulation en radial d'un puits à pénétration partielle](#).
 - *Simulation d'un puits en coupe radiale.*
 - *Anisotropie verticale de perméabilité.*
 - *Liaisons étanches.*
 - *Sauvegarde du débit du haut et du débit du bas, sauvegarde du débit latéral.*
- Exemple d'application n°13 : [Simulation d'écoulement de gaz pour réaliser du « venting »](#).
 - *Simulation d'écoulement de gaz.*
 - *Réalisation d'un maillage radial plan (rayon , angle)*
- Exemple d'application n°14 : [Transport avec adsorptions selon l'isotherme de Langmuir ou de Freundlich](#).
 - *Transport avec l'isotherme de Langmuir.*
 - *Transport avec l'isotherme de Freundlich.*
- Exemple d'application n°15 : [Transport avec dégradation en chaîne](#).
 - *Injection d'un flux massique dans un milieu semi infini : 3 composants.*
 - *Injection instantanée de masse en milieu infini : 4 composants.*
 - *Réaction en chaîne de produits radioactifs en milieu semi infini : concentration imposée sur la limite amont.*
- Exemple d'application n°16 : [Écoulement et transport dans un aquifère parcouru par un drain-conduit](#) pouvant être en charge.
 - *Drain-conduit dans un aquifère.*
 - *Transport de masse dans l'aquifère et dans le drain.*
- Exemple d'application n°17 : [Effet de la densité dans les transferts thermiques : Injection de chaleur en bas](#) d'un système aquifère en équilibre hydrostatique.
 - *Effet de la densité dans les transferts thermiques.*
 - *Couplage Hydraulique-Transport de chaleur.*
- Exemple d'application n°18 : [Effet de la viscosité dans les transferts thermiques](#) : Écoulement dans une colonne horizontale.
 - *Effet de la viscosité dans les transferts thermiques.*
 - *Couplage Hydraulique-Transport de chaleur.*
- Exemple d'application n°19 : [Écoulement et transport en Zone Non saturée dans une colonne contenant un macropore](#).
 - *Écoulement et transport dans une colonne verticale Zone Non Saturée contenant un drain-conduit vertical.*
 - *Écoulement préférentiel.*
- Exemple d'application n°20 : [Écoulement multiphasique. Infiltration de tétrachloréthylène](#) dans un milieu sableux stratifié initialement saturé en eau.
 - *Écoulement multiphasique « Eau-Huile » dans un milieu hétérogène.*
 - *Coupe verticale.*
- Exemple d'application n°21 : [Écoulement dans un aquifère contenant un lac](#).
 - *Écoulement avec présence d'un lac en relation avec la nappe souterraine.*
- Exemple d'application n°22 : [Dissolution de Calcite par transport réactif](#).

- *Transfert réactif avec les modules de PHREEQC-RM intégrés à MARTHE (dans certaines versions).*

Le Tableau 1 donne la liste des exemples qui utilisent chaque fonctionnalité.

Fonctionnalité	Numéros des exemples
Anisotropie verticale	1, 12
Asservissement de température de production	6
Bilan Gardénia : Pluie – ETP	11
Calibration (calage) automatique des paramètres	1
Coefficient de partage k_d	1
Coefficient de sous-relaxation	1, 3, 4, 7, 8, 9, 10
Coupe verticale, Pseudo coupe verticale	2, 3, 4, 8, 17, 20
Couplage Hydraulique-Transport de chaleur	17, 18
Dégradation en chaîne	15
Dénoyage	1, 4
Doublet géothermique	6
Drain-conduit	16, 19
Écoulement en Zone Non Saturée (ZNS)	4, 7, 8, 19
Écoulement de gaz, venting	13
Écoulement multiphasique	20
Écoulement préférentiel	19
Hydrodynamique en régime transitoire	1, 4, 7, 9
Interface eau douce – eau salée	9
Isotherme de Langmuir, Freundlich	14
Lacs	21
Liaisons étanches	12
Maillage gigogne	1
Maillage radial	4, 7, 12, 13
Multicouche à couches biseautées	10
Recharge par la pluie	1
Relation de Manning-Strickler	10
Réseau hydrographique	10
Salinité, effets densitaires	5
Simulation de puits	12
Surface de suintement	3, 8
Surface libre	3, 4, 8
Transferts thermiques	6, 17, 18
Transport de masse méthode MOC	1
Transport de masse	1, 5, 7, 10, 14, 15, 16
Transport de masse en rivière	10
Transport de masse en ZNS	7, 8, 19
Transport réactif (PHREEQC)	22
Trajectoires	1, 2
Viscosité	18
Vitesses	5, 13, 17

Tableau 1 – Liste des exemples qui utilisent chaque fonctionnalité.

2. Organisation des données du code de calcul MARTHE

2.1. LES DIFFÉRENTS TYPES DE DONNÉES DU CODE MARTHE

Le code de calcul MARTHE fait intervenir des données de plusieurs types :

- Des données d'options ou des paramètres constants,
- Des données de champs maillés,
- Des données particulières qui ne sont ni des champs maillés, ni des constantes.

2.1.1. Options ou paramètres constants

- Par exemple : Choix du solveur pour les calculs d'hydraulique, nombre d'itérations de calcul, seuil de convergence.
- Ces paramètres, qui sont au nombre de plusieurs centaines, sont regroupés sous forme de paragraphes, dans un fichier texte, appelé « fichier des paramètres », ayant pour extension [.mart].

2.1.2. Données de champs maillés

- Ce sont les données de toutes les mailles du domaine pour un champ donné. Par exemple les données de charge hydraulique initiale, les données d'altitude du substratum, les données de concentration initiale.
- Il peut y avoir plus de 180 champs de données différents.
- Seuls les champs nécessaires au type de modélisation choisi doivent être définis. Par exemple il n'est pas nécessaire de définir de concentration si on ne calcule pas de transfert de masse, ou la salinité si on ne prend pas en compte les effets densitaires.
- Chaque champ a ses données dans un fichier propre. Par exemple la charge hydraulique est dans un fichier d'extension [.charg], la perméabilité dans un autre fichier d'extension [.permh], etc.
- Par défaut tous les champs sont initialisés à zéro. Il n'est donc pas nécessaire de créer un fichier pour un champ dont toutes les valeurs sont égales à zéro.
- Les noms de tous ces fichiers sont regroupés dans le « fichier projet » de MARTHE qui est tout simplement un « répertoire », c'est-à-dire la liste des noms des fichiers de chaque champ de données.
- Il n'est pas nécessaire de créer un fichier pour un champ uniforme dont toutes les mailles du domaine ont la même valeur. Il suffit de lui donner, dans le fichier projet, un nom fictif sous la forme « =valeur ». Par exemple si toutes les mailles ont un coefficient d'emmagasinement libre égal à 5 (unités), on peut donner un nom de fichier fictif « =5 », (sans les guillemets).

- Pour chaque champ qui n'est pas uniforme, le fichier contient les données successivement couche par couche, de la couche n°1 à la dernière couche, de haut en bas (comme les pages d'un livre fermé). Les données de chaque couche apparaissent sous forme d'une « grille » formée de N_L lignes de N_C colonnes chacune.

La ligne n°1 est celle qui a l'ordonnée la plus grande. C'est la première ligne de la grille, comme dans la page d'un livre.

- Il peut également y avoir des maillages gigognes, c'est-à-dire des sous maillages inclus dans le maillage principal. Dans les fichiers de grilles, les données des maillages gigognes apparaissent après la dernière couche du maillage principal. Un maillage gigogne concerne toutes les couches. C'est-à-dire que si on définit un raffinement de maillage dans une zone du modèle, le raffinement concernera toutes les couches à l'aplomb de cette zone. Par ailleurs il ne peut pas y avoir de gigognes inclus dans un maillage gigogne.
- Les données de chaque champ peuvent être modifiées, en partie ou en totalité, à n'importe quel pas de temps. Par exemple on peut modifier des débits de pompage, ou des pluies, mais aussi des perméabilités, des longueurs de cours d'eau, des perméabilités de lit de cours d'eau, des porosités, des conditions aux limites, etc.

2.1.3. Données particulières qui ne sont ni des champs maillés, ni des constantes

Ce sont des fichiers de données non maillées. En particulier des fichiers contenant :

- La description des dates de fin des pas de temps, et des modifications éventuelles qui leurs sont associées.
- La liste des mailles dites « à historiques », c'est-à-dire des mailles pour lesquelles on mémorise le suivi des valeurs calculées à chaque pas de temps.
- La liste des points de départ des trajectoires.
- L'« Arbre de branchement » des rivières ou des drains.
- Le profil d'utilisation.
- etc.

Le « fichier projet » de MARTHE, d'extension [.rma], rassemble les noms de tous les fichiers utilisés pour un calcul :

- Le fichier des paramètres généraux.
- Le fichier des pas de temps.
- Les fichiers des champs maillés.
- Les fichiers de données particulières non maillées.

2.2. MODIFICATIONS DE DONNÉES D'UN CHAMP MAILLÉ

Les données d'un champ maillé peuvent être modifiées, en partie ou en totalité, à n'importe quel pas de temps.

En particulier ces modifications peuvent apparaître au pas de temps numéro zéro, c'est-à-dire avant le début des calculs.

Les données peuvent être modifiées :

- Par grille,
- Par couche : on affecte une valeur uniforme dans une couche donnée,
- Par zone : on affecte une valeur uniforme dans une zone donnée,
- Par maille : on affecte une valeur uniforme dans une maille, ou dans un groupe de mailles donné,
- Par liste de mailles : on affecte des valeurs différentes à une liste de mailles définies sans format particulier, par leur numéro de colonne, ligne, couche, gigogne, ou bien définies par leurs coordonnées X , Y.

Ces modifications de données peuvent être introduites dans le « fichier des pas de temps » [.pastp].

Elles peuvent également être introduites à la fin du « fichier des paramètres », dans le paragraphe « Initialisation avant calculs ».

2.3. DÉFINITION DIRECTE DES DONNÉES D'UN CHAMP MAILLÉ, SANS CRÉATION D'UN FICHIER

Pour définir un champ maillé simple, il n'est pas nécessaire de créer un fichier de grilles. En effet les champs simples peuvent être définis en totalité directement sous forme de modifications, placées :

- à la fin du fichier des paramètres généraux [.mart],
- ou au début du fichier des pas de temps [.pastp], au pas de temps numéro zéro.

Bien que l'effet soit identique, on définira plutôt :

- Les données physiques (perméabilité, porosité, coefficient d'emmagasinement, conditions aux limites, concentration et température initiale).
 - ⇒ À la fin du le fichier des paramètres.
- Les données de forçages (pluie, évapotranspiration potentielle, débit de pompage, etc.)
 - ⇒ Au début du fichier des pas de temps, au pas de temps numéro zéro.

Il convient cependant de remarquer que seules les données maillées, qui sont dans des fichiers de grilles, sont visualisables graphiquement par le préprocesseur WinMarthe. Les modifications de données maillées, introduites dans le « fichier des paramètres » et dans le « 'fichier des pas de temps », sont mises en forme par le « préprocesseur de données non maillées » et utilisées par le moteur de calcul MARTHE, mais elles ne peuvent pas être visualisées graphiquement.

Remarque : Le champ de perméabilité, même s'il est simple ou uniforme, doit obligatoirement être défini dans un fichier de grilles. En effet c'est ce fichier de grilles qui

définit le nombre de lignes et de colonnes des grilles ainsi que les hauteurs des lignes et les largeurs des colonnes.

Exemple n°1 : pour définir un champ de débit ayant uniquement un pompage, de valeur 50 dans une maille donnée, et une charge imposée (débit = 9999) dans toutes les mailles de la ligne n°1.

```
/DEBIT/GRILLE N: =0
      (débit dans tout le domaine : Valeur = 0)
/DEBIT/MAILLE C= 25L= 63P= 1V= -50;
      (débit dans la maille : colonne n°25, ligne n°63, couche n°1 :
      Valeur = -50)
/DEBIT/MAILLE C= *L= 1P= 1V= 9999;
      (débit dans les mailles : toutes les colonnes, ligne n°1,
      couche n°1, Valeur = 9999)
      (« * » signifie « toutes », c'est-à-dire ici : toutes les colonnes.)
```

Ces « modifications » sont introduites automatiquement avec le « préprocesseur de données non maillées » qui gère automatiquement les formats. Il est vivement déconseillé d'introduire de telles modifications avec un éditeur de texte. En effet ces données sont formatées.

Exemple n°2 : pour définir des valeurs de perméabilité uniformes dans différentes formations.

```
/PERMEABILITE/GRILLE          N: =1
/PERMEABILITE/ZONE           Z= 43:63 V= 6;
/PERMEABILITE/COUCHE        C= 3:7 V= 0.1;
```

Exemple n°3 : pour définir des valeurs de débit par « Liste de mailles ».

La « liste de mailles » est une manière de modifier les valeurs d'un champ de certaines mailles. Les données sont introduites, en format libre, sous une des formes suivantes :

- Valeur, Colonne, Ligne [Couche, Gigogne]
- x, y, valeur
- x, y, couche, valeur
- x, y, z, valeur

La forme des données dans un fichier « Liste de mailles » doit être uniforme. Cette forme, est précisée par un paramètre.

Par exemple : pour le format « Valeur, Colonne, Ligne couche » le fichier sera comme suit :

```
10 10 7 1 (Valeur 10 dans la maille : colonne n°10, ligne n°7, couche n°1)
10 5 14 1 (Valeur 10 dans la maille : colonne n°5, ligne n°14, couche n°1)
9999. * 21 1 (Valeur 9999 dans les mailles : toutes les colonnes,
de la ligne n°21, couche n°1)
```

3. Description de l'exemple d'application n°1

L'exemple à modéliser correspond à un système aquifère composé de deux formations géologiques superposées. Les limites nord et sud sont imperméables et les limites ouest et est correspondent chacune à une rivière qui impose son potentiel à la nappe. Les charges imposées sur les limites ouest et est sont respectivement de 9 mètres et 8 mètres au-dessus d'un niveau de référence (par exemple le niveau de la mer). L'extension du Nord au Sud est de 600 m, la distance entre les deux rivières est de 580 mètres d'Ouest en Est. La nappe est libre et chacune des deux formations est homogène.

Les perméabilités (horizontales) des deux formations sont respectivement, de haut en bas, de $1 \cdot 10^{-4}$ m/s et $5 \cdot 10^{-4}$ m/s. Chaque formation est anisotrope : la perméabilité verticale est égale au $1/10^{\circ}$ de la perméabilité horizontale. La porosité efficace est égale à 25 %. Les épaisseurs des deux formations sont respectivement de 4 m et 6 m, de haut en bas, et le toit de la première formation est horizontal, à l'altitude 10 m. L'aquifère est alimenté par une recharge uniforme de 252 mm/an, soit $8 \cdot 10^{-9}$ m/s. Une zone de contamination est située dans l'aquifère supérieur, près de la limite ouest, dans un rectangle compris entre les abscisses 100 m et 220 m, et les ordonnées 240 m et 380 m. Le but du modèle est d'isoler la zone contaminée en utilisant un puits situé au point de coordonnées 490 m, 310 m et traversant totalement les deux formations. (Figure 3).

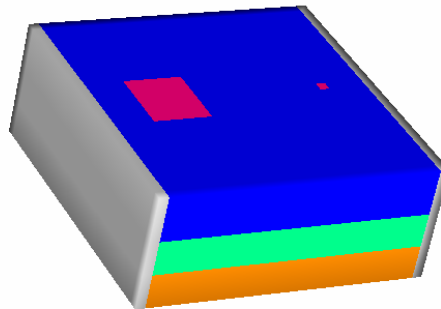


Figure 3 – Vue 3D du système à modéliser.
(NB : La formation inférieure est modélisée par deux couches de mailles).

Les paramètres relatifs au transport de pollution sont les suivants : on suppose que la pollution libère $1 \cdot 10^{-4}$ $\mu\text{g/s/m}^2$, (ou $1.05 \cdot 10^5$ $\mu\text{g/mois}$ par maille de 400 m^2). Compte tenu de la recharge de $8 \cdot 10^{-9}$ m/s la pollution correspond à une concentration égale à $1 \cdot 10^{-4}$ [$\mu\text{g/s/m}^2$] / $8 \cdot 10^{-9}$ m/s = $1.25 \cdot 10^4$ [$\mu\text{g/m}^3$]. Les dispersivités longitudinales et transversales sont respectivement de 10 m et 1 m, le coefficient de retard est égal à 2, le coefficient de diffusion moléculaire et la constante de demi-dégradation sont considérés comme égaux à 0. La concentration initiale dans les aquifères est égale à 0, ainsi que la concentration provenant de la recharge et des rivières. L'évolution de la concentration sera calculée pendant 3 ans, et on examinera en particulier les variations de concentration en deux points P1 et P2 situés respectivement aux coordonnées (290 m, 310 m) et (390 m, 310 m) dans chacune des formations.

En résumé les caractéristiques du site sont les suivantes :

Géométrie

- Deux formations d'épaisseurs 4 m et 6 m (de haut en bas).
- Extension latérale : 580 m de l'Ouest à l'Est et 600 m du Sud au Nord.
- Limites sud et nord étanches.
- Limites ouest : charge imposée à +9 m ; limite est : charge imposée à +8 m.

Caractéristiques hydrodynamiques et alimentation

- Perméabilités des 2 formations : $1 \cdot 10^{-4}$ m/s et $5 \cdot 10^{-4}$ m/s (de haut en bas).
- Anisotropie verticale de perméabilité (K_v / K_h) : 1/10.
- Porosité efficace : 25 %.
- Recharge : 252 mm/an, soit $8 \cdot 10^{-9}$ m/s.
- Puits de pompage traversant les 2 formations situé en (490 m, 310 m).
- Régime hydraulique permanent.

Caractéristique du transport



- Zone contaminée dans le rectangle : [$100 \text{ m} < x < 220 \text{ m}$], et [$240 \text{ m} < y < 380 \text{ m}$].
- Concentration de la contamination : $1.25 \cdot 10^{+4} \mu\text{g}/\text{m}^3$, soit un flux massique de $1 \cdot 10^{-4} \mu\text{g}/\text{s}/\text{m}^2$ (ou $1.05 \cdot 10^5 \mu\text{g}/\text{mois}$ par maille de 400 m^2).
- Dispersivités longitudinale et transversale : 10 m et 1 m.
- Coefficient de retard : 2.
- Calcul de la concentration pendant 3 ans et examen de l'évolution aux points de coordonnées (290, 310) et (390, 310).



Discrétisation

Pour la simulation de cet exemple on va considérer un ensemble de mailles carrées uniformes de 20 mètres de côté. La formation inférieure, de 6 mètres d'épaisseur, sera découpée en deux couches de modèles identiques de 3 m d'épaisseur, pour mieux représenter les écoulements sur la verticale. Le système sera donc modélisé par un ensemble de 3 couches aquifères.

4. Définition du maillage

4.1. CRÉATION DU MAILLAGE

Double-cliquer sur l'icône  pour lancer WinMarthe, puis cliquer sur l'icône  ou bien sur « Fichier → Nouveau » pour créer un nouveau modèle.

Dans la fenêtre « Définition du fichier projet de MARTHE » qui s'ouvre (Figure 4), l'icône  permet de sélectionner le dossier où sera enregistré le modèle. L'icône  permet ensuite de créer un sous-dossier particulier (par exemple, le dossier Didactic) dans lequel seront stockés tous les fichiers du modèle.

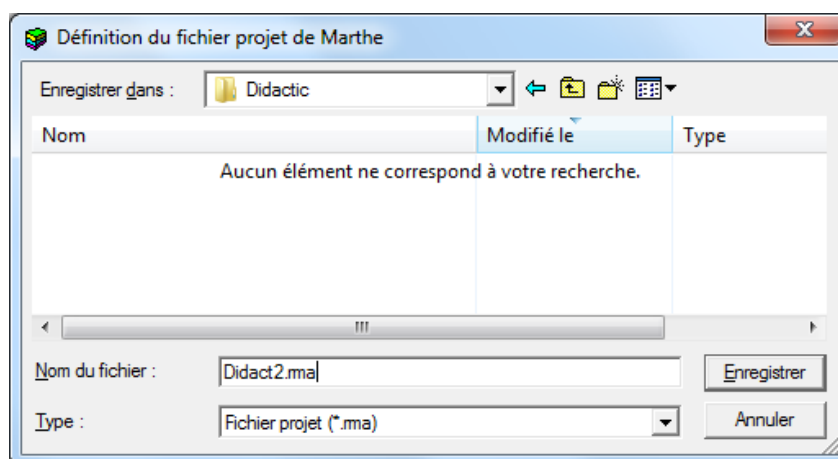


Figure 4 - Boîte de dialogue pour la création du dossier de travail.

WinMarthe demande alors un nom de fichier pour le modèle à créer (extension automatique .rma) : on donne par exemple le nom **Didact2** (dans le dossier **Didactic**), et on voit s'ouvrir une boîte de dialogue pour la définition du maillage à créer (Figure 5).

On introduit les données suivantes :

- Titre du projet : **Didacticiel 2** (cadre « Divers » en en bas à droite) ;
- Perméabilité par défaut = **1** (c'est-à-dire **perméabilité** uniforme = 1).

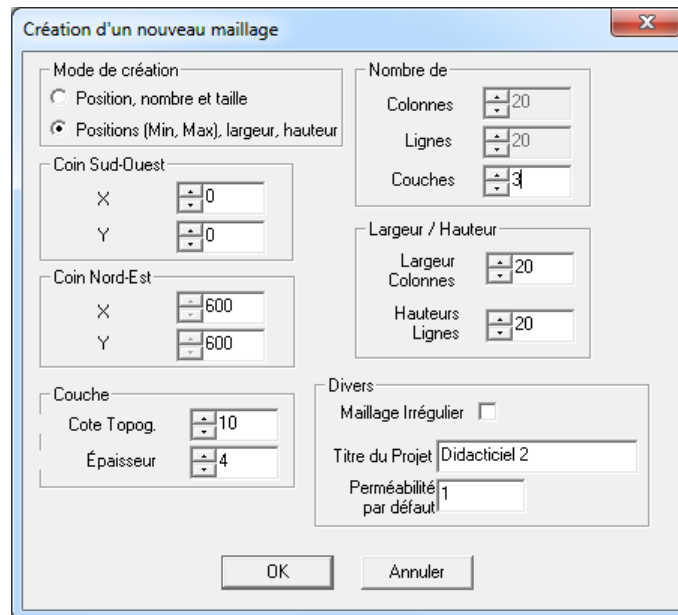


Figure 5 – Boîte de dialogue de création du maillage.

Le cadre « Mode de création » en haut à gauche propose deux options pour définir le maillage :

ou bien on coche « Positions (Min, Max), largeur, hauteur » et on donne l'emprise du maillage en plan, la largeur des colonnes et la hauteur des lignes :

- Coin Sud-Ouest : $X = 0$; $Y = 0$;
- Coin Nord-Est : $X = +600$; $Y = +600$;
- Largeur des colonnes = **20** ; Hauteur des lignes = **20** ;

ou bien on coche « Position, nombre et taille » et on indique le nombre de colonnes et de lignes, avec leur largeur et leur hauteur :

- Coin Sud-Ouest : $X = 0$; $Y = 0$;
- Nombre de colonnes = **30** ; Nombre de lignes = **30** ; Nombre de couches = **3** ;
- Largeur des colonnes = **20** ; Hauteur des lignes = **20** ;

Puis, dans le cadre « Couche », on renseigne deux paramètres qui pourront être modifiés ultérieurement :

- Cote topog. = **10** c'est-à-dire « Altitude topographique uniforme = 10 m » ;
- Épaisseur = **4**. L'épaisseur (de chaque couche) est égale à 4 (mètres), le substratum de la première couche sera donc à l'altitude 6 (mètres).




Cliquer sur **OK** : le maillage régulier est généré et se dessine à l'écran.

Remarque : Pour créer un maillage irrégulier on aurait coché « Maillage Irrégulier » dans le cadre « Divers », et défini une à une les largeurs des colonnes successives, de gauche à droite, et les hauteurs des lignes, de haut en bas.

Remarques :

- Dans le maillage, chaque maille est repérée par son numéro de colonne (croissant de gauche à droite), son numéro de ligne (croissant de haut en bas sur la vue en plan), et son

numéro de couche (croissant de haut en bas). La maille située dans le coin supérieur gauche du maillage a donc pour coordonnées (1, 1, 1).

- À ce stade il est conseillé de sauvegarder les données introduites dans le modèle, en cliquant sur l'icône . L'explorateur Windows montre que plusieurs fichiers ont été créés dans le dossier Didactic : *Didact2.rma* (fichier projet de MARTHE), *Didact2.permh* (fichier de perméabilité), *Didact2.hsubs* (fichier de substratum), *Didact2.layer* (fichier des couches) et *Didact2.wmi* (fichier configuration de WinMarthe).
- Tous les fichiers créés et utilisés par MARTHE sont des fichiers texte pouvant être lus et modifiés avec un éditeur de texte, par exemple l'éditeur de texte accessible par l'icône  de la barre d'outils du bas. Cependant la modification d'un fichier d'entrée avec un éditeur de texte doit être réalisée avec un grand soin et est réservée aux utilisateurs avertis.
- Le fichier [.rma] (pour Répertoire Marthe) contient la liste de l'ensemble des fichiers qui constituent le modèle, liste qui s'actualise à chaque fois que l'on sauvegarde le fichier projet en cliquant sur l'icône . La Figure 6, qui en reproduit les premières lignes, mentionne donc les fichiers *Didact2.permh* et *Didact2.hsubs*. En revanche, le fichier de topographie (*Didact2.topog*) n'a pas été créé car, étant uniforme, il peut se résumer à une valeur unique. D'où sa formulation condensée « =10 » dans le fichier projet *Didact2.rma*.

Didacticiel 2 : Hydraulique en régime Permanent [Titre du projet]	
Didact2.permh	= Perméabilité
	= Débit d'eau aquifère
	= Charge hydraulique
	= Emmagasinement Captif
	= Emmagasinement en nappe Libre
	= Numéro de Zone de Géométrie
Didact2.hsubs	= Altitude du Substratum
	= Numéro de Zone Équipotentielle
=10	= Altitude Topographique

Figure 6 – Premières lignes du fichier projet *Didact2.rma*.

- Les modèles générés par MARTHE sont géo-référencés, ce qui permet les échanges avec les Systèmes d'Information Géographique, utilisés aussi bien pour préparer les données d'entrée du modèle que pour valoriser les résultats de simulation.

4.2. DÉFINITION DES ÉPAISSEURS DES COUCHES

La première couche est bien définie : toit (« Topographie) à +10 m, et substratum à +6 m. Pour définir les paramètres des autres couches, on sélectionne le champ de l'« Altitude du Substratum ». Pour cela on choisit un champ (« Choix champ F3 » sur la barre d'outils du haut), ce qui fait apparaître la boîte de dialogue de la Figure 7.

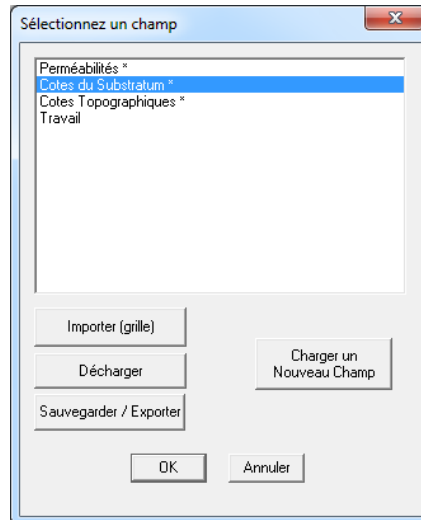








Figure 7 – Boîte de dialogue de sélection d'un champ.

On choisit le champ « Altitude du Substratum », puis on actionne l'icône  de « Sélection par couche » (barre d'outils du bas). On utilise alors les flèches de déplacement  , sur cette même barre d'outils, pour passer à la couche n°2. On double-clique dans le maillage. Comme on vient de choisir l'icône  de « Sélection par couche », toutes les mailles de cette couche sont sélectionnées. Elles apparaissent en rouge. On utilise alors l'icône  « Affecte une valeur aux mailles sélectionnées » : on donne la valeur **3** qui est l'altitude du substratum de la 2^{ème} couche (les mailles sont alors désélectionnées automatiquement). On fait ensuite apparaître la couche n°3, et de la même manière on sélectionne toutes les mailles et on leur donne la valeur 0 qui est l'altitude du substratum de cette 3^{ème} couche. En cliquant sur l'icône  en forme de colonnes « Visualiser en coupe verticale style modèle » de la barre d'outils de gauche, on peut vérifier en coupe que la géométrie est bien définie, Figure 8. (On retourne à la vue en plan par l'icône  = « Visualisation en plan »).

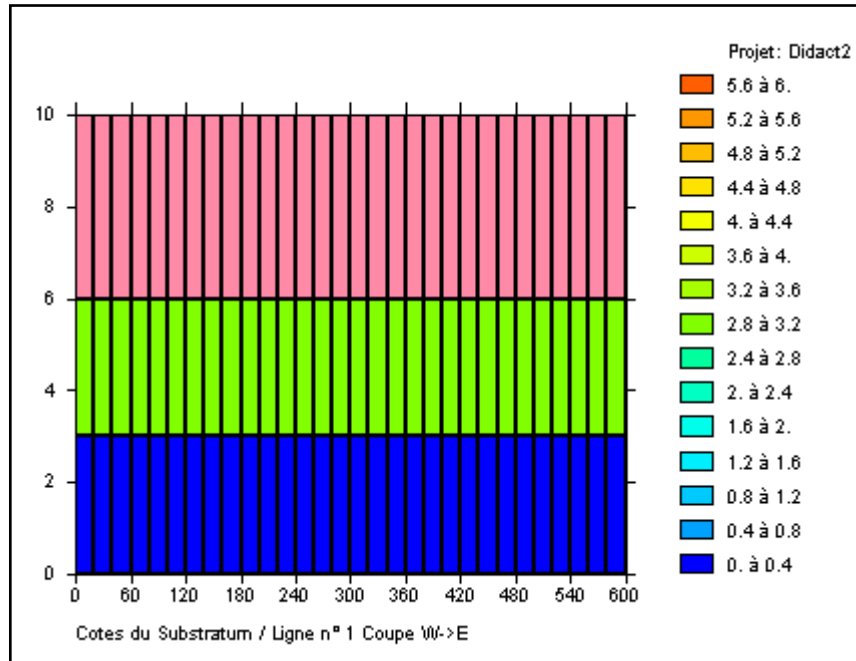


Figure 8 – Visualisation en coupe des épaisseurs.

Il convient de noter que dans le code MARTHE, contrairement à d'autres logiciels de modélisation des nappes souterraines, il n'y a pas de notion de « couches captives » ou de « couches à surface libre », ou de « couches convertibles ». Chaque maille peut à tout moment être libre, captive ou dénoyée, selon l'état piézométrique du moment ; le statut de chaque maille est intégralement géré par les algorithmes de calcul.


5. Définition des paramètres pour le calcul de l'hydrodynamique


5.1. DÉFINITION DES LIMITES À CHARGE HYDRAULIQUE IMPOSÉE

Pour définir une limite étanche, en bordure du modèle, il n'y a rien à faire, car c'est l'option par défaut. Pour fixer une limite à charge hydraulique imposée (dite aussi « à potentiel imposé »), il faut affecter aux mailles de cette limite un débit fictif égal à la valeur code 9999 ; la charge imposée est alors égale à la charge déclarée dans le champ « Charge hydraulique » (cf. ci-après).



On procède donc comme suit :

On sélectionne le champ du Débit d'eau (« Choix champ F3 » sur la barre d'outils du haut), puis on clique sur le bouton « Charger un nouveau champ », on désigne « Débit d'eau aquifère » et on accepte la création de ce nouveau champ.

Pour affecter les valeurs 9999, on utilise le bouton  « Sélection par colonne » (situé sur la barre d'outils du bas). On double-clique sur la colonne n°1 (à gauche). La colonne est

sélectionnée (dans toutes les couches) et elle se colore en rouge. Par l'icône , on lui affecte la valeur = 9999. Cette colonne se colore en gris, car la valeur 9999 est une valeur « code ». On fait la même chose sur la colonne de droite (colonne n°30).


Il faut maintenant affecter la valeur des charges qui sont imposées. Pour cela on crée le champ de charge (« Choix champ F3 » → « Charger un nouveau champ », puis on désigne « Charge hydraulique » et on accepte la création). On affecte la valeur initiale égale à

8 mètres. Dans ce but on utilise l'icône  « Sélectionner tout » et on double-clique dans le domaine => Toutes les mailles sont sélectionnées (et coloriées en rouge). Par l'icône , on leur affecte la valeur = 8. On sélectionne ensuite la colonne n°1 et on lui affecte la valeur = 9 mètres.

5.2. DÉFINITION DES AUTRES CHAMPS

5.2.1. Débit de pompage


On affecte le débit de pompage (donc négatif) égal à $-12 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$ au point de coordonnées (490 m, 310 m). On va commencer par affecter ce débit dans la couche n°3, et on montrera ultérieurement comment faire en sorte que ce débit se répartisse correctement dans les 3 couches.


On re-sélectionne le champ de débit (« Choix champ F3 » → « Débit d'eau »). On se positionne alors dans la maille de coordonnées (490 m, 310 m) de la couche n°3. Pour cela on utilise, sur la barre d'outils du haut, le menu « Outils » → « Aller à x/y/couche » et on fixe X= 490, Y= 310, Couche= 3. On valide : la maille (Colonne=25, Ligne=15, Couche=3) se colore en rouge. On lui donne alors la valeur -12 par l'icône . On rentre -12, et non


pas -0.0012, car il sera plus agréable, et plus lisible, de travailler avec des débits exprimés en $10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$ (l'unité de débit sera ultérieurement fixée à 10^{-4} selon la procédure décrite au chapitre 5.3.1).

5.2.2. Perméabilité

On sélectionne le champ de perméabilité (« Choix champ F3 » → « Perméabilité »). Et de la même manière qu'on avait défini l'altitude du substratum, on sélectionne la couche n°1

(c'est-à-dire la couche supérieure), on active l'icône  de « sélection par couche », on double-clique dans le domaine => Toutes les mailles de la couche sont sélectionnées. Par

l'icône , on leur affecte la valeur = 1. On rentre « 1 », et non pas 0.0001, car il sera plus agréable et plus lisible d'exprimer la perméabilité en 10^{-4} m/s (unité de perméabilité = 10^{-4} , cf. § 5.3.1). On note que MARTHE offre une grande souplesse pour la définition des unités de débit, perméabilité, charge, recharge, temps, coordonnées horizontales, etc., sans qu'il soit nécessaire d'avoir un système cohérent. Par exemple, on peut exprimer la perméabilité en 10^{-4} m/s , le débit en m^3/h , la charge hydraulique en cm, les coordonnées horizontales en km, et le temps en jour.


On se place alors dans la couche n°2, en utilisant l'icône «  » située sur la barre d'outils du bas. On double-clique dans le domaine => Toutes les mailles de la couche n°2 sont sélectionnées. On leur affecte la valeur = 5. Puis on sélectionne la couche n°3 et on lui affecte de la même manière la valeur 5.

5.2.3. Champs uniformes : porosité, zones de recharge

On procède comme précédemment pour définir ces champs uniformes. (« Choix champ F3 » → « Charger un nouveau champ » → « Porosité = Teneur en eau à Saturation »). On définit alors une valeur égale à 25 (%) dans tout le domaine. Puis on crée le champ « Zones de sol, Pluie, ETP, Infiltration » et on affecte à tout le domaine la valeur 1. En fait, seules les mailles qui affleurent, ici les mailles de la couche n°1, seront concernées. Il convient de noter que MARTHE offre la souplesse très importante de permettre à certaines couches de disparaître (couches qui se biseautent, ce qui peut donner lieu à des courts-circuits entre n'importe quelles couches, et permettre par exemple à la couche n°2 ou n°3 d'affleurer).

La valeur de la recharge à affecter à cette zone n°1 sera définie ultérieurement, car le champ « recharge » ne peut pas, en utilisation classique, être affecté par maille, mais uniquement par zone de mailles.


5.2.4. Sauvegarde du modèle

À ce stade il est conseillé de sauvegarder les données introduites dans le modèle, en utilisant l'icône . Il est conseillé de répéter cette opération régulièrement, car il n'y a pas de fonction « Undo » pour annuler une opération erronée. Quand on sauvegarde les données, les symboles « * » qui étaient placés à côté des champs modifiés, ainsi que le symbole « * » situé dans la barre de titre, disparaissent.

Les fichiers de débit par potentiels imposés (*Didact2.debit*) et de charge initiale (*Didact2.charg*) sont créés. En revanche, les fichiers de porosité (*Didact2.poros*) et de zone

de recharge (*Didact2.zonep*) ne sont pas créés car ils sont uniformes. Leurs noms apparaissent respectivement sous la forme « =25 » et « =1 » dans le fichier projet *Didact2.rma*.

5.3. DÉFINITION DES PARAMÈTRES NON MAILLÉS

On accède aux paramètres de modélisation non maillés par l'icône  située sur la première barre d'outils inférieure. On voit alors apparaître le menu général représenté sur la Figure 9.

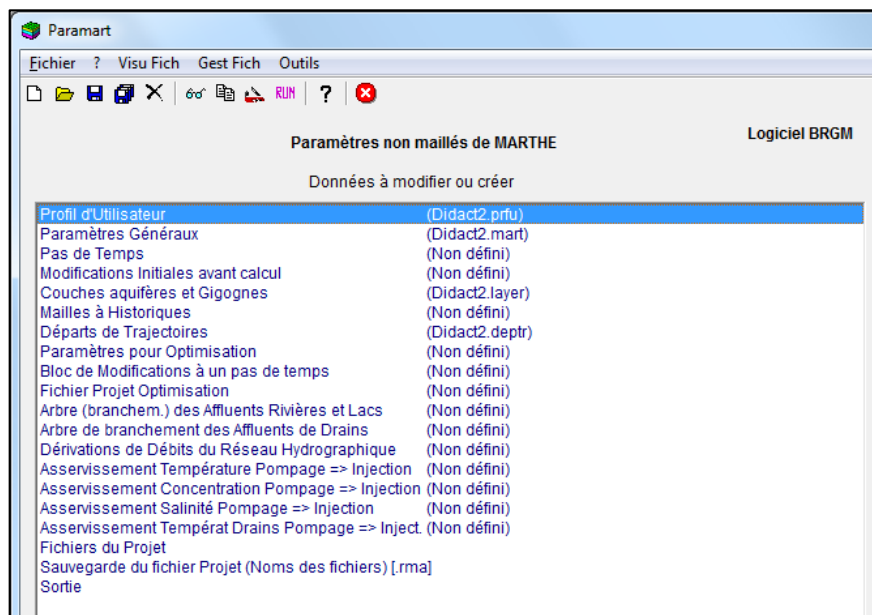



Figure 9 – Menu des « Paramètres non maillés ».

5.3.1. Profil d'utilisation

Le fichier « Profil d'utilisation » permet de fixer le type de modélisation de façon à appliquer un masque sur les paramètres et fichiers qui n'auront *a priori* pas besoin d'être définis par l'utilisateur. Ce fichier « Profil d'utilisation » est facultatif ; s'il n'est pas défini tous les paramètres et fichiers seront visibles. La définition de ce profil permet de trouver plus rapidement les paramètres et surtout facilite l'utilisation du logiciel pour les utilisateurs non experts. Le fichier « Profil d'utilisation » n'est pas exploité par le moteur de calcul. Il est exploité par le module de définition des paramètres de modélisation non maillés (icône , et par WinMarthe *sensu stricto*).

Dans notre exemple on double-clique sur la ligne « Profil d'utilisation » puis « Créer un nouveau profil d'utilisation » on sélectionne (en donnant la valeur « 1 ») les lignes : « Régime Transitoire » et « Transport de masse Classique » puis on valide par OK et on confirme. On sauvegarde alors ce fichier, en acceptant le nom par défaut proposé.

5.3.2. Paramètres généraux

Dans ce module des « Paramètres non maillés », on double-clique sur la première ligne « Paramètres généraux », puis « Préprocesseur », puis « Créer un nouveau fichier de paramètres ». On voit apparaître 12 lignes permettant chacune de sélectionner un paragraphe de paramètres généraux (Figure 10). Si on n'avait pas défini de profil d'utilisation, il y aurait eu 22 paragraphes, chacun comportant beaucoup plus de paramètres.

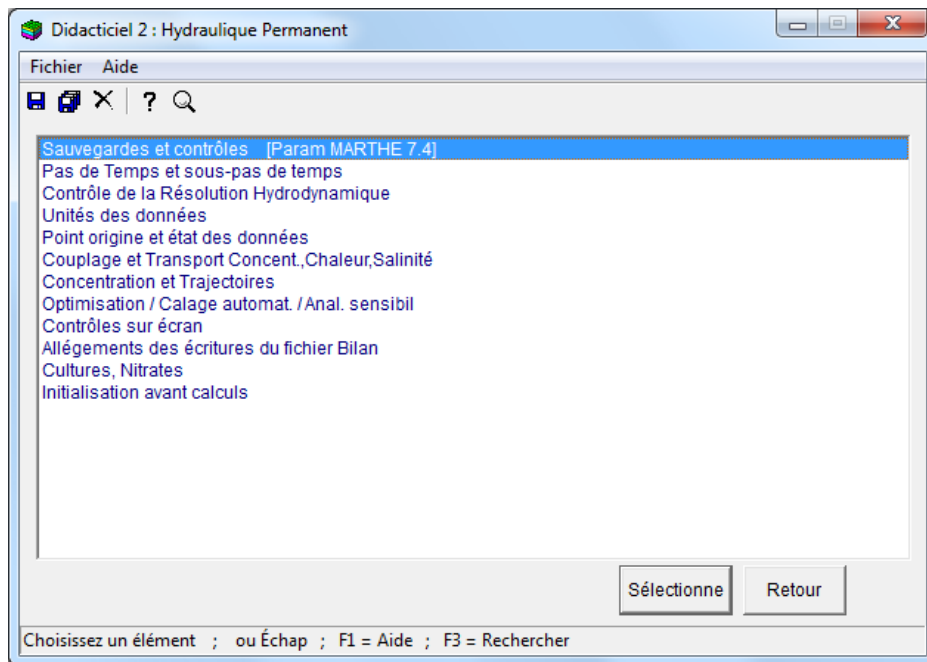


Figure 10 – Menu du fichier des « Paramètres généraux ».

Seuls quelques paramètres sont à définir, les autres sont laissés à leur valeur par défaut (c'est-à-dire « espace » ou « 0 »). Dans tous les cas, « espace » ou **0** signifie « **Non** ». On donnera la valeur **1** pour indiquer « **Oui** », d'autres options sont également possibles.

Paragraphe : « Sauvegardes et contrôles » :

Sélectionner :

1 = Fichier Liste détaillé
1 = Sauvegarde des Historiques de Bilans Hydrodynamiques.

Paragraphe « Contrôle de la Résolution Hydrodynamique »

20 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)
Perman = Régime Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe « Unités des données »

1e-4	=	Unité de Perméabilité des Aquifères en m/s (ou m ²)
1e-4	=	Unité de Débit en m ³ /s (kg/s si Gaz)
Année	=	Unité de Durée Hydroclimatique (sec,min,heu, jou, déca, moi, ann)
Jour	=	Unité de Temps (des Pas de modèle) (sec,min,heu, jou, déca, moi, ann)
0.1	=	Coefficient d'Anisotropie Verticale Kv/Kh de la Perméabilité
%	=	Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-] [% si en %]

Les unités laissées « vides » ou égales à 0 seront en Système International, à l'exception des « hauteurs hydroclimatiques (Pluie, ETP, Infiltrat., Rechar.) » qui sont par défaut en mm : charge hydraulique et coordonnées horizontales en mètre, stock d'eau en m³. Les hauteurs hydroclimatiques seront laissées en mm : comme la durée hydroclimatique a été choisie en « année », la recharge sera exprimée en mm/an. Le coefficient d'anisotropie verticale Kv / Kh est fixé à 0.1.

Paragraphe « Contrôles sur écran »

1	=	Contrôle des itérations Externes de résolution
----------	---	--

Paragraphe « Initialisation avant calculs » (dernière ligne de la liste des Paragraphes)

C'est dans ce paragraphe qu'on peut définir des modifications ponctuelles dans le maillage. Comme ce paragraphe correspond au pas de temps n°0, c'est-à-dire au régime hydraulique permanent, c'est ici aussi qu'on peut demander la sauvegarde de champs calculés au pas de temps n°0.

Flux d'infiltration :

Après avoir sélectionné le paragraphe « Initialisation avant calculs », on sélectionne « Nouvelles Actions », puis on choisit le *thème* « Paramètres hydrodynamiques classiques », puis l'*objet* « FLUX_INFILTR » (ou l'*objet* « RECHARGE »), et l'*action* « ZONE_CLIM = Modification par zone Climatique (zone de Sol ou zone Météo) ». On fixe alors (Figure 11) : Numéro de zone = 1, Valeur (de recharge) = **252.46** (mm/an).

Sauvegarde des champs de charge calculée et du champ de débit calculé :

Toujours dans le *thème* « Paramètres hydrodynamiques classiques », on choisit l'*objet* « CHARGE = Charge hydraulique », l'*action* « EDITION = Édition » et l'option « 1 = Indice d'écriture en Format Texte ». Dans ce même thème « Paramètres hydrodynamiques classiques », on choisit ensuite l'*objet* « DEBIT », l'*action* « EDITION = Édition », et l'option « 1 = Indice d'écriture en Format Texte ».

La Figure 12 montre que la demande de sauvegarde du champ de charge hydraulique apparaît en clair sous la forme « /CHARGE / EDITION I= 1; ». La demande de sauvegarde du champ de débit apparaît sous une forme similaire (avec cependant quelques options de plus)

On clique alors trois fois sur « Retour », puis on sauvegarde les données saisies. Celles-ci sont enregistrées dans le fichier *Didact2.mart*, appelé fichier des paramètres de MARTHE.

Ce fichier est une composante fondamentale d'un modèle MARTHE, regroupant l'ensemble des choix faits pour les options de calcul, unités des données, sauvegardes, contrôles, etc.

La Figure 12 présente la fin du fichier *Didact2.mart*, où une rubrique « Initialisation avant calculs » regroupe les informations fournies sur le flux d'infiltration et les demandes de sauvegarde du champ de charge et du champ de débit.

À l'issue des calculs, le champ de la charge hydraulique sera sauvegardé en format texte dans le fichier générique *chasim.out*, et le champ du débit dans le fichier de nom *debsim.out*.

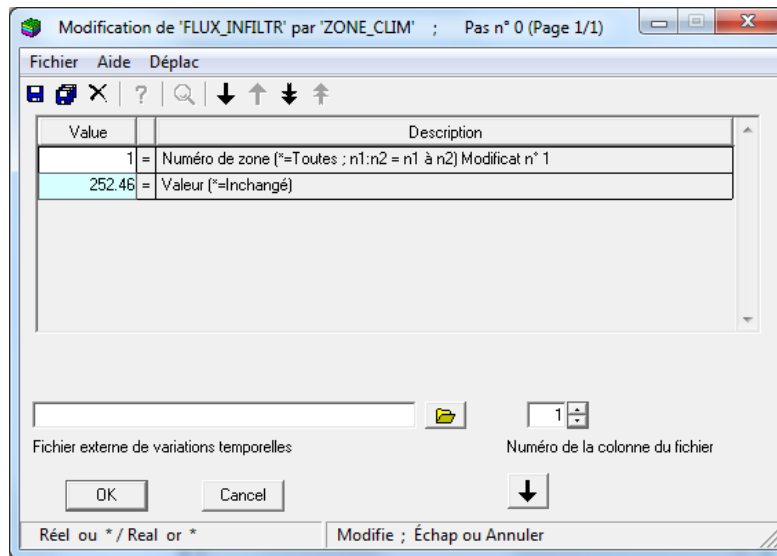


Figure 11 – Affectation d'une recharge de 252.46 mm/an dans la zone climatique n°1 (c'est-à-dire ici dans la zone de sol n°1).

```


*** Initialisation avant calculs          ***
/FLUX_INFILTR/ZONE_CLIM  Z=      1V=    252.46;
/CHARGE/EDITION          I= 1;
/DEBIT/EDITION           *= 1;V= 0;L= 0;S= 0;Z= 0;
/*****/***** Fin d'Initialisation
*** Fin du fichier des Paramètres Généraux ***

```


Figure 12 – Dernières lignes du fichier des paramètres *Didact2.mart*.

Il convient de remarquer que, contrairement à d'autres logiciels de modélisation, le choix a été fait pour MARTHE de ne pas systématiquement sauvegarder tous les champs à tous les pas de temps. En effet, il y a un très grand nombre de champs qui peuvent être sauvegardés (teneur en eau, température, densité, pression, etc.), ce qui représente un volume de données considérable. Avec de gros maillages et de nombreux pas de temps, une sauvegarde générale de tous les champs calculés occuperait un espace disque très important, et la plupart du temps inutile. C'est donc à l'utilisateur de choisir les champs qu'il souhaite sauvegarder, en indiquant à quels pas de temps il souhaite le faire.

6. Lancement du calcul et examen des résultats

Pour lancer les calculs il suffit de cliquer sur l'icône  située sur la première ligne de la barre d'outils inférieure, puis de valider le lancement des calculs avec le fichier *Didact2.rma*. Le calcul s'effectue en une fraction de seconde.

6.1. VÉRIFICATION PRÉLIMINAIRE DES BILANS HYDRAULIQUES

En premier lieu, avant un quelconque examen de la charge hydraulique calculée et du débit calculé, surtout lors du premier « run », il convient de vérifier que les calculs itératifs ont bien convergé. Dans ce but, on examine rapidement le fichier « bilandeb.txt », pour **bilan** (des) **déb**(its). Pour cela on utilise l'icône  en forme de lunettes, située sur la barre d'outils du bas et on sélectionne le fichier de nom *bilandeb.txt*. Un examen rapide montre que le calcul s'est arrêté après 6 itérations (externes). La « convergence globale », c'est-à-dire l'écart entre les débits d'entrée et de sortie est égal à $2.5 \cdot 10^{-6} \%$ (par rapport au plus grand terme). La « convergence interne » – critère plus sévère – qui est la somme des valeurs absolues des écarts entre entrées et sorties dans chaque maille, est égale à $4.7 \cdot 10^{-5} \%$. Cette convergence est parfaite, puisqu'en pratique il est généralement suffisant d'avoir une convergence interne de l'ordre de 1 %.

La Figure 13 montre le bilan global des débits dans les 3 couches, exprimé en $10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$ qui est l'unité choisie pour le débit. La Figure 14 présente les échanges entre couches. Par exemple : la couche n°1 reçoit une recharge de 28.8 unités de débit dont 26.3 passent dans la couche n°2. La couche n°2 reçoit 26.3 unités de débit (de la couche n°1) dont 19.1 passent dans la couche n°3, le reste étant le bilan sortant par les limites à charge imposée. La couche n°3 reçoit 19.1, (dont 12 sortent dans le pompage et le reste par les limites).

```

=====
                               Bilan Global : Pas de temps n°0
=====
- Bilan en unité de Débit : Pas de temps n°0 - t= 0.000 -----
Débits Entrant /Charges Impos. =      21.290
Débits Sortant /Charges Impos. =                               -38.089
Débits Entrant dans les Mailles=  1.115E-05
Débits Sortant des Mailles      =                               -12.000 (-12.000 Imposé)
Débit d'Infiltration/Évaporat. =      28.800
-----
                               Bilan Global =  1.229E-06


```

Figure 13 – Bilan global des 3 couches.

Débits échangés entre les 3 couches					
Contribution des couches					
Num	(> 0 si la couche exporte ; < 0 si elle reçoit)				
Couche	1	2	3	Recharg	Total
1	*	-26.28	0	28.8	2.5237
2	26.276	*	-19.06	0	7.2201
3	0	19.056	*	0	19.056

Figure 14 – Débits échangés entre les 3 couches.

6.2. EXAMEN DES RÉSULTATS OBTENUS

On quitte l'éditeur (qui avait été lancé par l'icône ) et on est renvoyé à WinMarthe.

6.2.1. Charge hydraulique calculée en régime permanent

On active le menu « Fichier » → « Fichier de champs simulés (Ouvrir) », ou plus simplement on frappe Control+R (« R » comme Résultats), et on choisit le fichier de nom *chasim.out*. Le champ de la charge calculée, le seul qui avait été demandé avec celui du débit, est alors copié dans le champ « Travail » et apparaît à l'écran, pour la couche courante (Figure 15).

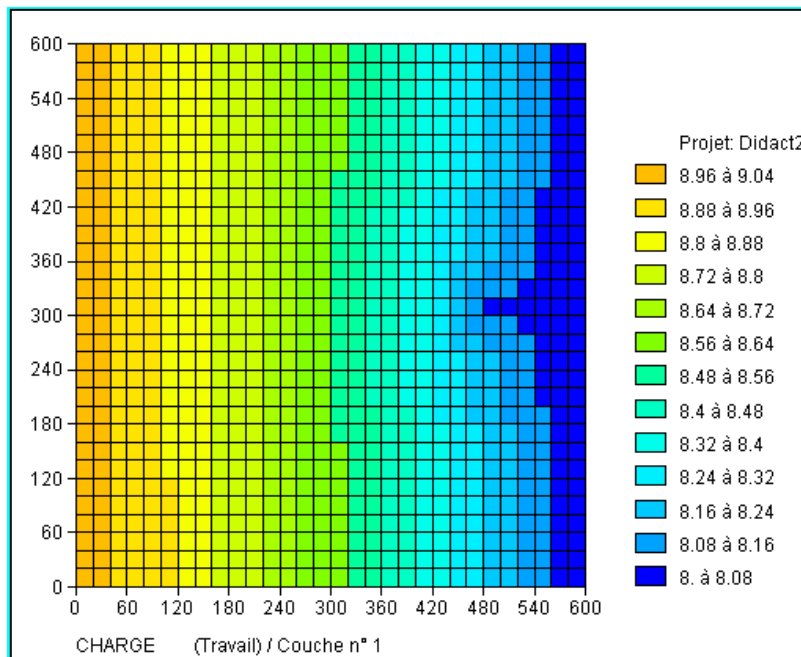




Figure 15 – Champ de la charge hydraulique calculée (couche n°1).

Il est possible de faire défiler les couches avec les flèches (, ... ) d'examiner une coupe verticale, de changer la répartition des plages colorées (éQui-réparties = Control+Q, ou Linéaires = Control+L, ou logariThme = Control+T), de masquer les contours de mailles

(Vue > Dessin des contours de mailles), de superposer des polygones « d'habillage », de placer des points d'identification (forages, etc.), ...

6.2.2. Isovaleurs de charge calculée

Pour tracer les isovaleurs, il faut utiliser le menu « Outils » → « Isovaleurs » → « Simples », ou directement frapper Control+I (« I » comme Isovaleurs), et on peut accepter ou modifier les valeurs par défaut. (Figure 16).

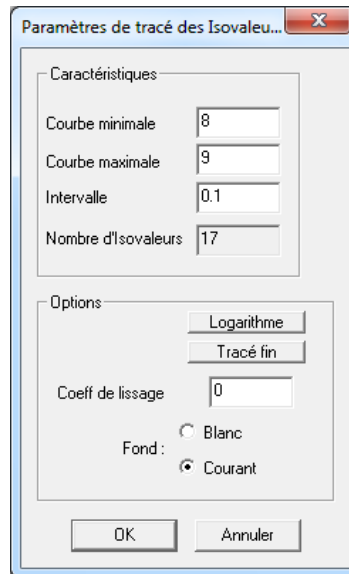



Figure 16 – Boîte de dialogue pour le calcul des isovaleurs.

On obtient alors un tracé des courbes isopièzes (Figure 17), dont on peut adapter les couleurs, épaisseurs et visibilité dans le menu « Gestion des polygones » (icône ).

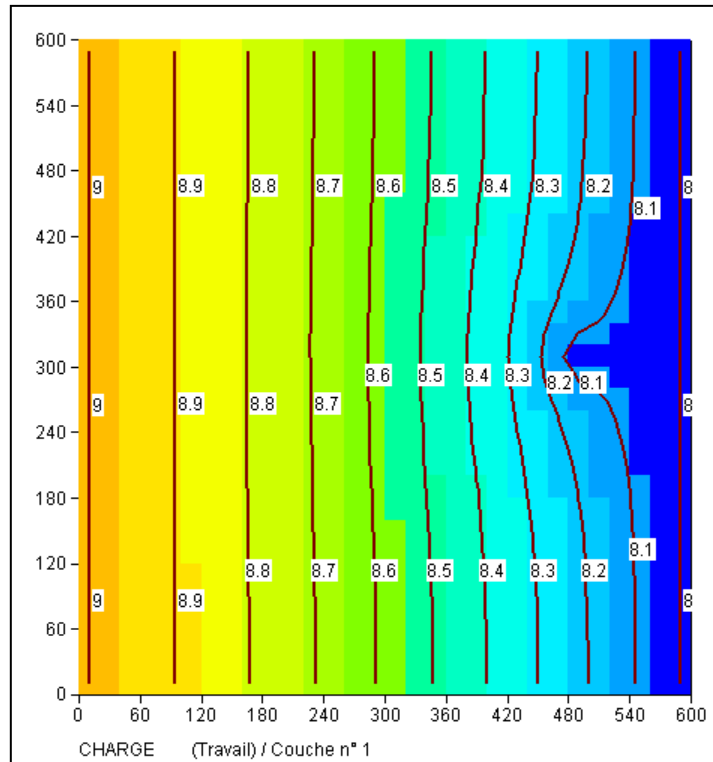



Figure 17 – Isovaleurs de la charge hydraulique calculée (couche n°1).

6.3. TRAJECTOIRES

Pour enrichir cette carte, on peut tracer quelques trajectoires d'écoulement, notamment celles qui arrivent au puits de pompage. Cette opération se déroule en quatre étapes : 1) sélection de l'option de calcul de trajectoires inverses (arrivant au puits de pompage), 2) désignation de la maille du puits de pompage comme origine des trajectoires inverses, 3) relance des calculs avec sauvegarde du tracé des trajectoires, 4) dessin des trajectoires en superposition à la carte piézométrique.

6.3.1. Option de calcul de trajectoires

Clic sur l'icône  pour ouvrir le menu des « Paramètres non maillés », double-clic sur la première ligne « Paramètres généraux », clic sur « Préprocesseur », puis sélection du Paragraphe « Concentration et Trajectoires ». Sélection de l'option « Trajectoires inverses »

Invers = Calcul de Trajectoires (1 = Oui ; -1 = Trajectoires inverses)

Clic sur « Retour » et sauvegarde des paramètres modifiés.

6.3.2. Départs de trajectoires

On sélectionne ensuite la ligne « Départs de trajectoires », puis on clique sur « Préprocesseur » et « Créer un nouveau fichier Départs de trajectoires ».

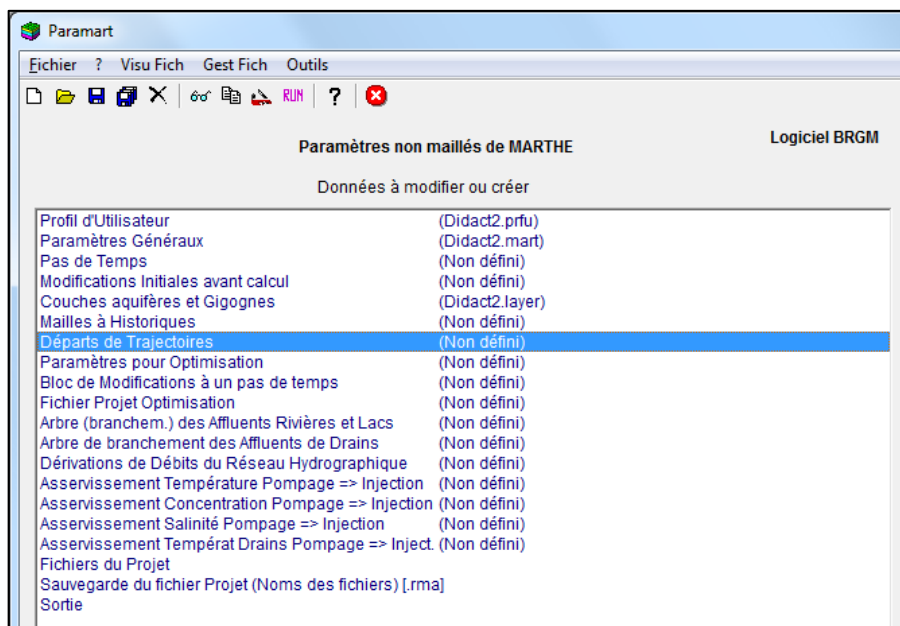


Figure 18 – Sélection du fichier des départs de trajectoires.

On positionne les départs de trajectoires sur des cercles centrés sur les 3 mailles du pompage (colonne n°25, ligne n°15, couches n°1 à n°3). On choisit un rayon de 15 mètres pour être un peu à l'extérieur de la maille de pompage, avec 28 points de départs répartis sur chaque cercle. On coche la colonne « Maille » (Figure 19) pour indiquer que les valeurs données sont des numéros de colonne, ligne, couche et non pas des coordonnées x, y et z. Le numéro de groupe, facultatif, sert à regrouper les trajectoires par lots (ici, un groupe de trajectoires par couche de modèle).

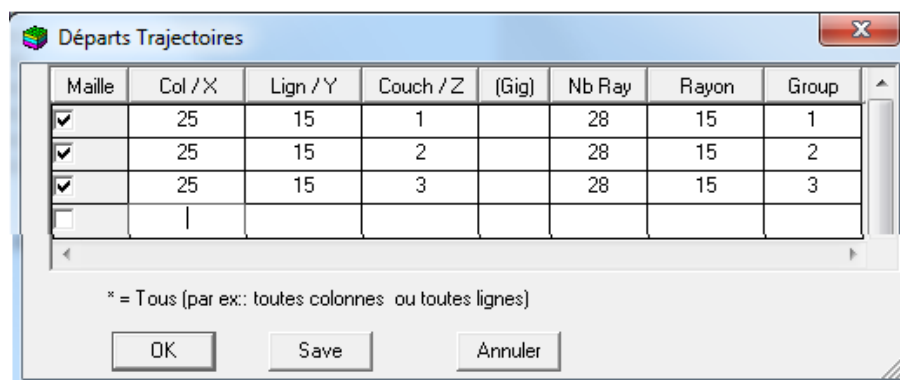



Figure 19 – Définition des départs de trajectoires.


On sort alors du tableur de définition des départs de trajectoires. Puis on sort du menu des « Paramètres non maillés », après avoir sauvegardé le fichier projet. Un fichier de nom *Didact2.deptr*, contenant les départs de trajectoires a été créé, et son nom a été ajouté dans le fichier projet *Didact2.rma*.

6.3.3. Calcul des trajectoires

On relance les calculs avec l'icône .

6.3.4. Tracé des trajectoires

Les trajectoires sont sauvegardées dans deux fichiers : le fichier *trajmar.out* (coordonnées, numéro de couche et temps) et le fichier *trajmar.blm* ; ce dernier est un fichier de points (x,y) qui peut être visualisé directement par WinMarthe, comme un polygone.

Pour tracer les trajectoires, cliquer sur l'icône  « Gestion des polygones » puis sur le bouton « Charger des polygones blm », et sélectionner le fichier *trajmar.blm*. On voit apparaître les trajectoires tracées pour un temps infini, puisque le calcul est réalisé en régime permanent (Figure 20).

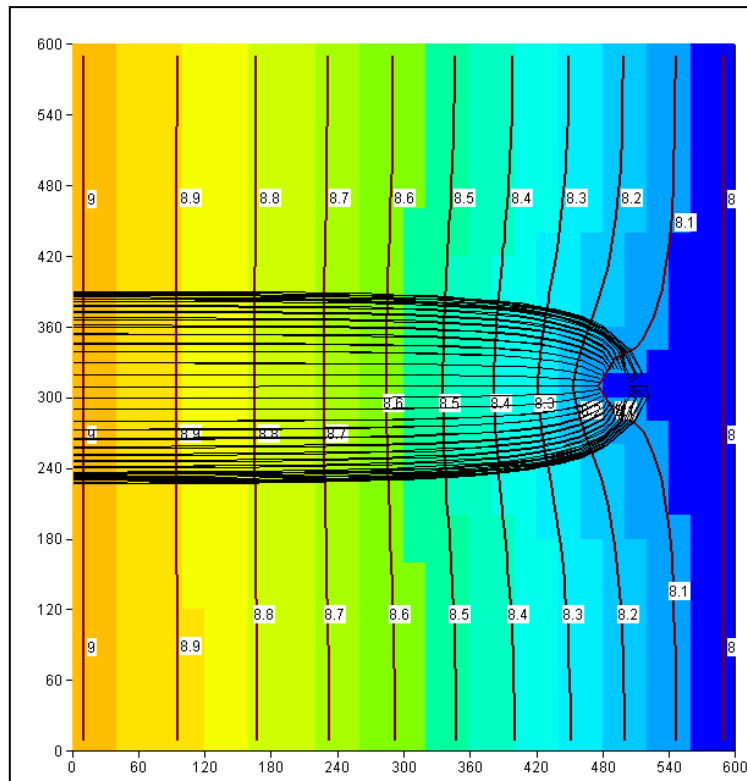


Figure 20 – Trajectoires (régime permanent).

Pour visualiser les trajectoires jusqu'à une date donnée, par exemple 100 jours, ce qui correspondrait à un périmètre de protection de 100 jours, il faut faire un calcul en régime transitoire (non décrit ici) tout en conservant le calcul de l'hydrodynamique en régime permanent. On définit par exemple un unique pas de temps de 100 jours. Les trajectoires sont alors calculées en régime transitoire, jusqu'à la date de fin de simulation. On peut également dessiner les isochrones (Figure 21), qui correspondent ici aux points d'arrivées des trajectoires (en rouge dans la couche n°1, moins perméable donc moins rapide, et en bleu dans la couche n°2).

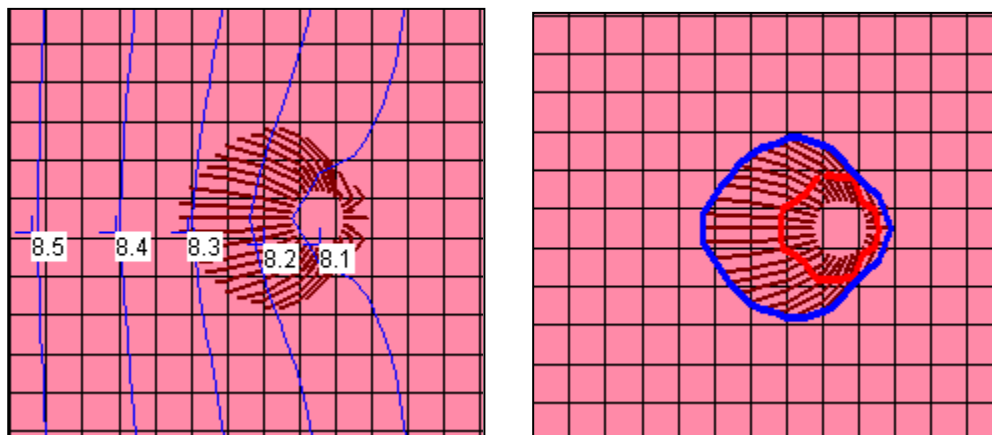




Figure 21 – Trajectoires pendant une durée de 100 jours.

MARTHE permet également de calculer et de visualiser les trajectoires correspondant à un champ de charge calculée en régime transitoire.

6.4. ANISOTROPIE VERTICALE DE PERMÉABILITÉ DANS LE Puits DE POMPAGE

Le puits de pompage est crépiné dans les 3 couches. Pour le simuler précisément on veut avoir la même charge hydraulique (inconnue) sur les 3 mailles des 3 couches correspondant à la colonne n°25, ligne n°15. Dans ce but on va définir une forte anisotropie verticale, d'une valeur de 500 par exemple, dans ces mailles. La perméabilité verticale sera donc égale à la perméabilité horizontale multipliée par 500.

Clic sur l'icône  pour ouvrir le menu des « Paramètres non maillés », double-clic sur « Paramètres généraux », « Préprocesseur », « Initialisation avant calculs », « Nouvelles Actions ». On se place dans le thème « Paramètres Hydrodynamiques classiques ». Il y a environ 40 objets, et on ne voit a priori pas d'« Anisotropie verticale ». On clique alors sur

l'icône d'« Aide »  ou bien sur la touche « F3 », ce qui provoque l'ouverture de la fenêtre présentée à la Figure 22. On recherche alors la chaîne de caractères « Anisotropie verticale », sans tenir compte des éventuels accents ou majuscules. On appuie sur « Chercher ». On ne trouve aucune réponse (« non trouvé »). Quand on ne trouve pas de réponse on peut appuyer deux fois sur la touche « Échap » puis sélectionner le thème « Tous les paramètres » ou même « Tous les paramètres : même hors profil d'utilisation » ce qui fait apparaître tous les objets (il y en a plus de 200).

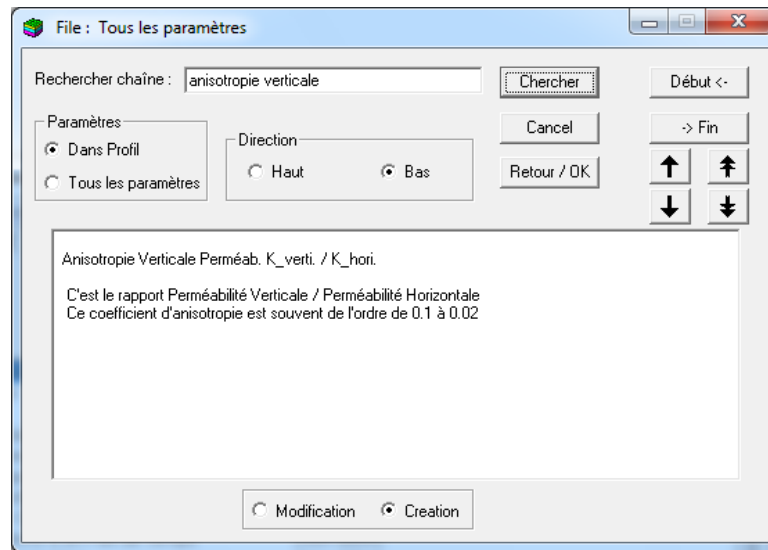




Figure 22 – Recherche de l'objet « Anisotropie verticale ».

On appuie alors à nouveau sur l'icône  pour rechercher « Anisotropie », puis sur « Chercher », et on trouve immédiatement la réponse « Anisotropie Horizontale de Perméabilité Kx / Ky ». L'icône  permet d'accéder à la rubrique suivante « Anisotropie verticale K_vertic. / K_horizont. ».

On appuie donc sur le bouton « Retour / OK » et on arrive sur l'objet « ANISO_VERTI = Anisotropie verticale ... ». On sélectionne cet objet, puis on choisit l'action « MAILLE = Modifications par mailles ». Dans la fenêtre de la Figure 23, on donne alors le numéro de colonne = 25, le numéro de ligne = 15, et le numéro de couche = 1:3 pour « 1 à 3 », ou bien « * » pour « toutes », et on fixe la valeur 500.

Cette modification apparaît en clair sous la forme à la fin du fichier *Didact2.mart* :

```
/ANISO_VERTI/MAILLE C= 25 L= 5 P= 1:3 V= 500;
```

(« C= » désigne la Colonne, « L= » désigne la Ligne, « P= » désigne le Plan, c'est-à-dire la couche, « V= » désigne la Valeur affectée).

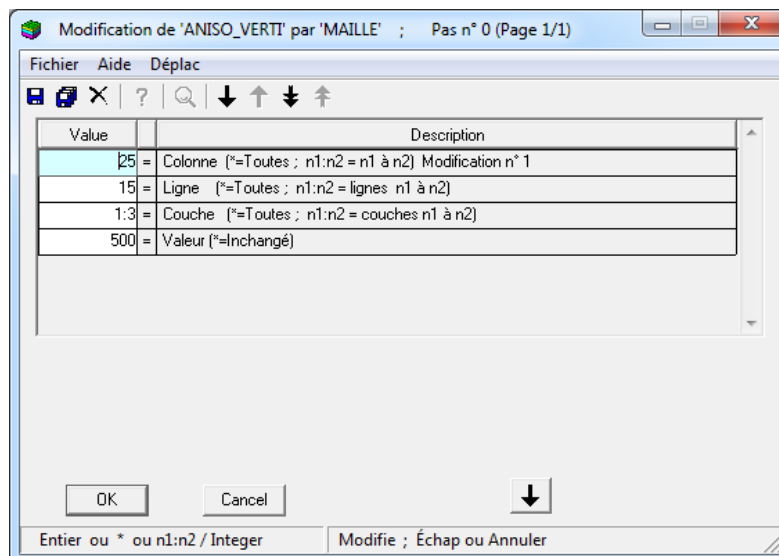


Figure 23 – Affectation d'une anisotropie verticale égale à 500 dans les 3 couches de la maille de pompage.

On relance les calculs avec l'icône .

L'examen des résultats montre que dans cet exemple les résultats sont quasiment inchangés. Dans le puits les charges hydrauliques sont maintenant quasiment identiques dans les trois couches, alors qu'elles présentaient auparavant une différence d'une dizaine de centimètres.

7. Calcul de la charge hydraulique en régime transitoire

À titre d'exemple on va réaliser une simulation hydrodynamique en régime transitoire.

On doit définir des paramètres supplémentaires nécessaires pour réaliser un calcul d'hydrodynamique en régime transitoire. Par sécurité, on va conserver le projet *Didact2.rma* inchangé, et en réaliser automatiquement une copie sous le nom *Didact2_Transi* qui sera le nouveau projet en régime transitoire. Pour faire cette opération, on utilise le menu « Fichier » → « Faire une copie du projet », et on choisit le nom *Didact2_Transi*. On ferme alors le projet *Didact2.rma* et on ouvre le projet *Didact2_Transi.rma*.

Au puits de pompage existant on va adjoindre deux autres puits de pompage situés dans la couche n°3 respectivement aux coordonnées $x = 450$ m, $y = 370$ m et $x = 450$ m, $y = 250$ m (c'est-à-dire respectivement dans la maille de colonne = 23, ligne = 12 et dans la maille de colonne = 23, ligne = 18). On considère que ces deux nouveaux puits sont crépinés uniquement dans la couche n°3. Dans chacun de ces trois puits on va pomper un débit égal à -130 (en 10^{-4} m³/s).

La simulation va commencer par un régime permanent sans aucun pompage, puis on introduira ces débits de pompage au pas de temps n°1. Le pompage sera poursuivi pendant 500 jours, puis les débits de pompage seront mis à zéro, et la simulation sera poursuivie pendant 500 jours supplémentaires.

Il y a deux nouveaux champs à définir :

- Le coefficient d'emmagasinement en nappe libre.
- Le coefficient d'emmagasinement en nappe captive.

Par le menu « Choix_Champ (F3) » → « Charger un nouveau champ » : on charge le champ de coefficient d' « emmagasinement libre », on sélectionne alors les mailles de tout de domaine, et on leur affecte la valeur 25 (en % puisqu'on définira l'unité de coefficient d'emmagasinement libre en %). On charge alors le champ du coefficient d'« emmagasinement captif », et on affecte la valeur $1e-5$ (en m⁻¹) aux mailles de tout le domaine.

7.1. DÉFINITION DES PARAMÈTRES NON MAILLÉS

On actionne l'icône  pour faire apparaître le menu général des « Paramètres non maillés ».

7.1.1. Paramètres généraux

On double-clique sur la première ligne « Paramètres généraux », puis « Préprocesseur ». On apporte alors, comme illustré ci-dessous, quelques modifications, puis des ajouts dans les paragraphes « Contrôle de la Résolution Hydrodynamique » et « Unités des données »

Paragraphe « Contrôle de la Résolution Hydrodynamique »

20 = Nombre Maxi d'itérati. par pas de temps de calcul suivant le pas n°0

20 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Init.)

Transit = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe « Unités des données »

0 = Unité de coefficient d'Emmagasinement Captif en [-] ou [m-1]

% = Unité de coefficient d'Emmagasinement Libre en [-] ['%' si en %]

Jour = Unité de Temps (des Pas de modèle) (sec, min, heu, jou, déca, moi, ann)

Spécif = Emmagasin. Captifs lus (0=Hydrogéol. ; 1=Spécifiques ; 2=Compressib.)

7.1.2. Mailles à historiques

On va définir les emplacements dans lesquels on veut mémoriser l'évolution temporelle des valeurs calculées au cours du temps.

Dans le menu général des « Paramètres non maillés », on clique sur la ligne « Mailles à Historiques ». On clique alors sur « Préprocesseur » puis « Créer un nouveau fichier des Historiques ».

On voit apparaître une liste des champs, correspondant au profil d'utilisation, pour lesquels on peut demander un historique dans certains points du domaine. On choisit le champ « Charge hydraulique ». On clique alors sur « Ajout » pour ajouter des points pour ce champ. On va sélectionner les trois mailles de la couche n°1 situées à l'aplomb des pompes.

On choisit « Centre d'une maille définie par Colonne, Ligne, Couche ». On introduit alors les coordonnées du premier point pour lequel on souhaite mémoriser l'évolution de la charge hydraulique : Colonne = 25, Ligne = 15, Couche = 1, puis Colonne = 23, Ligne = 12, Couche = 1, et enfin Colonne = 23, Ligne = 18, Couche = 1.

7.1.3. Définition des pas de temps

Pour simuler les deux périodes de 500 jours, on va faire intervenir 36 pas de temps de modèle dont les dates de fin de pas de temps, exprimées en jours, sont données dans le Tableau 2 (les temps croissent de gauche à droite, et de ligne en ligne).

0.1	0.2	0.5	1	2	5	10	20	50	100	150	200	250
300	350	400	450	500								
500.1	500.2	500.5	501	502	505	510	520	550	600	650	700	750
800	850	900	950	1000								

Tableau 2 – Dates des 36 pas de temps de la simulation de l'hydrodynamique en régime transitoire.

Dans le menu général des « Paramètres non maillés », on double-clique sur la ligne « Pas de temps ». On clique alors sur « Préprocesseur » puis « Créer un nouveau fichier des Pas

de temps ». On accepte 0.0 comme date de début de la simulation (c'est la date du pas de temps n°0). On donne la valeur fictive 1 (jour) comme « Durée des pas de temps s'ils sont uniformes ». On demande la création automatique de 36 pas de temps.

On clique alors sur « Définition des dates de tous les pas de temps » puis « Définition par tableur intégré ». On définit alors les dates des pas de temps n°1 à 36 en leur donnant les valeurs du Tableau 2.

Pas de temps numéro zéro

On est par défaut dans le pas de temps numéro zéro, qui correspond au régime permanent.

- On annule le débit de pompage (qui avait initialement été fixé à -12). On clique donc sur « Nouvelles Actions » puis → « Paramètres hydrodynamiques classiques » → « DEBIT » → « MAILLE » et dans la maille du puits, de colonne = 25, Ligne = 15, Couche = 3, on met la valeur 0.
- On demande la sauvegarde du champ de la charge calculée. On clique sur → « Paramètres hydrodynamiques classiques » → « CHARGE » → « EDITION », et on donne la valeur « 1 » pour avoir une sauvegarde.
On clique alors sur « Retour ».

Pas de temps numéro 1 (date = 0.1 jour)

C'est le début du régime transitoire. On va introduire les trois débits de pompage égaux à $-130 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$.

On demande la consultation du pas de temps n°1 :

- Choix d'un pas de temps → Numéro 1.
- « Nouvelles Actions » puis → « Paramètres hydrodynamiques classiques » → « DEBIT » → « MAILLE » et dans la maille de colonne = 25, ligne = 15, couche = 3 : on met la valeur -130. On fait la même opération dans les mailles colonne = 23, ligne = 12, couche = 3, puis dans la maille de colonne = 23, ligne = 18, couche = 3.

Pas de temps numéro 18 (date = 500 jours)

On demande la sauvegarde des champs de « CHARGE », « %SATURAT » et « EPAISSEUR_EAU ».

Pas de temps numéro 19 (date = 500.1 jours)

On arrête le pompage, pour observer la remontée. On introduit donc un « DEBIT » égal à 0 dans les 3 mailles correspondant aux pompages (dans lesquelles on avait introduit un débit de -130).

Pas de temps numéro 36 (date = 1000 jours)

On demande la sauvegarde du champ de la charge hydraulique calculée.

7.2. LANCEMENT DES CALCULS

Les calculs se réalisent en quelques instants. L'examen du fichier « *histobil_debit.prn* » (historique du bilan des débits), avec Excel ® ou son équivalent, montre que la convergence est très bonne : le taux de non convergence interne est toujours inférieur à 10^{-4} %, sauf au début de la remontée ou il atteint 4 %. Ceci est dû au choc résultant de l'arrêt brutal des pompages, et aux fortes variations de charge qui en résultent. On voit également dans ce fichier qu'en fin de pompage il y a 56 mailles dé-saturées.

On introduit donc un coefficient de sous-relaxation égal à 0.3, et on augmente parallèlement les nombres maximum d'itérations.

Paragraphe « Contrôle de la Résolution Hydrodynamique »

90 = Nombre Maxi d'itérations par pas de temps de calcul suivant le pas n°0
 50 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)
 0.3 = Coefficient de sous-Relaxation des calculs [Déf=1]

Après avoir relancé les calculs, l'examen du fichier « *histobil_debit.prn* » montre que la convergence est très bonne : le taux de non convergence interne est toujours inférieur à 10^{-3} %, sauf au début de la remontée ou il atteint 0.3 % (pendant une très courte durée).

7.3. RÉSULTATS OBTENUS

La Figure 24 montre le champ de la charge hydraulique simulée dans la couche n°3 après le régime permanent initial et après 500 jours de pompage. Après 500 jours de pompage (Figure 25) on remarque que :

- Dans la couche n°1 : une large zone du domaine est dénoyée
- Dans la couche n°2 : la maille du pompage central est dénoyée

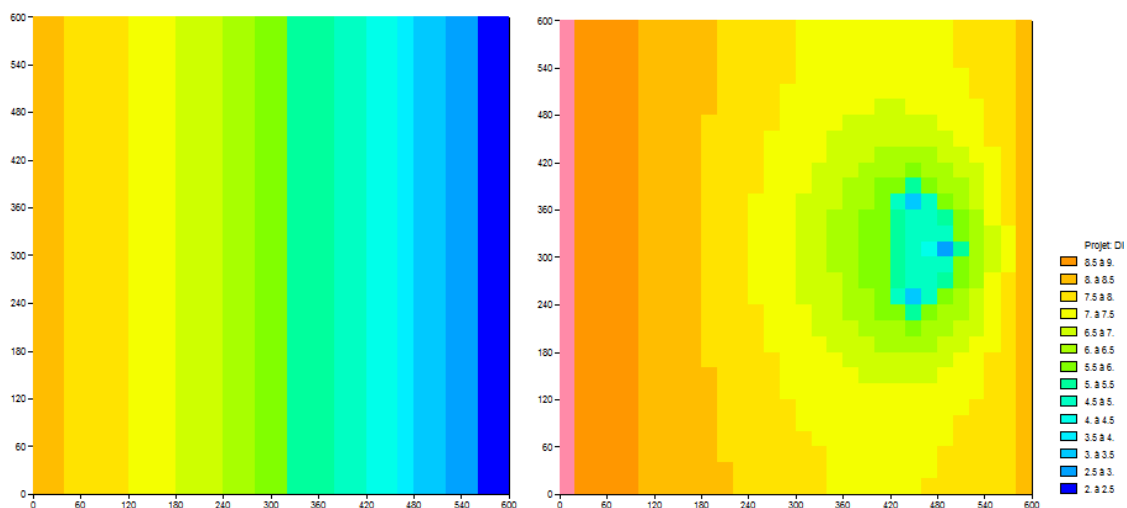


Figure 24 – Charge hydraulique dans la couche n°3 :
 À gauche : en régime permanent sans pompage ; à droite : après 500 jours de pompage.

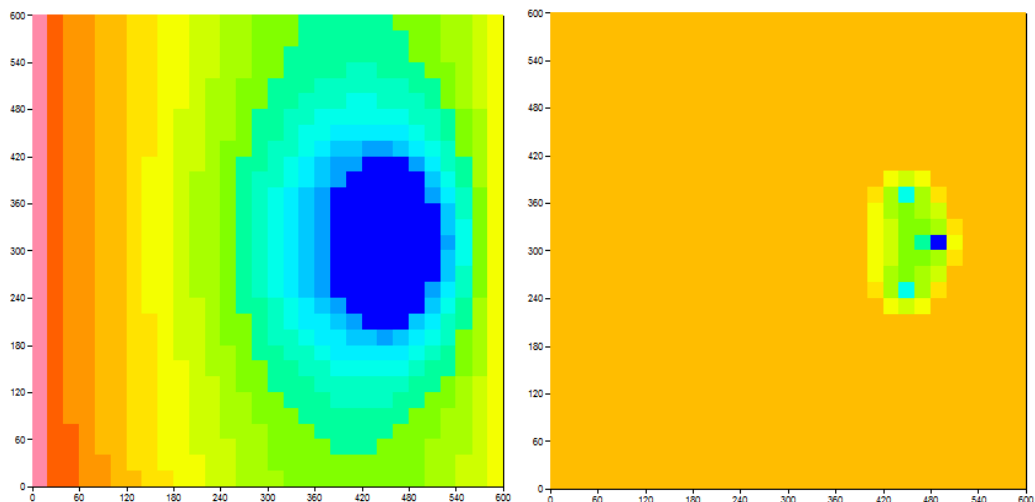


Figure 25 – Pourcentage de saturation en eau après 500 jours de pompage.
 À gauche : dans la couche n°1 ; à droite : dans la couche n°2.
 La couleur bleu foncé indique les mailles quasi-dénoyées.

La Figure 26 réalisée à partir du fichier « histobil_debit.prn » montre l'évolution du débit de déstockage dans la nappe. Ce débit devient quasi nul après 250 jours, date à laquelle un régime permanent est quasi atteint.

La Figure 27 réalisée à partir du fichier « historiq.prn » montre l'évolution de la charge hydraulique dans la couche n°1 à l'aplomb du puits central et d'un des deux puits voisins : il apparaît que les évolutions sont régulières malgré des dénoyages de la couche n°1 et de la couche n°2 pour le puits central. On a vu que la convergence des débits était très bonne, avec le schéma « Pseudo-Non-Saturé » utilisé par défaut.

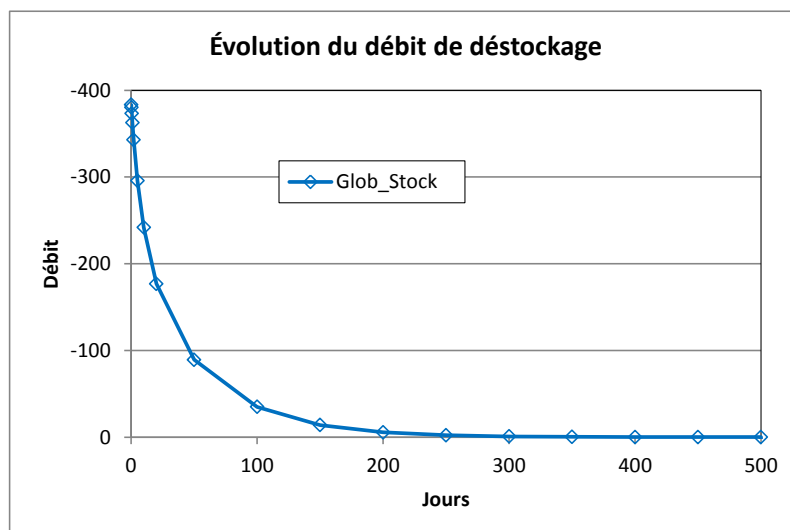


Figure 26 – Évolution du débit de déstockage de la nappe.

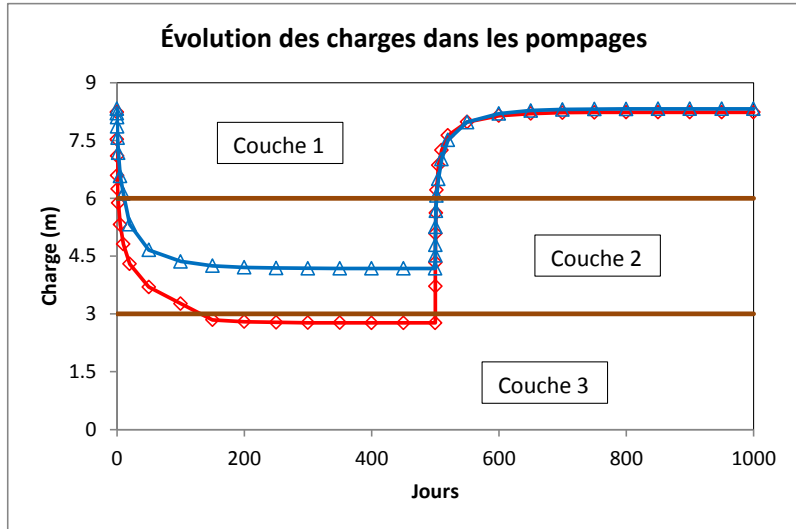


Figure 27 – Évolution de la charge hydraulique dans la couche n°1 à l'aplomb du puits central (en rouge) et d'un des deux puits voisins.

8. Simulation du transfert de masse

Contrairement à d'autres logiciels de modélisation, le code de calcul MARTHE permet un calcul du transport de masse totalement couplé avec le calcul de l'hydrodynamique, ce qui est optimal pour les schémas complexes, en nappe libre avec dénoyages ou en zone non saturée, et surtout quand il y a des interactions entre le transport et le champ de vitesse : densité du fluide modifiée par la salinité et la température, viscosité influencée par la température, etc.

La mise en œuvre des calculs de transfert de masse avec le code MARTHE est décrite par Thiéry (2015b), dans le rapport [BRGM/RP-64765-FR](#).

On va repartir de l'exemple de calcul d'hydrodynamique en régime permanent : projet *Didact2.rma*. On ferme donc le projet courant et on ouvre le projet *Didact2.rma* qui avait été sauvegardé.


On va donc définir les paramètres supplémentaires nécessaires pour poursuivre le calcul d'hydrodynamique par un calcul de transport en régime transitoire. Par sécurité, on va conserver le projet *Didact2.rma* inchangé, et en réaliser automatiquement une copie sous le nom *Didact3* qui sera le nouveau projet avec transport. Pour faire cette opération, on utilise le menu « Fichier » → « Faire une Copie du Projet » et on choisit le nom *Didact3*. On pourrait choisir de créer cette copie dans un dossier différent, mais ce n'est pas nécessaire.

Tous les fichiers du projet *Didact2.rma* sont copiés, dans l'état, sous le nom *Didact3*. En revanche les éventuels fichiers inclus, par exemple dans un fichier de pas de temps [.pastp], ne sont pas copiés.

Cette opération de copie est également pratique pour conserver un projet dans un état donné pour archivage, pour exporter tous les fichiers relatifs à un projet pour transmission à un autre modélisateur ou vers un autre ordinateur.

On ferme alors le projet courant et on ouvre le projet *Didact3.rma*.

8.1. DÉFINITION DES PARAMÈTRES NON MAILLÉS

On actionne l'icône  pour faire apparaître le menu général des « Paramètres non maillés ».

8.1.1. Paramètres généraux

On double-clique sur la première ligne « Paramètres généraux », puis « Préprocesseur ». On apporte alors, comme illustré ci-dessous, quelques modifications, puis des ajouts dans les paragraphes « Couplage et Transport » et « Concentration et Trajectoires »

Paragraphe « Pas de temps et sous-pas de temps »

12 = Nombre de sous-pas de temps de modèle	[Défaut=1]
--	------------

(Pour simplifier, on va créer ultérieurement 3 pas de temps de modèle de durée 12 mois, subdivisés chacun en 12 sous-pas de temps d'une durée d'un mois).

Paragraphe « Unités des données »

Mois = Unité de Temps (des Pas de modèle) (sec,min,heu, jou, déca, moi, ann)
mug/m3 = Unité de Concentration en kg/m3
mug = Unité de Masse en kg

Les unités « mug » correspondent à « µg », on pourrait les remplacer par $1 \cdot 10^{-9}$ kg.

Paragraphe « Couplage et Transport »

TVD = Schéma de Transport [0=Diff_Finies ; 1=Random_W ; 2=Caract=MOC ; 3=TVD]
10 = Dispersivité Longitudinale (m) [* = Spatialisée]
1 = Dispersivité Transversale (m) [* = Spatialisée]

On utilise la méthode de transport TVD, qui est très performante. On conserve le nombre maximal d'itérations par défaut qui est égal à 20.

Paragraphe « Concentration et Trajectoires »

1 = Calcul de Concentration
Transit = Régime du Transport de Concentration [0=Transitoire ; 1=Permanent]
2 = Coefficient de Retard (sauf si calcul en ZNS) [Déf=1]

Par défaut le transport est en régime transitoire, mais il est plus lisible de le préciser.

On clique sur « retour » 2 fois de suite et on sauvegarde les modifications de paramètres généraux.

8.1.2. Définition des pas de temps

On veut définir 36 pas de temps de modèle sous forme de 3 « pas de temps de modèle » de 12 mois (chacun étant subdivisé en 12 sous-pas de temps égaux). Un 'pas de temps de modèle', contrairement à un 'pas de temps interne de calcul', est un pas de temps lors duquel on peut introduire des actions : modification de débits de pompage par exemple, ou sauvegarde de résultats de calcul.

Dans le menu général des « Paramètres non maillés », on double-clique sur la ligne « Pas de temps ». On clique alors sur « Préprocesseur » puis « Créer un nouveau fichier des Pas de temps ». On accepte 0.0 comme date de début de la simulation (c'est la date du pas de temps n°0). On demande la création automatique de 3 pas de temps, et on donne la valeur 12 (mois) comme « Durée des pas de temps s'ils sont uniformes ».

On demande alors la consultation du pas de temps n°1 pour introduire le flux massique dans la zone contaminée : on sélectionne « => Choix d'un pas de temps » et on incrémente à 1 le « numéro du pas de temps à consulter » On choisit alors « Nouvelles Actions » (Figure 28), puis → *Thème* « Transport, Densité, Trajectoires ».

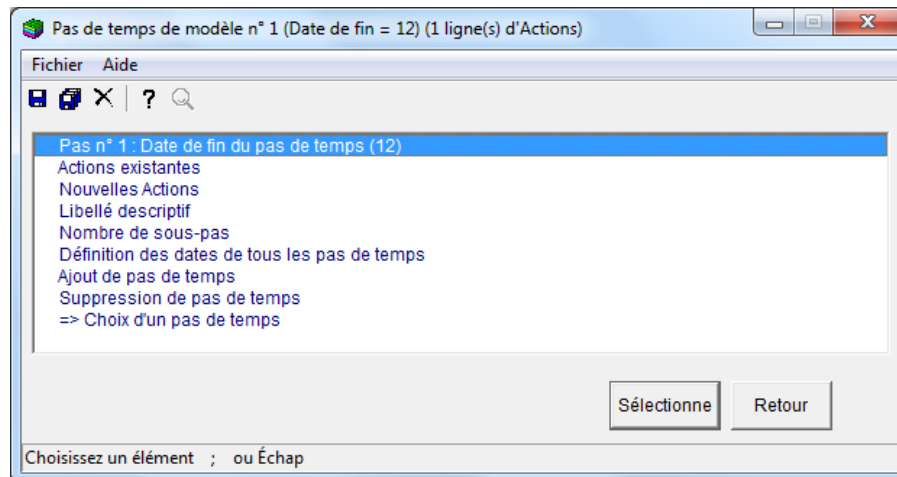


Figure 28 – Création d'une « Action » ou « Modification » au pas de temps n°1.

Puis l'objet « QMASS_CONC = Débit Massique Concentration » (Figure 29) → « Modifications par Mailles ». On fixe alors la valeur $1.0519 \cdot 10^5$ ($\mu\text{g}/\text{mois}$ par maille de 400 m^2) dans le pavé « Colonnes 5 à 11, Lignes 12 à 18, Couche 1 » (Figure 30) et on clique OK. Cette modification sera prise en compte à partir du début du premier sous-pas de temps de ce pas de temps de modèle n°1.

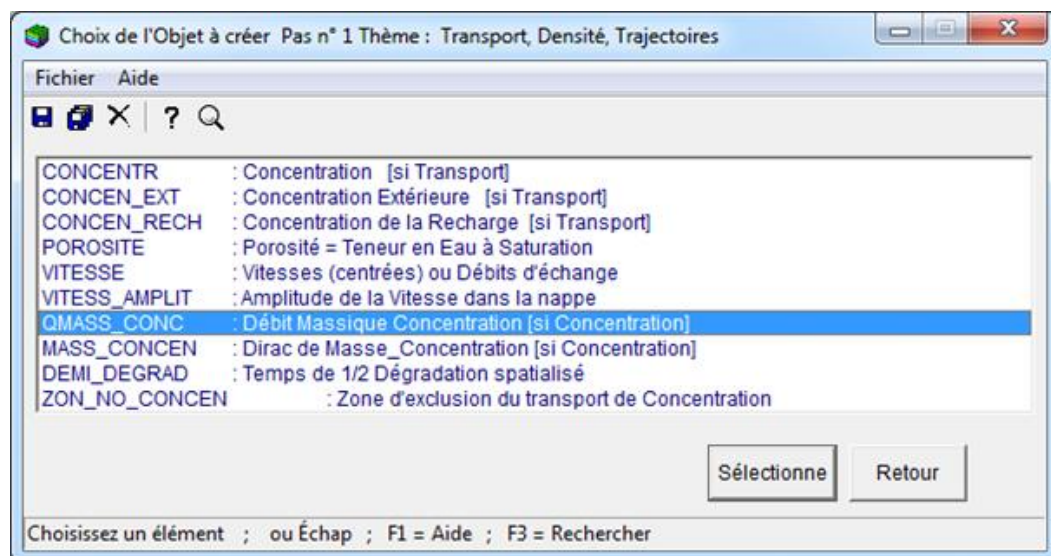


Figure 29 – Sélection de l'objet « Débit Massique Concentration » au pas de temps n°1.

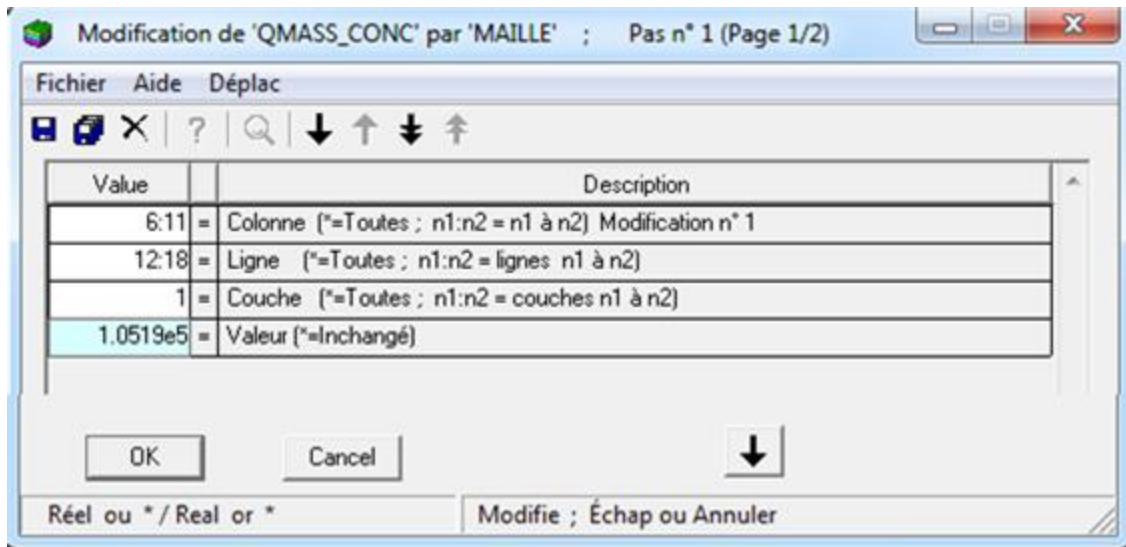


Figure 30 – Définition de la valeur du Débit Massique Concentration au pas de temps n°1.

On va également demander la sauvegarde du champ de concentration calculée aux pas de temps n°1, 2 et 3, c'est-à-dire après 12, 24 et 36 mois. La concentration sera sauvegardée en clair, en format texte, dans le fichier de nom générique *chasim.out*. On clique à nouveau sur le thème « Transport ... », on choisit alors l'objet « CONCENTR = Concentration », puis on choisit l'action « EDITION » et on donne « 1 » comme valeur d'indice d'édition (sauvegarde en format texte), en laissant inchangés les autres champs.

On va répéter cette opération de demande de sauvegarde du champ de concentration calculée aux pas de temps n°2 et n°3 (On ne redéfinira pas « QMASS_CONC = Débit Massique Concentration » à ces pas de temps, car dans MARTHE, toutes les affectations subsistent jusqu'à ce qu'elles soient éventuellement modifiées).

Pour changer de pas de temps, on appuie sur le bouton « Retour », puis dans le menu qui apparaît (Figure 31), on choisit l'option « => Choix d'un pas de temps ».

On choisit le pas de temps n°2 et on introduit alors la même demande de sauvegarde du champ « CONCENTR », et on fait la même opération pour le pas de temps n°3.

Puis on choisit « Retour » deux fois et on sauvegarde la description des pas de temps qui apparaîtra en clair dans le fichier *Didact3.pastp*.

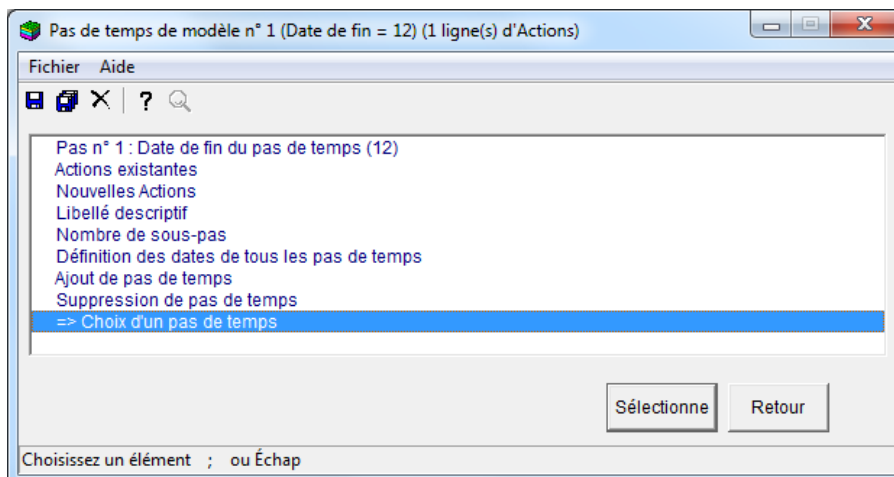


Figure 31 – Changement de pas de temps.

8.1.3. Définition des mailles à historiques

On va définir les emplacements où on veut mémoriser l'évolution temporelle des valeurs calculées au cours du temps.

Dans le menu général des « Paramètres non maillés », on clique sur la ligne « Mailles à Historiques » (Figure 32). On clique alors sur « Préprocesseur » puis « Créer un nouveau fichier des Historiques ».

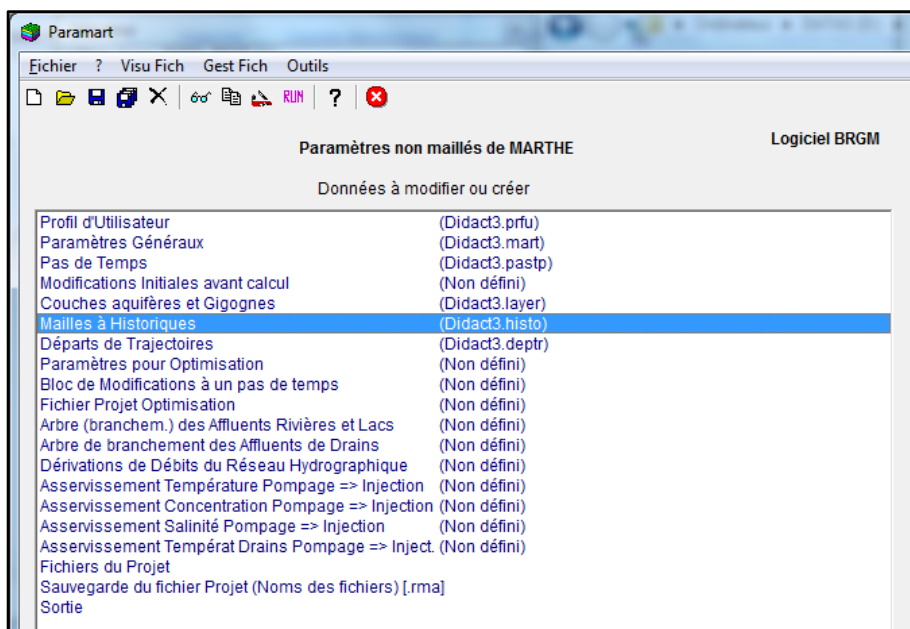


Figure 32 – Définition des mailles à historiques.

On voit apparaître une liste des champs, correspondant au profil d'utilisation, pour lesquels on peut demander un historique dans certains points du domaine. On choisit le champ « Concentration ». On clique alors sur « Ajout » pour ajouter des points pour ce champ.

On choisit alors « Point exact défini par X, Y, Couche » puisque les points choisis ne sont pas situés exactement au centre d'une maille (Figure 33).

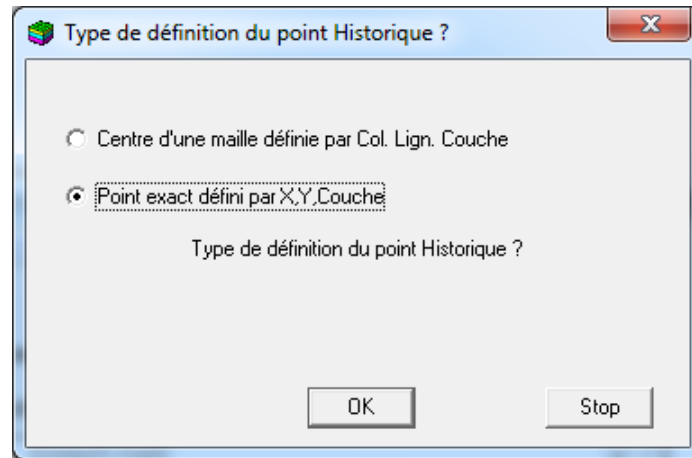


Figure 33 – Type de définition d'un historique.

On introduit alors les coordonnées du premier point pour lequel on souhaite mémoriser l'évolution de la concentration et on lui donne l'identificateur « P1 » (Figure 34).

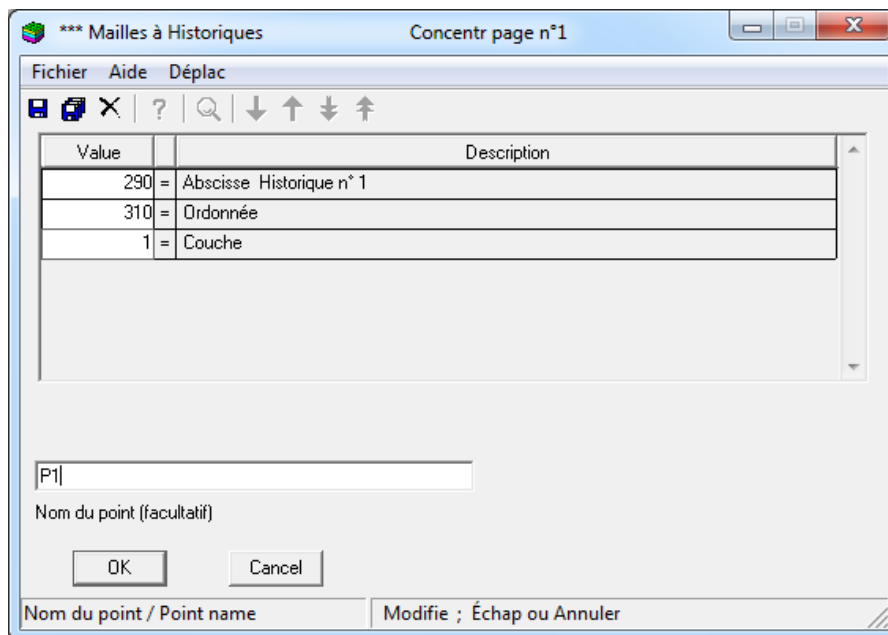


Figure 34 – Définition des coordonnées d'un emplacement d'historique.

On fait la même opération « Ajout » → « Point exact » puis (390, 310 Couche 1) pour le point P2, puis on continue en fixant ces mêmes coordonnées mais pour la couche n°2 (P3 et P4), puis pour la couche n°3 (P5 et P6).

On clique alors sur « Retour » deux fois et on sauvegarde. Les coordonnées des mailles à historique sont sauvegardées, en clair, dans le fichier *Didact3.histo* (Figure 35).

/Concentr	/HISTO/	=	/XCOO:X=	290Y=	310P=	1;P1
/Concentr	/HISTO/	=	/XCOO:X=	390Y=	310P=	1;P2
/Concentr	/HISTO/	=	/XCOO:X=	290Y=	310P=	2;P3
/Concentr	/HISTO/	=	/XCOO:X=	390Y=	310P=	2;P4
/Concentr	/HISTO/	=	/XCOO:X=	290Y=	310P=	3;P5
/Concentr	/HISTO/	=	/XCOO:X=	390Y=	310P=	3;P6
*** Fin du fichier des 'Mailles à Historique'						***


Figure 35 – Fichier des « Mailles à Historiques ».

Après avoir sauvegardé le fichier projet, on double-clique sur « Sortie » dans le menu général des « Paramètres non maillés ». On est alors retourné dans WinMarthe *sensu stricto*.

9. Lancement du calcul de transport et examen des résultats

Pour lancer les calculs on clique sur l'icône  située sur la première ligne de la barre d'outils du bas. Le calcul s'effectue en quelques secondes.

9.1. VÉRIFICATION PRÉLIMINAIRE DES BILANS

Comme précédemment, on examine rapidement le fichier « bilandeb.txt », en utilisant l'icône . Un examen rapide montre que le calcul s'est effectué correctement. Pour respecter les contraintes de la méthode TVD (nombre de Courant ne dépassant pas 1), chacun des 36 pas de temps de modèle a été automatiquement subdivisé en 3, soit 108 pas de temps de calcul. À la fin du calcul le bilan global débit d'entrée – débit de sortie est équilibré à moins de 1/1000 de pourcent (Figure 36). On voit aussi que le régime permanent est loin d'être atteint, car au dernier pas de temps seule 0.5 % de la masse provenant de la zone contaminée ($4.4181e+06$) est captée par le puits ($-2.5538e+04$).


```

===== Pas de temps n°36 - t= 36.000
----- Cumul des masses 'Concentration'      Dans le pas      Depuis début simul.
          Sortant par les Limites = -6.362          -19.70
    Entrant dans les mailles Internes = 4.4181E+06    1.5905E+08
    Sortant par les mailles Internes = -2.5538E+04    -1.1482E+05
          Stockage = 4.3927E+06                    1.5894E+08
    [Stockage Positif (Entrant)] = 4.3927E+06        1.5894E+08
    [Stockage Négatif (Sortant)] = -3.1091E-10       -2.9156E-02
    Écart de bilan de masse ou de chaleur= -182.0    -1166.
          (%) = 4.1191E-03                          7.3306E-04

    Masse totale (phase mobile) = 1.5894E+08
  
```

Figure 36 – Bilan de masse cumulé après 3 ans.

9.2. EXAMEN DE LA CONCENTRATION CALCULÉE



On quitte l'éditeur de texte (qui avait été lancé par l'icône ) et on est retourné dans WinMarthe.


9.2.1. Champ de la concentration calculée

On active le menu « Fichier » → « Fichier de champs simulés », ou plus simplement on frappe Contr+R), et on choisit le fichier de nom *chasim.out*. Ce fichier contient le champ de la charge hydraulique calculée au pas de temps n°0 et la concentration des pas de temps n°12, 24 et 36. On choisit le champ « CONCENTR », puis le pas de temps n°36, à la date 36 mois, en double-cliquant sur cette date, ou en appuyant sur le bouton « Visualiser » (Figure 37). Le champ de concentration est alors placé dans le champ « Travail », et

apparaît à l'écran, pour la couche courante, qu'on peut modifier en se plaçant par exemple dans la couche n°3 (Figure 38).

On peut immédiatement tracer les isovaleurs de concentration, par le menu « Outils » → « Isovaleurs » → « Simples », ou en frappant directement le raccourcis Control+I, dont la Figure 39 présente un extrait.

Il est également possible en 2 clics de souris d'examiner le champ de la concentration en coupe verticale. On utilise l'icône  pour sélectionner une ligne, et on double-clique sur la ligne dans l'axe du puits → On clique sur l'icône  pour passer en coupe verticale (Figure 40).

(Pour repasser en visualisation en plan, on utilise l'icône ).

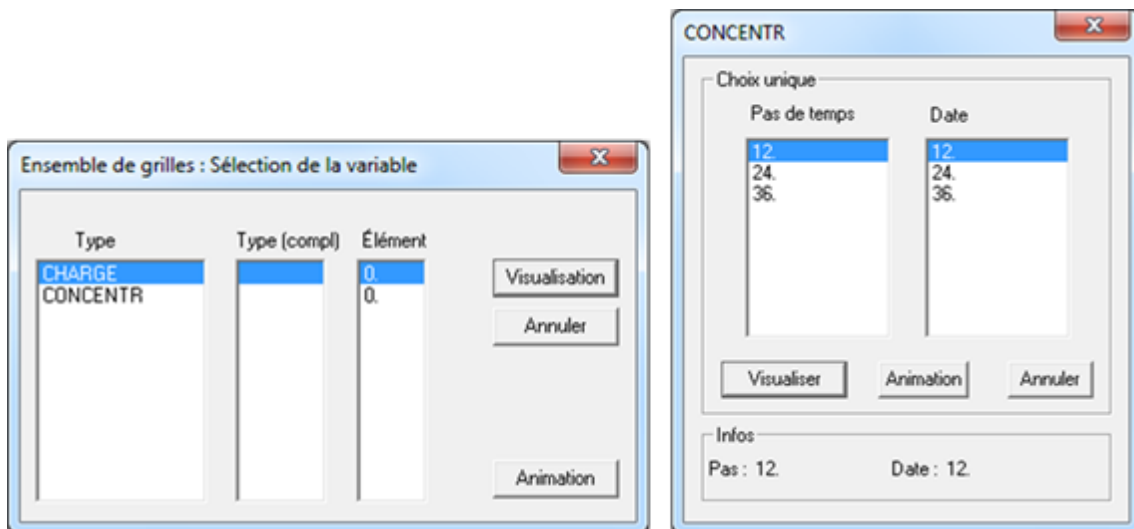


Figure 37 – Choix du champ et du pas de temps à visualiser.

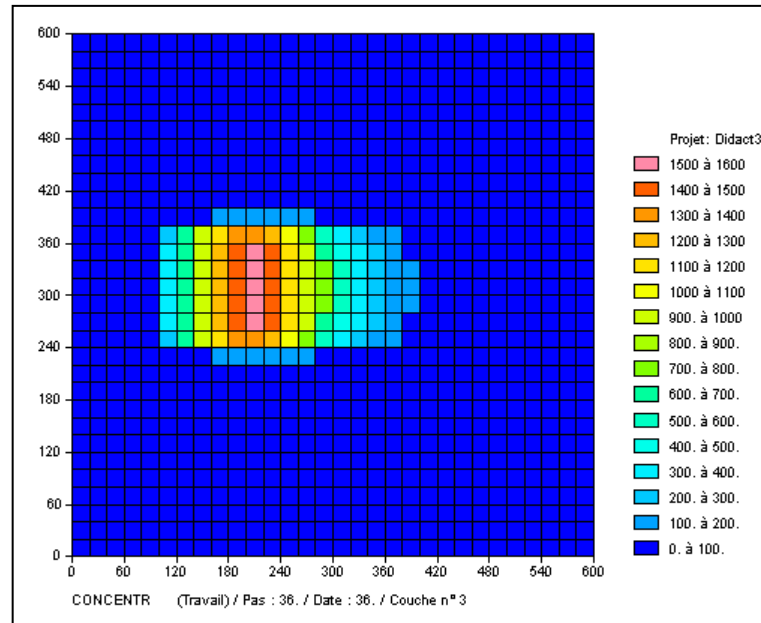


Figure 38 – Concentration après 3 ans dans la couche n°3.

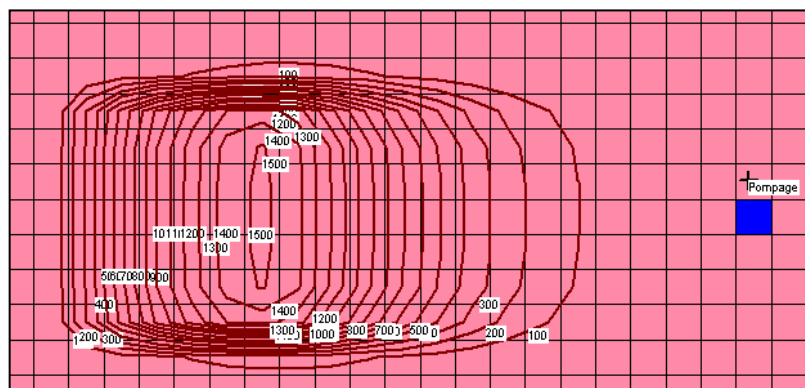


Figure 39 – Isovaleurs de la concentration après 3 ans dans la couche n°3.

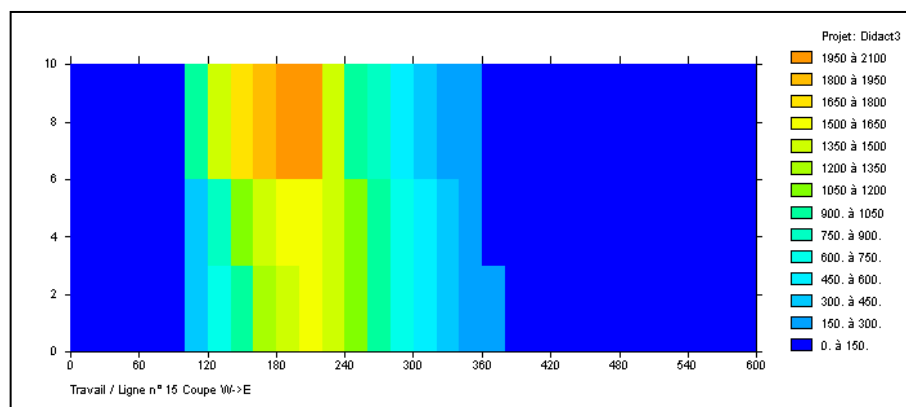


Figure 40 – Concentration après 3 ans en coupe verticale dans l'axe du puits.

9.2.2. Évolution temporelle aux points à historiques

La simulation a généré un fichier de nom générique *historiq.prn* qui est directement compatible avec le tableur Excel® ou un tableur équivalent. Il suffit de double-cliquer dessus (ou de l'*ouvrir avec Excel*), et on peut obtenir rapidement un diagramme en 3 ou 4 clics de souris (Figure 41). La méthode de transport TVD permet d'obtenir une simulation rapide, avec très peu de dispersion numérique, et ne présentant pas d'oscillations. MARTHE permet également, en changeant simplement la sélection (méthode 0, 1 ou 2 au lieu de méthode 3=TVVD) de faire un calcul de transport par la méthode de transport des différences finies, par la méthode de transport « Random Walk », ou par la méthode de transport MOC.

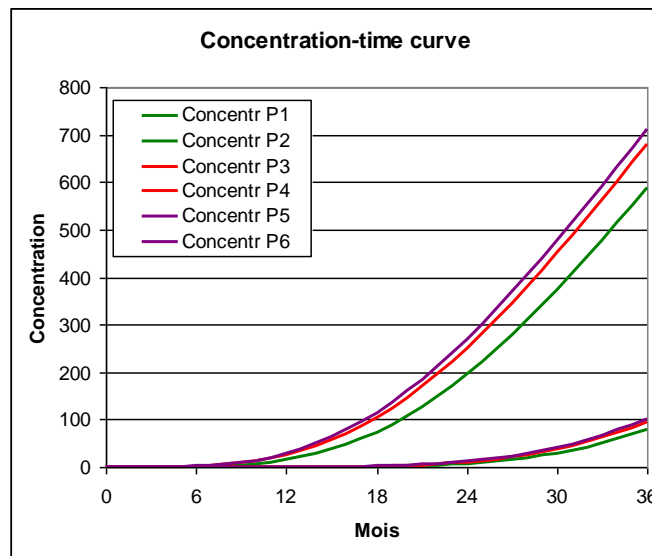



Figure 41 – Évolution temporelle de la concentration dans les 6 points à historiques.

9.3. TRANSPORT PAR LA MÉTHODE DES CARACTÉRISTIQUES (MÉTHODE MOC)

On peut réaliser ce même calcul en utilisant comme schéma de transport la méthode des caractéristiques MOC. On utilise l'icône «  » pour faire apparaître le menu général des « Paramètres non maillés », puis → « Paramètres Généraux », puis « Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité », et on sélectionne la méthode de transport MOC :

Paragraphe « Couplage et Transport »

MOC = Schéma de Transport [0=Diff_Finies ; 1=Random_W ; 2=Caract=MOC ; 3=TVVD]

Paragraphe « Concentration et Trajectoires »

Ensuite, dans le paragraphe « Concentration et Trajectoires », on attribue à chaque particule une masse de 500 μg , et on fixe, par sécurité, un nombre maximal de particules égal à 200 000 :

500 = Masse de chaque Particule de Concentration (si particules)
 200000 = Nombre maxi possible de Particules (MOC or R.W.)

Le calcul s'effectue comme précédemment en quelques secondes, et donne des résultats comparables (Figure 42 et Figure 43). On remarque en particulier que les évolutions temporelles sont très régulières, quasiment sans oscillations.

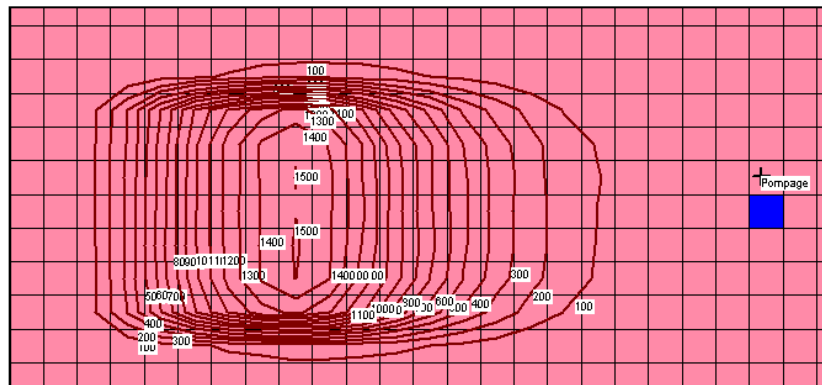


Figure 42 – Concentration après 3 ans dans la couche n°3, Méthode de transport MOC.

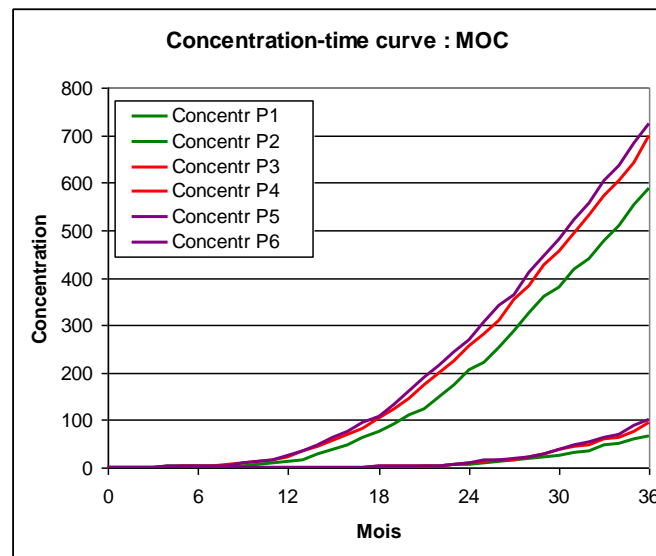



Figure 43 – Évolution temporelle de la concentration dans les 6 points à historiques. Méthode de transport MOC.


9.4. VARIANTE DANS LA DÉFINITION DE LA ZONE CONTAMINÉE


Au lieu d'introduire un flux massique égal à $1.0519 \cdot 10^5$ ($\mu\text{g}/\text{mois}$ par maille de 400 m^2), on aurait pu introduire sur les mailles concernées une concentration égale à $12\,500$ ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) dans la recharge, en procédant de la manière suivante.



9.4.1. Définition de la zone contaminée

La zone contaminée s'étend dans le rectangle : $[100 \text{ m} < x < 220 \text{ m}]$, et $[240 \text{ m} < y < 380 \text{ m}]$. À titre didactique, pour visualiser cette zone on va dessiner le


rectangle avec l'icône  situé sur la barre d'outils du haut. On clique sur l'icône « Choix_champ » puis on sélectionne le champ « Zones de sol, Pluie, ETP, Infiltration », qui apparaît en bleu. Pour davantage de visibilité, on choisit des plages de couleurs équi-réparties par le menu « Vue » → « Plages de couleurs » → « Équi-réparties », ou plus directement par le raccourci « Control+Q ». Le fond apparaît alors en rose pâle. On clique

sur l'icône , et on dessine un rectangle délimitant la zone : $x = 100$ à 220 m , $y = 240$ à 380 m (c'est-à-dire colonnes n°6 à n°11, lignes n°12 à n°18). On termine en double-cliquant sur le dernier point, pour fermer le contour. On lui donne le nom « Zone_Contam », il se dessine dans le maillage. En accédant au menu de « Gestion des polygones » par

l'icône , on voit que ce contour est la « couche de polygones » de nom « dessin ». Par le bouton « Enregistrer » situé complètement à droite de cette couche, on sauvegarde ce polygone sous le nom « Zone_Contam.blm ». On peut changer sa couleur (en rouge par exemple et son épaisseur, 6 unités par exemple).

On va affecter le numéro de zone n°2 à l'intérieur de cette zone contaminée, car on donnera la concentration $12500 \mu\text{g}/\text{m}^3$ à la recharge dans cette zone. On choisit l'icône  « Sélection des mailles contenues dans le contour fermé » et on double-clique à proximité du contour. On confirme que c'est bien l'intérieur du polygone « Zone_Contam » et toutes les mailles à l'intérieur du rectangle sont sélectionnées (en rouge). Par l'icône  on leur donne le numéro de zone = 2. (On peut frapper Control+L pour revenir à des plages linéaires)

Le flux d'infiltration de $252.46 \text{ mm}/\text{an}$ était défini dans la zone n°1, maintenant qu'il y a deux zones de recharge, il faut définir ce flux dans les deux zones. On peut faire cette définition dans le fichier des paramètres généraux.

On clique sur l'icône  pour faire apparaître le menu général des « Paramètres non maillés ». On double-clique sur la première ligne « Paramètres généraux », puis « Préprocesseur ». On sélectionne alors le paragraphe « Initialisation avant calculs ».

On sélectionne « Actions existantes » puis « Bilan Hydroclimatique, Cultures ». On remplace alors le numéro de zone « 1 » par le numéro de zone « * » (toutes les zones) ou « 1:2 » (numéros zones de n°1 à n°2).

9.4.2. Définition de la concentration dans la recharge

Dans le menu général des « Paramètres non maillés », on double-clique sur la ligne « Pas de temps » → « Préprocesseur » → « Choix d'un pas de temps » → On sélectionne le pas de temps n°1 → « Nouvelles Actions » → *Thème* « Transport, Salinité, Trajectoires » → *objet* « CONCEN_RECH = Concentration de la Recharge » (Figure 44). On fixe alors la valeur 12500 dans la zone de sol n°2 et on clique OK.

Il faut retirer le flux massique de $1.0519 \cdot 10^5 \mu\text{g}/\text{mois}$ qui avait été introduit : pour cela, après avoir cliqué sur « Retour » on choisit « Actions existantes » → *Thème* « Transport, Salinité, Trajectoires » → *Objet* « QMASS_CONC = Débit Massique Concentration ». On remplace la valeur $1.0519 \cdot 10^5$ par la valeur 0.

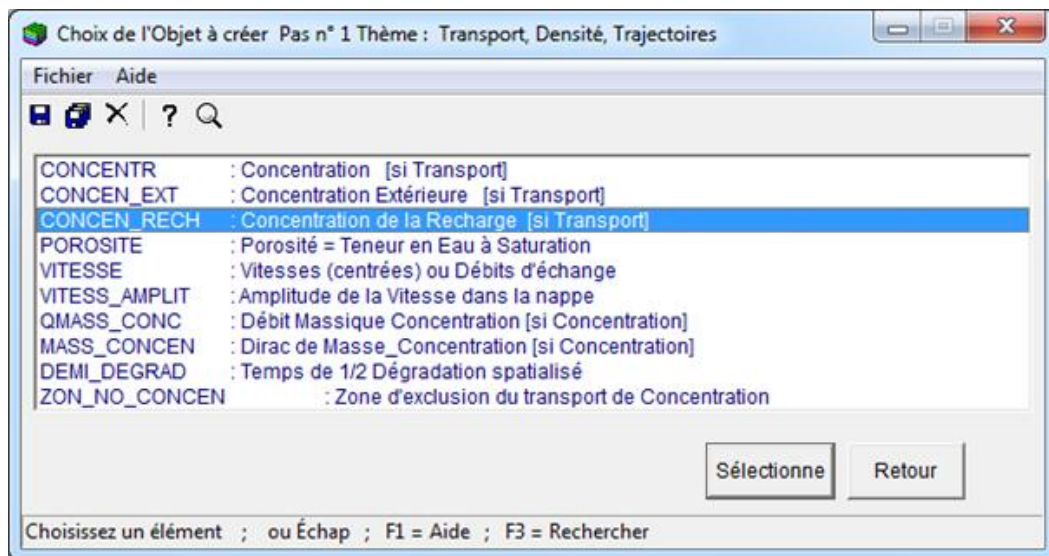



Figure 44 – Définition de la Concentration de la Recharge au pas de temps n°1.

9.5. VARIANTE : UTILISATION D'UN COEFFICIENT DE PARTAGE KD

Au lieu d'introduire un coefficient de retard, qui n'est qu'une approximation, on peut utiliser un « coefficient de partage » k_d . Dans le code de calcul MARTHE on introduit un tel coefficient de partage sous la forme d'un champ de « $\text{Rho} \cdot k_d$ ». Le paramètre « $\text{Rho} \cdot k_d$ » est le produit du k_d par la masse volumique sèche du sol (souvent de l'ordre de $1600 \text{ kg}/\text{m}^3$). Dans le code de calcul MARTHE, « $\text{Rho} \cdot k_d$ » qui est adimensionnel est représenté par le champ « RHO_KD », exprimé en unité de porosité, accessible avec un profil d'utilisation avancé.

On suppose que la valeur du k_d est égale à $0.1563 \text{ cm}^3/\text{g}$ dans tout le domaine et que la densité sèche est égale à $1600 \text{ kg}/\text{m}^3$. Le produit $\text{Rho} \cdot k_d$ est donc égal à $0.1563 \text{ cm}^3/\text{g} \times 1.6 \text{ g}/\text{cm}^3 = 0.25$, soit 25 % puisque l'unité de porosité choisie dans cet exemple est le %. Pour cette simulation on procède de la manière suivante :

- Dans le menu général des « Paramètres non maillés », accessible par l'icône  de WinMarthe, on double-clique sur la première ligne « Paramètres généraux » →

« Préprocesseur » → Paragraphe « Concentration et Trajectoires ». On retire alors le coefficient de retard qui était égal à 2 et on le met à 0. On remet également le transport par la méthode TVD, dans le paragraphe « Couplage et Transport ... ».

- Puis dans le paragraphe « Initialisation avant calculs » → « Nouvelles Actions » → on clique sur « Transport, Salinité, Trajectoires ». On ne voit pas « RHO_KD » car on n'avait pas choisi un « profil d'utilisation avancée ». On clique donc sur l'icône « Rechercher », en forme de loupe, et on sélectionne « Tous les paramètres ». On voit alors apparaître l'objet « RHO_KD : kd Volumique Rho · kd ». (On aurait pu trouver directement cet objet dans le thème « Tous les paramètres : même hors profil d'utilisation »). On sélectionne cet objet « RHO_KD » puis → Action « GRILLE », et on lui affecte le nom de fichier « =25 » (sans oublier le signe « = ») ce qui signifie une valeur uniforme égale à 25. On sauvegarde le fichier des paramètres et on sort. On est alors retourné dans WinMarthe *sensu stricto*.

Note : On aurait pu également modifier le fichier profil d'utilisation, en sélectionnant « Utilisation Avancée », puis retourner dans WinMarthe pour définir un champ spatialisé en procédant comme suit :

- On utilise la procédure « Choix champ F3 » → « Charger un nouveau champ » → Thème « Transport, Salinité, Trajectoire » → « Kd Volumique Rho x Kd ». On sélectionne alors toutes les mailles (de toutes les couches) et on leur affecte une valeur égale à 25 (%).

On lance alors les calculs et la Figure 45 (à gauche) montre qu'on obtient une concentration très semblable à celle du calcul précédent, puisqu'un $Rho \cdot Kd$ égal à 25 % avec une teneur en eau de 25 % (quand la nappe est saturée) correspond à un coefficient de retard égal à 2. La partie droite de la figure montre la concentration obtenue avec un $Rho \cdot Kd$ égal à 0.50 (ce qui correspond approximativement à un facteur de retard égal à 3).

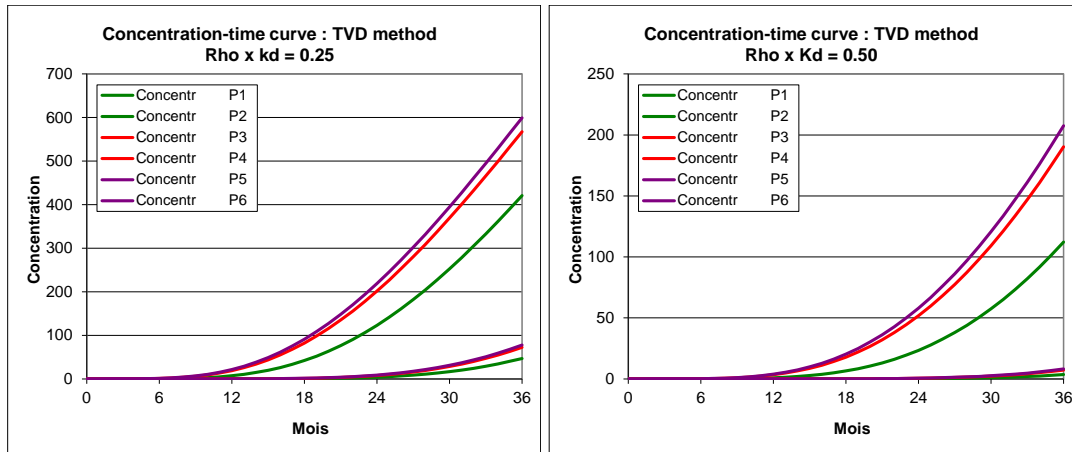


Figure 45 – Évolution temporelle de la concentration aux 6 points.
À gauche $Rho \times kd = 0.25$; à droite $Rho \times kd = 0.50$.



10. Insertion d'un maillage gigogne

Pour améliorer la précision au voisinage du puits de pompage, on va introduire un sous-maillage gigogne. Ce maillage gigogne aura une extension de 7 colonnes et 7 lignes centrées sur le puits de pompage (colonne n°25, ligne n°15). Il remplacera donc les colonnes n°22 à n°28 des lignes n°12 à n°18. Le maillage gigogne aura des lignes et colonnes 2 fois plus fines (soit 10 mètres), sauf dans la maille du puits qui sera subdivisée en 25 mailles de 4 mètres de côté.

10.1. CRÉATION DU SOUS-MAILLAGE

Pour conserver l'exemple précédent intact, on fait tout d'abord une copie du projet sous le nom *Didact3_Gig* en utilisant comme précédemment le menu « Fichier » → « Faire une copie du projet ». Puis on ferme le projet *Didact3* et on ouvre le projet *Didact3_Gig(.rma)*.

Il faut vérifier que tous les champs (non uniformes) du projet sont bien chargés avant la modification du maillage, car seuls les champs chargés seront modifiés. (Ces champs sont les 5 suivants : *Didact3_Gig.permh*, *.charg*, *.debit*, *.hsubs*, *.zonep*).

On sélectionne le champ de perméabilité et on se place sur la couche n°1. On sélectionne ensuite, impérativement avec le « rectangle extensible » , la zone comprise entre les colonnes n°22 à n°28 des lignes n°12 à n°18. On appuie alors sur le bouton  (création d'un gigogne). On confirme (on ou ajuste) les coordonnées dans la fenêtre qui apparaît Figure 46. On va alors définir les dimensions des colonnes et des lignes du gigogne. Dans le cas le plus simple, il suffit de donner le nombre de sous-colonnes et le nombre de sous-lignes subdivisant chaque colonne et ligne de la fenêtre gigogne. Dans notre exemple, les nombres de sous-lignes et de sous-colonnes ne sont pas uniformes. On fixe 2 sous-colonnes pour les colonnes sauf pour la colonne centrale n°25 qui aura 5 sous-colonnes. De la même manière, on fixe 2 sous-lignes pour toutes les lignes et 5 sous-lignes pour la ligne centrale n°15. (Figure 47). On voit alors apparaître le sous-maillage (Figure 48). Dans MARTHE, ce sous-maillage concerne toujours toutes les couches.

10.2. AJUSTEMENT DES DONNÉES MAILLÉES

Les données du maillage principal ont été reportées automatiquement dans les mailles correspondantes du maillage gigogne. En fait, toutes ces données sont uniformes au niveau du gigogne, à l'exception des débits du puits de pompage. En se plaçant dans la couche n°3 du champ de débit, au voisinage du pompage, on voit que les 25 petites mailles ont chacune un débit égal à -12. On supprime ces valeurs, sauf la valeur centrale (par exemple en sélectionnant les 25 mailles avec le « rectangle extensible », en y mettant la valeur 0, et en refixant un débit de -12 dans la maille du centre).

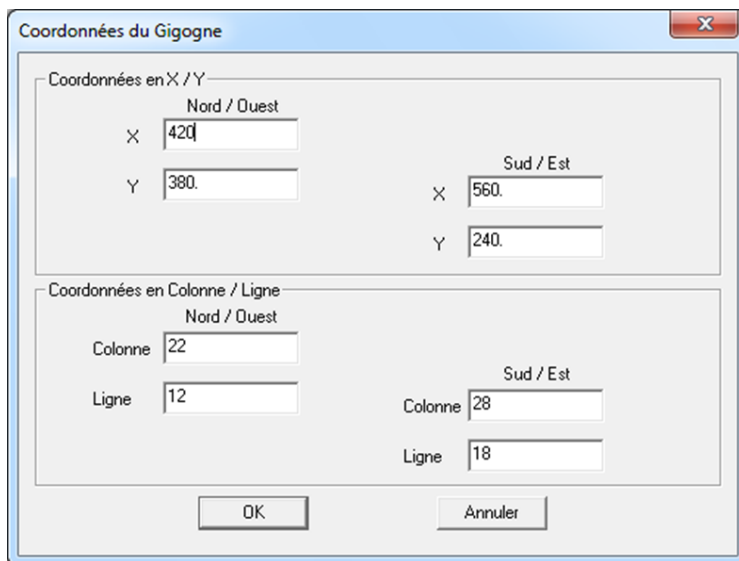


Figure 46 – Définition de l’extension du maillage gigogne.

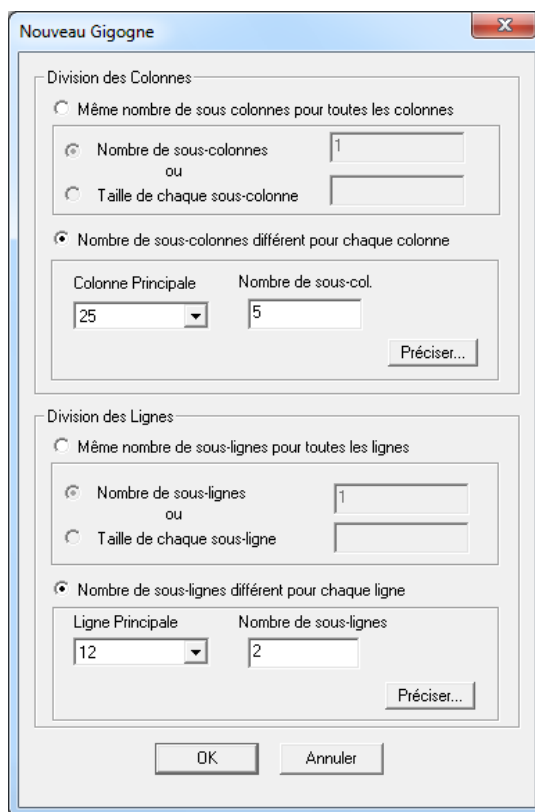


Figure 47 – Définition des dimensions des sous-colonnes et sous-lignes.

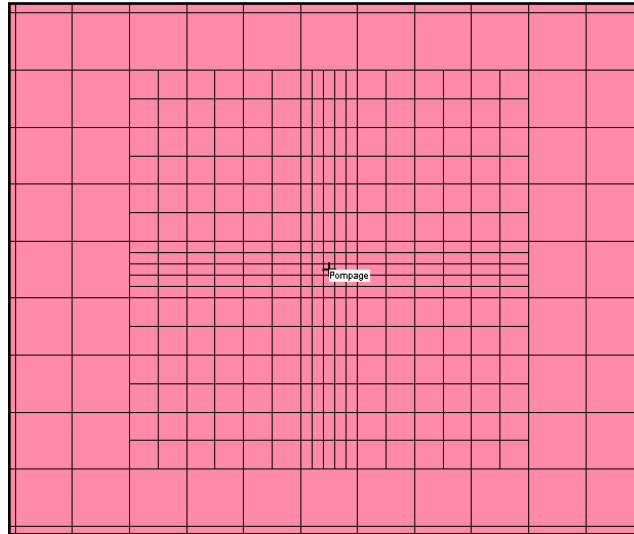



Figure 48 – Sous-maillage gigogne au voisinage du puits de pompage.

Par sécurité, on sauvegarde () les modifications.

10.3. AJUSTEMENT DES PARAMÈTRES NON MAILLÉS

10.3.1. Anisotropie verticale de perméabilité

Dans notre exemple, on a défini une anisotropie verticale de perméabilité égale à 500 dans la maille [Colonne=25, Ligne=15, Couches 1 à 3]. Il faut la remplacer par la maille du centre du gigogne [Colonne=10, Ligne=10, Couches 1 à 3, Gigogne=1]. On actionne l'icône  pour faire apparaître le menu général, puis → « Paramètres Généraux » → « Préprocesseur » → Paragraphe « Initialisation avant calculs » → « Nouvelles Actions » → « Paramètres Avancés » → « Aniso_Verti » → « MAILLE »

On sélectionne alors le gigogne n°1, puis [Colonne=10, Ligne=10, Couche=1:3] et on fixe la valeur 500.

(On pourrait, par élégance, supprimer la valeur 500 de la maille [Colonne=25, Ligne=15, Couche=1:3] du maillage principal en choisissant « Actions existantes » → « Paramètres Avancés » et en donnant les coordonnées [Colonne=0, Ligne=0, Couche=0], mais ce n'est pas vraiment nécessaire, car les mailles [Colonne=25, Ligne=15] du maillage principal ne sont pas actives car recouvertes par le gigogne).

10.3.2. Schéma de calcul du transport

On utilise la méthode des caractéristiques MOC, car la méthode de transport TVD n'est pas opérationnelle pour les maillages avec gigognes.


Départs de trajectoires

On va faire partir les trajectoires sur un cercle de 3 mètres de rayon (c'est-à-dire un cercle qui inclut juste la maille centrale de 4 mètres de côté) : Figure 49.

Maille	Col / X	Lign / Y	Couch / Z	(Gig)	Nb Ray	Rayon	Group
<input checked="" type="checkbox"/>	10	10	1	1	28	3	1
<input checked="" type="checkbox"/>	10	10	2	1	28	3	2
<input checked="" type="checkbox"/>	10	10	3	1	28	3	3
<input type="checkbox"/>							

Figure 49 – Départs de trajectoires inverses à partir du puits.

10.4. LANCEMENT DES CALCULS ET EXAMEN DES RÉSULTATS

Comme précédemment on lance les calculs par l'icône «  » et on examine les résultats. La Figure 50 montre le tracé très précis des isovaleurs et des trajectoires de la couche n°3.

En revanche, la concentration calculée, dont les fortes valeurs sont situées loin de la zone de maillage raffiné, est quasiment inchangée par l'ajout du gigogne.

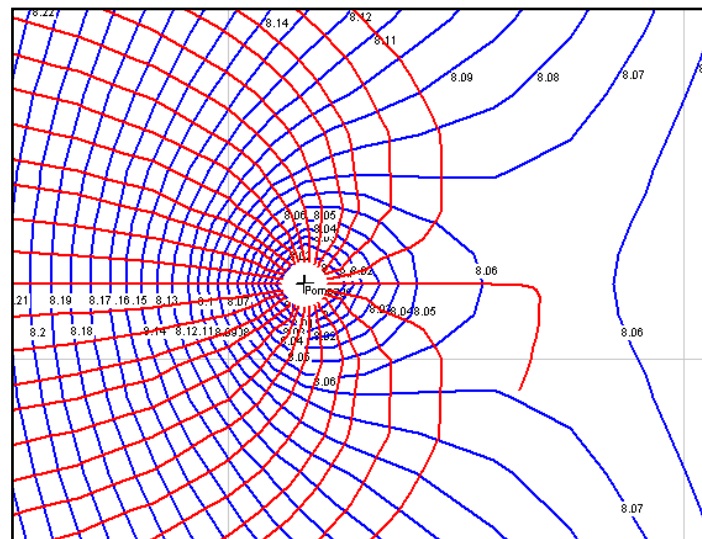


Figure 50 – Isovaleurs et lignes de courant : calcul avec un sous-maillage gigogne au voisinage du puits de pompage.

11. Calibration automatique des paramètres

On va montrer sur cet exemple comment on peut calibrer automatiquement des paramètres hydrodynamiques (perméabilité) et des paramètres de transport (dispersion, etc.) de manière à obtenir une simulation la plus proche possible d'historiques d'observations de charge hydraulique et de concentration. Pour simplifier la mise en œuvre de cet exemple, on va tout d'abord réaliser un calcul puis conserver des historiques calculés et considérer que sont des « observations ». On va alors partir de paramètres différents (perméabilité différente, dispersivité différente) et laisser le modèle les « optimiser » pour retrouver les valeurs de perméabilité et dispersivité de référence. Le calcul préliminaire correspond au fichier projet **Didact3.rma**, avec la méthode de transport TVD, qu'on avait conservé. On fait tout d'abord deux petites modifications :

- On ajoute la demande d'historiques de charge hydraulique en 4 points de la couche n°3, comme illustré ci-dessous.

/Charge	/HISTO/	=	/XCOO:X=	130Y=	200P=	3;CH1
/Charge	/HISTO/	=	/XCOO:X=	200Y=	400P=	3;CH2
/Charge	/HISTO/	=	/XCOO:X=	480Y=	250P=	3;CH3
/Charge	/HISTO/	=	/XCOO:X=	460Y=	450P=	3;CH4
/Concentr	/HISTO/	=	/XCOO:X=	290Y=	310P=	1;P1
/Concentr	/HISTO/	=	/XCOO:X=	390Y=	310P=	1;P2
/Concentr	/HISTO/	=	/XCOO:X=	290Y=	310P=	2;P3
/Concentr	/HISTO/	=	/XCOO:X=	390Y=	310P=	2;P4
/Concentr	/HISTO/	=	/XCOO:X=	290Y=	310P=	3;P5
/Concentr	/HISTO/	=	/XCOO:X=	390Y=	310P=	3;P6

- On sélectionne un format d'écriture des historiques sous une forme directement compatible avec les fichiers « d'historiques observés » :

« Paramètres Généraux » → « Préprocesseur » → Paragraphe « Sauvegardes et contrôles »

```
2 = Format d'écriture des Histo., Profils (0='Excel' -1=Successifs 2=Les 2)]
```

On fait tourner le modèle et on obtient en particulier le fichier *historiq.out* qui contient les historiques de charge hydraulique et de concentration calculée aux points de référence.

Pour conserver l'exemple courant intact, on fait tout d'abord une copie du projet sous le nom *Didact3_Opt* en utilisant comme précédemment le menu « Fichier » → « Faire une copie du projet ». Puis on ferme le projet *Didact3* et on ouvre le projet *Didact3_Opt(.rma)*.

11.1. PARAMÈTRES DE MODÉLISATION À OPTIMISER

Les 4 paramètres de modélisation suivants seront optimisés :

- La perméabilité de la couche n°3 (variable PERMEAB). Il faudra donc préparer un champ de zones dans lequel toutes les mailles de la couche n°3 auront par exemple la valeur 3.
- La dispersion longitudinale (constante DISPER_LONGI)

- La dispersion transversale (constante DISPER_TRANSV)
- L'anisotropie verticale de perméabilité (constante ANISO_VER_GLO)

11.2. DÉFINITION DES ZONES DE PERMÉABILITÉ

On doit créer un champ avec un numéro de zone égal à 3 dans toutes les mailles de la couche n°3. Dans WinMarthe, on sélectionne (touche F3) le champ « Travail ». On se place alors sur la couche n°3, on sélectionne toutes les mailles et on leur donne la valeur 3. On sélectionne alors à nouveau le champ « Travail » (touche F3) et on active le bouton « Sauvegarder / Exporter » → « Exporter (grilles) sous » et on donne le nom *Didact3_opt.zo_perm.* (« zo_perm » pour « Zones de Perméabilité »)

11.3. DÉFINITION DES HISTORIQUES D'OBSERVATIONS

Ces historiques ont la même forme que le fichier *historiq.out*, mais concernent chacun un seul type d'observation. Il faut créer les deux fichiers suivants :

- Fichier des observations de charge hydraulique : *Didact3_opt.h_charg*

Ce fichier contient les 4 historiques de charge hydraulique (sur les 36 pas de temps, bien que les charges soient permanentes car l'hydrodynamique est en régime permanent).

Pour constituer ce fichier, le plus simple est de copier le fichier *historiq.out* sous le nom *Didact3_opt.h_charg*, puis d'effacer dans ce fichier tout ce qui ne concerne pas les historiques de charge (c'est-à-dire à partir d'environ la ligne n°163). On remplacera alors, avec un éditeur de texte classique, dans la colonne de droite les valeurs de charge simulée par les valeurs de charge observée (8.8497, 8.7443, 8.1806, 8.2604).

```

Didacticiel 2 : Hydraulique Permanent + Transport [V7.5]
Historiques de CHARGES : Dates et <Charge>          <HISTO>      4 mailles
!Maille Colonne=  7, Ligne= 20, Couche=  3
!  Coordonnées exactes : X=      130.0000 Y=      200.0000 =====
! Localisat = CH1 ;
      0.000      8.8497
      1.000      8.8497
      2.000      8.8497
      ..... etc .....
      36.000     8.8497
!Maille Colonne= 10, Ligne= 10, Couche=  3
!  Coordonnées exactes : X=      200.0000 Y=      400.0000 =====
! Localisat = CH2 ;
      0.000      8.7443
      1.000      8.7443
      ..... etc .....
      36.000     8.7443
!Maille Colonne= 24, Ligne= 18, Couche=  3
!  Coordonnées exactes : X=      480.0000 Y=      250.0000 =====
! Localisat = CH3 ;
      ..... etc .....
      36.000     8.1806
!Maille Colonne= 23, Ligne=  8, Couche=  3
!  Coordonnées exactes : X=      460.0000 Y=      450.0000 =====
! Localisat = CH4 ;
      ..... etc .....
      36.000     8.2604

```

- Fichier des observations de concentration : Didact3_opt.h_conce


Pour constituer ce fichier, le plus simple est de copier le fichier *historiq.out* sous le nom *Didact3_opt.h_conce*, puis de conserver dans ce fichier uniquement ce qui concerne les historiques de concentration (c'est-à-dire la ligne n°1 puis environ les lignes 167 à 407). On remplacera alors, avec un éditeur de texte classique, dans la colonne de droite les valeurs de concentration simulée par les valeurs de concentration observée.

```

Didacticiel 2 : Hydraulique Permanent + Transport [V7.5]
Historiques de CONCENTR. : Dates et <Concentr> <HISTO> 6 mailles
!Maille Colonne= 15, Ligne= 15, Couche= 1
! Coordonnées exactes : X= 290.0000 Y= 310.0000 =====
! Localisat = P1 ;
0.000 0.000000
1.000 3.4672853E-05
2.000 1.1089010E-03
3.000 9.4495119E-03
..... etc .....
14.000 21.3299
..... etc .....
36.000 526.8006
!Maille Colonne= 20, Ligne= 15, Couche= 1
! Coordonnées exactes : X= 390.0000 Y= 310.0000 =====
! Localisat = P2 ;
0.000 0.000000
..... etc .....
36.000 69.2056
..... etc .....
!Maille Colonne= 20, Ligne= 15, Couche= 3
! Coordonnées exactes : X= 390.0000 Y= 310.0000 =====
! Localisat = P6 ;
0.000 0.000000
1.000 1.1949521E-10
36.000 101.4803

```

11.4. DÉFINITION DES PARAMÈTRES POUR L'OPTIMISATION

On actionne l'icône  pour faire apparaître le menu général des « Paramètres non maillés », puis → « Paramètres pour Optimisation » → « Préprocesseur » → « Créer un nouveau fichier Optimisation ». Ce fichier comporte 5 paragraphes. On définit les valeurs suivantes :

11.4.1. Paramètres généraux d'optimisation

Paragraphe « Paramètres Généraux Optimisation [Simul, Increm.] »

```

1 = Optimisat. 0=Non ; 1=Optimis/Zones ; 3=Modèle Inverse ; 4=Coef. Influence
27 = Nombre Maximal de Simulations pour l'optimisation

```

On a choisi un nombre de 27 simulations maximum. En effet il y a 4 paramètres à optimiser soit 5 simulations par passe d'optimisation. On estime qu'il faut 4 à 5 passes d'optimisation soit un nombre de 20 à 25 simulations, nombre qu'on majore un peu par sécurité.

Paragraphe « Paramètres Généraux Optimisation [pondérations] »

On laisse les valeurs par défaut :

0 = Poids sur les Historiques de Charge observée % (0<=>100%)
0 = Poids sur les Historiques de Concentration observée % (0<=>100%)

Les historiques d'observations de charge hydraulique et les historiques d'observations de concentration auront donc un même poids (50 % chacun).

Paragraphe « Écarts-type, Intervalles de confiance »

1 = Calcul des Écarts-type des Paramètres

11.4.2. Variables à optimiser

On sélectionne le 5^{ème} paragraphe « Paramètres à optimiser ou analyser ». On voit apparaître une boîte de dialogue pour choisir les variables, dont la Figure 51 montre un extrait.



Figure 51 – Choix des variables à optimiser.

On choisit la variable PERMEAB (Perméabilité), on accepte la création de cette variable qui n'existait pas encore. On définit alors le numéro de la zone dont on veut optimiser la perméabilité : la zone n°3 dans notre application. On définit alors les 3 paramètres suivants (Figure 52) :

- Valeur initiale = 15
- Valeur minimale = 1.
- Valeur maximale = 100

Value	Description
3	= Numéro de Zone correspondante (si applicable) [-1 => Retire la zone]
0	= Transformation (0=Logarith. ; 1=Arithm. ; 2=-Inverse) (Def=Logarit.)
0	= Num de la Zone (précéd.) qui est Identique (Def = 0 ; 9999 = Pas Optimis)
15	= Valeur Initiale du paramètre
1	= Valeur Minimale permise pour le paramètre
100	= Valeur Maximale permise pour le paramètre
0	= Variation du param. pour dérivées. Def = Ampl/100 (% si Logar. Def = 5%)
0	= Effet correcteur (0=Non 1 = Fact. Multiplic. ; 2 = Fact. Additif)

Figure 52 – Paramètres de la perméabilité de la zone n°3.

C'est-à-dire qu'on cherche la valeur optimale de la perméabilité comprise entre 1 et 100 (10^{-4} m/s) en partant d'une estimation initiale égale à 15 [la valeur vraie est égale à 5 (10^{-4} m/s)].

On procède de la même manière avec les 3 autres variables.

- DISPER_LONGI : Val init = 3, Mini = 1, Maxi = 50 [vraie valeur = 10 m]
- DISPER_TRANSV : Val init = 0.3, Mini = 0.1, Maxi = 10 [vraie valeur = 1 m]
- ANISO_VER_GLO : Val init = 0.3, Mini = 0.02, Maxi = 1 [vraie valeur = 0.1]

Ces 3 dernières variables étant spatialement uniformes, elles n'ont pas de numéro de « zones », il n'est donc pas nécessaire d'en définir une. On peut donc laisser le numéro de zone à la valeur 0.

On enregistre alors ce fichier (*Didact3_opt.paropt*) et on est retourné dans le menu général des « Paramètres non maillés ».

11.5. MISE À JOUR DU « FICHER PROJET OPTIMISATION »

Pour introduire les 3 autres fichiers créés pour l'optimisation : (*Didact3_opt.zo_perm*, *Didact3_opt.h_charg*, *Didact3_opt.h_conce*), on choisit « Fichier Projet Optimisation », puis, à l'aide des boutons « Parcourir » on sélectionne ces fichiers respectivement comme « Zones de perméabilité », « Historiques de charge obs. », « Historiques de concentration obs. ». (Figure 53).

On accepte de sauvegarder le « fichier Projet Optimisation » *Didact3_opt.namopt* qui contiendra les noms des 4 fichiers optimisation : (*Didact3_opt.paropt*, *Didact3_opt.zo_perm*, *Didact3_opt.h_charg*, *Didact3_opt.h_conce*). Puis on sort après avoir accepté de mettre à

jour le fichier Projet MARTHE *Didact3_opt.rma* qui contiendra maintenant le nom du fichier *Didact3_opt.namopt*.

On est alors retourné à WinMarthe *sensu stricto*.

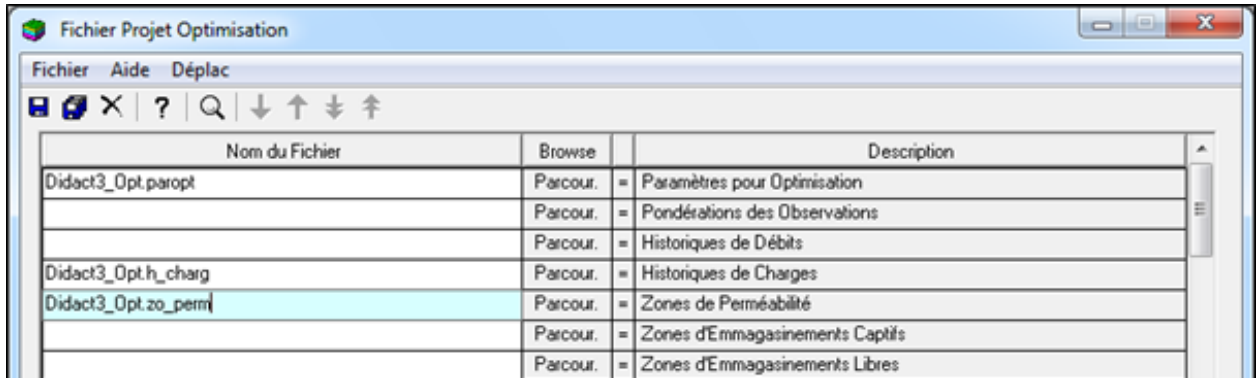


Figure 53 – Mise à jour du « fichier Projet » Optimisation.

11.6. LANCEMENT DES CALCULS ET EXAMEN DES RÉSULTATS

On lance les calculs qui se terminent après quelques minutes car 30 simulations seront réalisées successivement.

La progression de l'optimisation peut être analysée dans le fichier texte *optimis.txt*. À l'issue des calculs on obtient bien les valeurs de référence comme le montre le Tableau 3.

Variable	Init	Pass 1	Pass 2	Pass 3	Pass 4	Pass 5	Vraie
PERMEAB 3	15	7.66	3.76	5.18	4.99	5.00	5
DISPER_LONGI	3	49.98	26.68	11.45	10.20	10.00	10
DISPER_TRANSV	0.3	0.74	0.97	0.96	0.998	1	1
ANISO_VER_GLO	0.3	0.02	0.02	1.00	0.02	0.045	0.1
Critère erreur (%)	12.58	9.87	0.80	0.059	0.0013	0.0001	0

Tableau 3 – Calibration automatique de 4 paramètres hydrauliques et hydrodispersifs.

Un examen de la matrice de corrélation montre que le paramètre d'anisotropie est fortement corrélé aux autres, il est donc moins bien identifié :

- Corrélation (ANISO_VER_GLO , PERMEAB 3) = -0.966
- Corrélation (ANISO_VER_GLO , DISPER_TRANSV) = -0.803

12. Exemple n°2 : Écoulement sous un barrage

Ce nouvel exemple montre comment réaliser un modèle coupe pour calculer les écoulements sous un barrage, ainsi que les lignes de courant (c'est-à-dire les trajectoires).

Les caractéristiques du système sont les suivantes (Figure 55) :

- Épaisseur de l'aquifère = 9 mètres (substratum = 0, topographie = 9 m).
- Perméabilité = $5 \cdot 10^{-4}$ m/s.
- Anisotropie verticale de perméabilité = 0.2.
- Largeur du barrage = 13 m.
- Charge en surface à l'amont du barrage = 12 m,
Charge en surface à l'aval du barrage = 10 m.
- Pénétration du barrage dans l'aquifère = 1 m.
- Extension latérale modélisée = 65 m, limitée par des limites à charge imposée (à 12 m à gauche et à 10 m à droite).
- Calcul en régime permanent.

12.1. MODÉLISATION

Pour modéliser ce système, on adopte un schéma en coupe. Le maillage sera formé de 65 colonnes de 1 m de largeur et 9 lignes de 1 m d'épaisseur. Les 9 lignes représentent en fait les 9 couches de modélisation. L'extension verticale modélisée s'étend donc de 0 à 9 m. L'extension latérale s'étend de -32.5 m à +32.5 m. Le barrage, situé dans la couche n°1 (ligne n°1), s'étend sur les 13 colonnes centrales. Il est représenté par 13 mailles de perméabilité égale à 0.

Pour créer le maillage, on utilise WinMarthe et on crée un maillage régulier de 65 colonnes, 9 lignes et une seule couche. On peut laisser les valeurs par défaut de « cote topo » à 0 mètre, et d'épaisseur de 10 m car ces données ne seront pas utilisées, mais calculées à partir du maillage.

La mise en œuvre de la modélisation de cet exemple simple ne pose aucun problème. Pour indiquer qu'on réalise une modélisation en coupe verticale il faut valoriser un paramètre dans le fichier des « paramètres Généraux » : dans le paragraphe « Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs »

Paragraphe : « Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs » :

Coupe = Orientat. maillage : 0=Standard ; 1=Coupe Verticale : Pesant. sur Oy
ou bien
Vertic = Orientat. maillage : 0=Standard ; 1=Coupe Verticale : Pesant. sur Oy

L'épaisseur de la tranche de coupe, dont la valeur par défaut est 1, est définie dans ce paragraphe. On peut la définir (bien que ce soit la valeur par défaut) :

1 = Épaisseur de la tranche de coupe (Unité de Coordonnées de mailles ou Degrés)

Pour fixer le coefficient d'anisotropie verticale de perméabilité, il faut bien définir un coefficient d'anisotropie verticale (et non horizontale), car le modèle est en 3D, avec 9 couches, bien que les couches soient représentées graphiquement par des lignes.

Paragraphe : « Unités des données » :

0.2 = Coefficient d'Anisotropie Verticale Kv/Kh de la Perméabilité

Pour définir simplement les départs de trajectoires : on fait démarrer les trajectoires à l'aplomb du centre du barrage (colonne n°33) successivement dans les 8 couches, n°2 à 9. Pour être cohérent avec le maillage, elles peuvent également être définies Lignes n°2 à n°9, ou bien encore plus simple « Toutes les lignes » en utilisant le « joker « * » (Figure 54).

Maille	Col / X	Lign / Y	Couch / Z	(Gig)	Nb Ray	Rayon
<input checked="" type="checkbox"/>	33	1	2			
<input checked="" type="checkbox"/>	33	1	3			
<input checked="" type="checkbox"/>	33	1	4			
<input checked="" type="checkbox"/>	33	1	5			
<input checked="" type="checkbox"/>	33	1	6			
<input checked="" type="checkbox"/>	33	1	7			
<input checked="" type="checkbox"/>	33	1	8			
<input checked="" type="checkbox"/>	33	1	9			
Ou bien :						
<input checked="" type="checkbox"/>	33	2				
<input checked="" type="checkbox"/>	33	3				
<input checked="" type="checkbox"/>	33	4				
<input checked="" type="checkbox"/>	33	5				
<input checked="" type="checkbox"/>	33	6				
<input checked="" type="checkbox"/>	33	7				
<input checked="" type="checkbox"/>	33	8				
<input checked="" type="checkbox"/>	33	9				
Ou bien, plus simplement :						
<input checked="" type="checkbox"/>	33	*				

Figure 54 – Définition des départs de trajectoires sous le barrage.

Dans une première simulation on calcule les trajectoires directes :

1 = Calcul de Trajectoires (1 = Oui ; -1 = Trajectoires inverses)

On renomme le fichier *trajmar.bln*, par exemple en *trajmar_aval.bln*, puis on réalise un second calcul avec des trajectoires inverses à partir de ces mêmes points de départs :

Invers = Calcul de Trajectoires (1 = Oui ; -1 = Trajectoires inverses)

12.2. RÉSULTATS

La Figure 55 montre les équipotentielles et les lignes de courant obtenues. Le débit total d'écoulement calculé dans le domaine souterrain est égal à $2.5 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$ par mètre d'épaisseur de tranche.

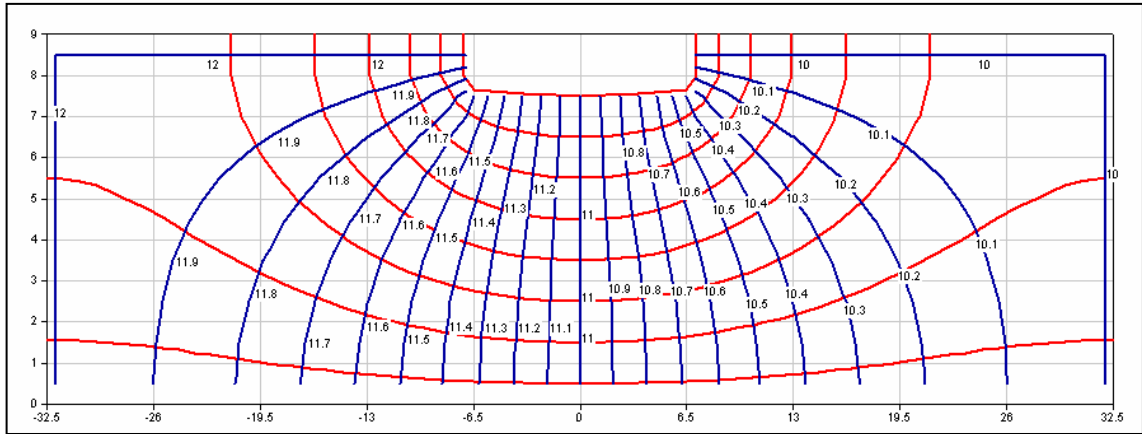


Figure 55 – Écoulement sous un barrage : équipotentiels (en bleu), et lignes de courant (en rouge).

Remarque : Pour la simplicité, cet exemple est traité en coupe, mais MARTHE permet de le traiter en 3D.

13. Exemple n°3 : Écoulement à surface libre à travers un barrage avec surface de suintement

Cet exemple, adapté d'un exemple de calcul en zone non saturée cité par Cooley, R.L. (1983), montre comment utiliser un modèle coupe pour calculer les écoulements à surface libre à travers un barrage en prenant en compte une surface de suintement. Il est modélisé ici avec un schéma classique en « Pseudo-ZNS » (pas en Zone Non Saturée)

Les caractéristiques du système sont les suivantes (Figure 56) :

- Substratum = 0 m.
- Perméabilité = $1 \cdot 10^{-5}$ m/s.
- Largeur du barrage = 10 m.
- Charge imposée : à l'amont du barrage = 10 m, à l'aval du barrage = 2 m.
- Calcul en régime permanent.

13.1. MODÉLISATION

La modélisation de ce système ne pose pas de problèmes. On adopte un schéma en coupe verticale. Le maillage sera formé de 21 colonnes de 0.5 m de largeur et 20 lignes de 0.5 m d'épaisseur qui représentent 20 couches de modélisation. L'extension verticale modélisée s'étend donc de 0 à 10 m et l'extension latérale de -0.25 à 10.25 m compte tenu du fait que les potentiels sont imposés au milieu des colonnes, c'est-à-dire aux abscisses 0 m et 10 m.

Pour créer le maillage, on utilise WinMarthe et on crée un maillage régulier de 21 colonnes, 20 lignes et une seule couche. On peut laisser les valeurs par défaut de « cote topo » à 0 mètre, et d'épaisseur de 10 m car ces données ne seront pas utilisées, mais calculées à partir du maillage.

13.1.1. Charges hydrauliques imposées et conditions de suintement

On impose normalement une charge hydraulique égale à +10 m sur toute la colonne n°1 qui constitue la limite amont. Sur la limite aval, colonne n°21, on impose une charge hydraulique égale à +2 m sur les 4 lignes inférieures dont l'altitude est inférieure à 2 m. Sur les 16 autres mailles, on impose un « index de suintement » (champ « IND_SUINTEM ») égal à 1, ce qui impose automatiquement un débit sortant si la charge dépasse le toit de chaque couche.

13.1.2. Schéma de calcul

Le schéma de calcul par défaut de MARTHE est le schéma en « Pseudo Non saturé ». C'est le schéma par défaut. Il permet de prendre en compte sans problèmes la gestion des surfaces libres et des dénoyages.

Pour indiquer qu'on réalise une modélisation en coupe verticale il faut valoriser un paramètre dans les « paramètres Généraux » : dans le paragraphe « Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs ».

Paragraphe : « Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs » :

Coupe = Orientat. maillage : 0=Standard ; 1=Coupe Verticale : Pesant. sur Oy

On peut également préciser (bien que ce soit la valeur par défaut) :

1 = Épaisseur Tranche de coupe (Unité de Coordonnées de Mailles ou Degrés)

Compte tenu des non linéarités, la convergence des calculs rend nécessaire l'utilisation d'un coefficient de sous-relaxation. On choisit initialement un coefficient égal à 0.7.

Paragraphe : « Contrôle de la Résolution Hydrodynamique » :

0.7 = Coefficient de Relaxation des calculs [Déf=1]

13.2. RÉSULTATS

Les calculs se terminent en moins de 1/10 seconde et convergent parfaitement (à $3 \cdot 10^{-5}$ %) en 30 itérations. En fait, il apparaît que la convergence est quasiment aussi rapide avec un coefficient de relaxation compris entre 0.5 et 0.9. En revanche sans sous-relaxation (coefficient de relaxation = 1), la convergence est légèrement plus lente.

Les calculs ne posent aucun problème, en particulier, contrairement à certains modèles, il n'y a ni coefficient de remise en eau ni seuil de remise en eau (« wetting factors ») à définir.

La Figure 56 montre les isovaleurs de charge et la position de la surface libre obtenue. On voit que le schéma en « Pseudo Non Saturé » calcule des valeurs de charge également dans la zone située au-dessus de la surface libre. Dans cette zone la charge est inférieure à l'altitude du substratum, ce qui correspond à une pression négative comme dans la réalité. Les écoulements à travers les mailles de cette zone sont extrêmement faibles, car elles ont un taux de saturation résiduelle très faible. Le débit total d'écoulement calculé à travers le massif est égal à $4.73 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$ par mètre d'épaisseur de tranche.

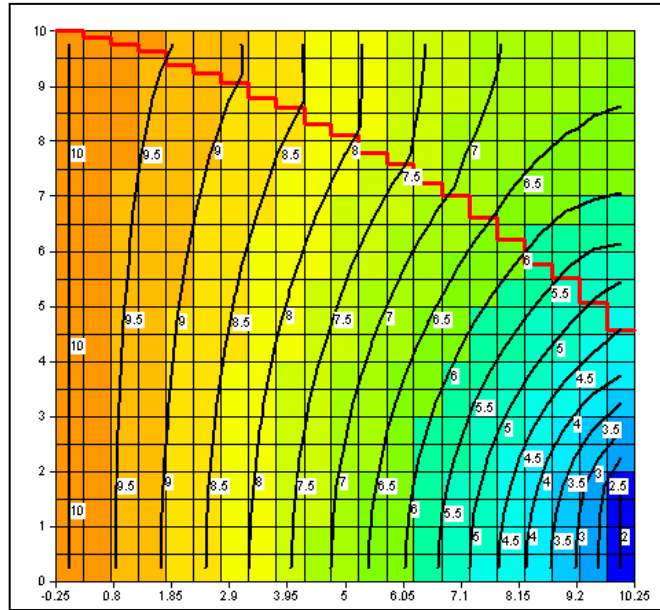


Figure 56 – Écoulement à surface libre à travers un barrage avec surface de suintement : isovaleurs de charge hydraulique et surface libre (en rouge).

Remarque : Pour la simplicité cet exemple est traité en coupe, mais MARTHE permet de le traiter en 3D.

14. Exemple n°4 : Simulation fine en radial d'une remontée de la surface libre résultant d'une recharge locale à travers la zone non saturée

Cet exemple montre comment utiliser un modèle en radial pour calculer finement la remontée de la surface libre d'une nappe résultant d'une recharge locale à travers la zone non saturée.

Les caractéristiques du système sont les suivantes (Figure 57) :

- Épaisseur de l'aquifère = 70 pieds (substratum = 0, topographie = 70 pieds)
- Extension latérale = 5000 pieds
- Perméabilité horizontale = 5 pieds/jour = $5 \times 3.57278 \cdot 10^{-6}$ m/s
- Anisotropie verticale de perméabilité = 0.05
- Charge imposée sur la limite latérale = 25 pieds (jusqu'à l'altitude 25 pieds).
- Coefficient d'emménagement en nappe libre = 20 % (emménagement captif négligeable = 0.001 m^{-1}).
- Débit de recharge = $254 \text{ m}^3/\text{jour}$ sur une surface d'environ 24281 m^2 .
- Calcul en régime transitoire
(Remarque : 1 pied = 0.3048 mètre).

14.1. MODÉLISATION

On va discrétiser ce système en 14 couches de 5 pieds d'épaisseur et avec des mailles d'extension latérale de 125 pieds.

Pour modéliser efficacement ce système, en profitant de la symétrie on utilise la possibilité de MARTHE de gérer un maillage en radial :

- Abscisses : Les abscisses correspondent à la distance radiale depuis l'origine, les colonnes correspondent donc à des couronnes dont le rayon est l'abscisse
- Ordonnées : Les ordonnées correspondent à l'angle (en degré), les lignes correspondent à un secteur d'angle.

Compte tenu de la symétrie, on pourrait représenter chaque couche par une ligne de largeur 360° et de longueur 5000 pieds, divisée en 40 colonnes de 125 pieds. On aurait alors 14 couches composées chacune d'une ligne de 40 colonnes.

En fait, il est encore beaucoup plus simple de réaliser une « coupe verticale en radial ».

Le maillage est alors composé de 40 colonnes de 125 pieds de largeur et de 14 lignes de 5 pieds qui représentent les 14 couches. On indique que la tranche de coupe est égale à 360° .

Pour créer le maillage, on utilise WinMarthe et on crée un maillage régulier de 40 colonnes, 14 lignes et une seule couche. On peut laisser les valeurs par défaut de « cote topo » à 0 mètre, et d'épaisseur de 10 m car ces données ne seront pas utilisées, mais calculées à partir du maillage.

14.1.1. Paramètres généraux


Paragraphe : « Unités des données » :

3.57278e-6 = Unité de Perméabilité des Aquifères en m/s (ou m²)
 m3/j = Unité de Débit en m³/s (kg/s si Gaz)
 0.3048 = Unité de Charge, Altitude en m
 1e-3 = Unité de coefficient d'Emmagasinement Captif en [-] ou 1/m
 % = Unité de coefficient d'Emmagasinement Libre en [-] [% si en %]
 0.3048 = Unité de Coordonnée Horizontale des mailles en m
 5e-2 = Coefficient d'Anisotropie Verticale Kv/Kh de la Perméabilité
 % = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-] [% si en %]

Paragraphe : « Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs » :

Coupe = Orientat. maillage : 0=Standard ; 1=Coupe Verticale : Pesanteur sur Oy
 360 = Épaisseur Tranche de coupe (Unité de Coordonnées de Mailles ou Degrés)

14.1.2. Définition du type de maillage : Radial

Icône  pour faire apparaître le menu général des « Paramètres non maillés », puis
 → « Couches Aquifères et Gigognes » → « Préprocesseur » → Paragraphe « Sous-maillages Gigognes, Coupe, Radial » (fichier de description des couches [.layer]).

Paragraphe : « Sous-maillages Gigognes, Coupe, Radial » :

0 = Nombre de sous-maillages Gigognes
 0 = Coupe Verticale à Substratums Irréguliers (0=Non 1=Oui)
 1 = Maillage Radial [Rayon , Angle] (0=Non 1=Oui)

14.1.3. Débit de percolation

On applique le débit de percolation de 254 m³/j réparti sur les deux premières mailles, c'est-à-dire sur un disque de rayon 125 pieds et sur la couronne de rayons 125 à 250 pieds, soit une surface totale d'environ 18 241 m². On introduit ¼ du débit sur la maille n°1 et ¾ du débit sur la maille n°2 qui a une surface 3 fois plus grande.

14.2. MODÉLISATION EN RÉGIME PERMANENT

On réalise un premier calcul en régime permanent avec les paramètres de résolution suivants :

Paragraphe : « Contrôle de la Résolution Hydrodynamique » :

60 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)
1e-7 = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour Convergence
0 = Coefficient de Relaxation des calculs [Déf=1]
Perman = Régime Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]
1 = Perméabilité Verticale nominale si Pseudo-Zns [1=Oui ; 0=Selon satur]

Remarque : Le dernier paramètre « Perméabilité Verticale nominale » permet de gérer plus efficacement la percolation à travers les couches dénoyées.

14.3. RÉSULTATS DE LA MODÉLISATION EN RÉGIME PERMANENT

Dans le fichier des pas de temps [.pastp], on demande la sauvegarde du champ de la charge hydraulique et du champ de taux de saturation « %SATURAT/EDITI l= 1; ».

Les calculs s'effectuent extrêmement rapidement en 16 itérations, en 1/10 de seconde, sans aucune difficulté, avec une convergence parfaite :

- Écart de convergence globale = $1 \cdot 10^{-4}$ %
- Écart de convergence interne = $2 \cdot 10^{-10}$ %

Comme on est en coupe verticale, on obtient un fichier « surflib.blm » contenant le profil de la surface libre calculée. On obtient également un fichier « surflib.prn » en format compatible avec le tableur Excel® ou un tableur équivalent. Le champ « Taux de saturation » est sauvegardé dans le fichier « chasim.out ».

La Figure 57 montre le champ du taux de saturation (totalement saturé en couleur orange) avec superposition du profil de la position de la surface libre calculée (trait rouge) du fichier « surflib.blm ».

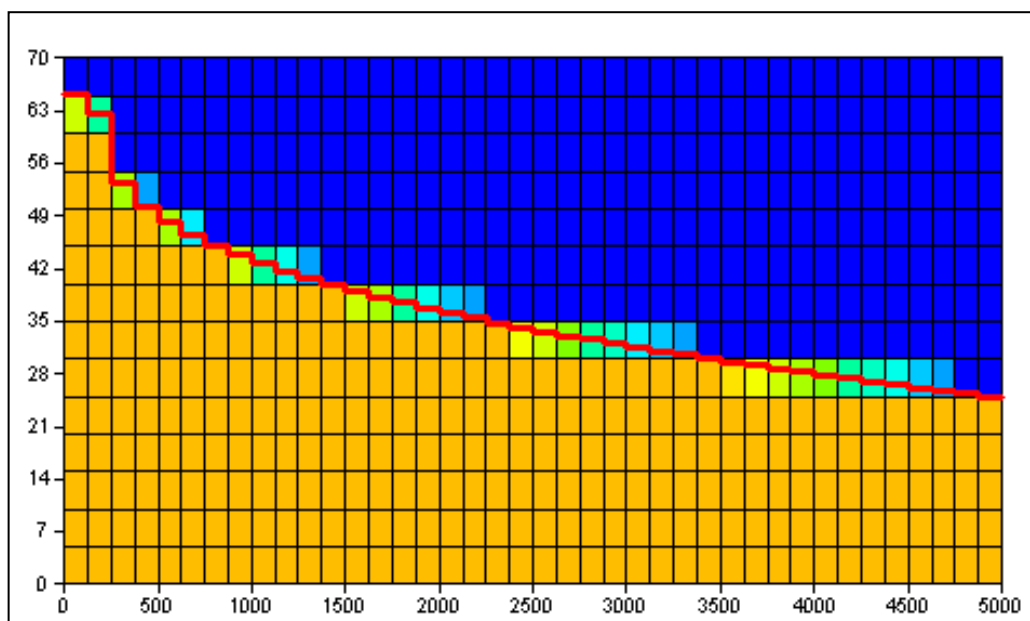


Figure 57 – Remontée de la surface libre : régime permanent.
Champ du taux de saturation avec profil de la surface libre en rouge.

14.4. MODÉLISATION EN RÉGIME TRANSITOIRE

On part d'un niveau piézométrique horizontal à l'altitude 25 pieds et on calcule l'évolution de la surface libre au cours du temps. On modélise une période totale de 498 000 jours en utilisant des pas de temps dont la durée suit une croissance géométrique de raison 1.3. Le premier pas de temps a une durée de 0.3 jour, le 2^{ème} une durée 1.39 jour et le 50^{ème} une durée de 114 906 jours.

Le calcul en régime transitoire est réalisé avec les paramètres de résolution suivants :

Paragraphe : « Contrôle de la Résolution Hydrodynamique » :

<p>100 = Nombre Maxi d'itérat. par pas de temps de calcul suivant le pas n°0 0 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Perman. Initial) 1e-7 = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour Convergence 0.2 = Coefficient de Relaxation des calculs [Déf=1] Transit = Régime Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent] 1 = Perméabilité Verticale nominale si Pseudo-Zns [1=Oui ; 0=Selon satur.]</p>
--

En régime transitoire, compte tenu des non-linéarités, il est nécessaire d'utiliser un coefficient de sous-relaxation des calculs. Avec ces paramètres les 50 pas de temps de modèle sont calculés en quelques secondes. La convergence des calculs est très bonne. Dans le fichier des pas de temps [.pastp], avec le préprocesseur, on demande la sauvegarde du champ de la charge hydraulique après 12 j, 50 j, 111 j, 190 j, 700 j, 2600 j, 9700 j et 36000 j. On obtient donc dans le fichier « surflib.bln » les profils de charge hydraulique pour ces dates.

La Figure 58 montre le champ du taux de saturation au dernier pas de temps, ainsi les profils d'évolution de la surface libre après 12 j, 50 j, 111 j, 190 j, 700 j, 2600 j, 9700 j et 36000 j, de bas en haut. Pour une meilleure visualisation on a extrait avec un éditeur de texte les profils des différentes dates du fichier « surflib.bln » et on les a mis dans des fichiers séparés de façon à pouvoir leurs affecter des couleurs différentes dans le menu « Polygone » de WinMarthe.

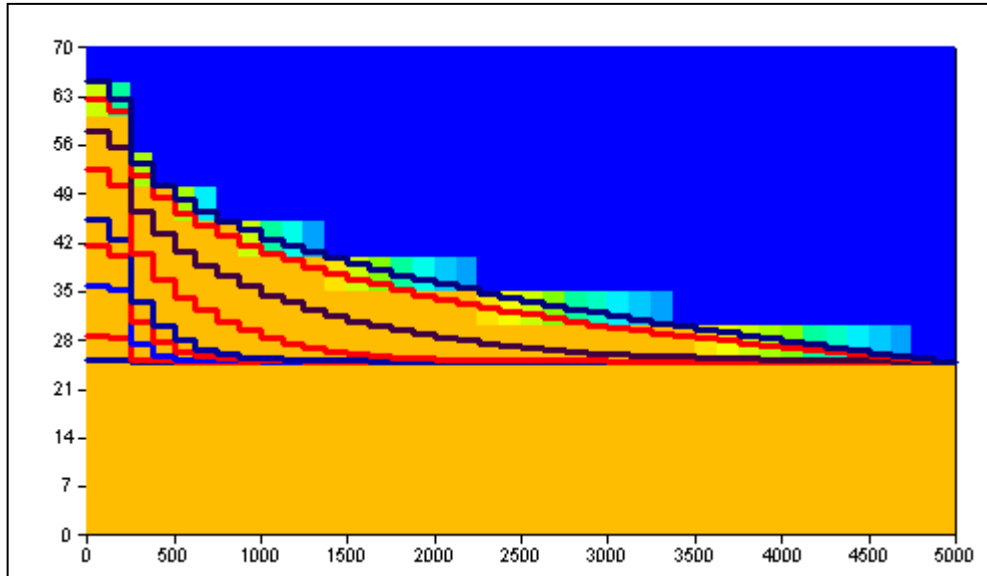


Figure 58 – Remontée de la surface libre : régime transitoire. Champ du taux de saturation en fin de calcul et profils successifs de la surface libre de bas en haut.

Remarque : Pour la simplicité cet exemple est traité en 2D radial, mais MARTHE permet de le traiter en 3D.

15. Exemple n°5 : Écoulement avec effets de densité à proximité de la mer. Biseau salé de Henry

Cet exemple classique de la littérature montre comment prendre en compte simplement les effets de densité liés aux variations de salinité dans un aquifère côtier. La mise en œuvre de la prise en compte des effets densitaires avec le code MARTHE est décrite par Thiéry (2015b), dans le rapport [BRGM/RP-64765-FR](#).

Le système aquifère de 200 cm de large sur 100 cm de haut, sera 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 (Figure 59).

Les caractéristiques du système sont les suivantes :

Paramètres hydrodynamiques et hydrodispersifs :

- Perméabilité : $K = 1 \cdot 10^{-2} \text{ m/s}$
- Porosité : $\omega = 35 \%$
- Diffusion : $D = 6.6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
- Dispersivités = 0
- Loi de densité : Loi linéaire $\rho = 1000 + 1 \cdot \text{Concentration}$ (concentration en kg/m^3).

Conditions aux limites :

- Limite ouest : Salinité extérieure = 0, débit d'eau douce = $660 \cdot 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$ répartis sur 20 mailles.
- Limite est : Salinité extérieure = 25 kg/m^3 , charge imposée = 0. sur chaque maille.

État initial :

- Salinité = 0 partout sauf 25 kg/m^3 sur la limite est.
- Hydrodynamique : Charge hydraulique uniforme = 0 partout.

Maillage :

On adopte un schéma en coupe. Le maillage sera formé de 41 colonnes de 5 cm de large (La colonne n°41, la limite à la mer, a une largeur différente égale à 0.1 cm) et 20 lignes de 5 cm de haut.

15.1. MODÉLISATION EN RÉGIME PERMANENT

La première modélisation de ce système se fait sans difficulté avec une hydrodynamique en régime permanent et un transport en régime permanent. Comme le régime est permanent, on fixe un maximum de 25 itérations de couplage entre l'hydrodynamique et le transport de la salinité. Pour l'hydrodynamique, on fixe un maximum de 3 itérations externes (à chaque itération de couplage). La nappe étant captive, 1 ou 2 itérations externes sont en effet suffisantes, à condition d'avoir un nombre suffisant d'itérations internes (fixé ici à 50).

Compte tenu de la forte diffusion, le transport est calculé avec la « méthode des différences finies » qui est la méthode par défaut.

En résumé, les paramètres sont les suivants :

Couplage :

- Nombre d'itérations de couplage = 25.

Hydrodynamique :

- Régime = Permanent.
- Méthode = Calcul en charge d'eau douce.
- Nombre maximal d'itérations = 3 (et 50 itérations internes au maximum).


Transport :

- Régime = Permanent.
- Méthode = Différences Finies.

15.1.1. Définition du maillage

On crée un nouveau projet, puis on commence par définir un maillage régulier de 41 colonnes de 5 cm et 20 colonnes de 5 cm, avec pour origine le point (x=0, y= -100).

On ajuste alors la largeur de la 41^{ème} colonne de la manière suivante :

On sélectionne la 41^{ème} colonne, puis on utilise l'icône «  = Modifie la largeur de la colonne sélectionnée » pour modifier sa largeur de 5 cm à 0.1 cm. La largeur de la colonne est réduite et, étant devenue très petite devient à peine visible.

15.1.2. Définition des données maillées

On peut procéder comme dans les exemples précédents et définir :


- Une porosité égale à 35 (%) dans tout le domaine.

- Un champ de « Débit » avec $+33 (10^{-7} \text{ m}^3/\text{s})$ sur chacune des 20 lignes de la colonne n°1, et « 9999 » sur les 20 lignes de la colonne n°41. Cette colonne étant très mince, il faut zoomer fortement pour pouvoir la sélectionner.
- Un champ de « Salinité » avec uniquement des valeurs égales à $25 (\text{kg}/\text{m}^3)$ sur la colonne n°41.
- Un champ de « Salinité Extérieure » avec également uniquement des valeurs égales à $25 (\text{kg}/\text{m}^3)$ sur la colonne n°41.

On verra qu'il est également possible de définir toutes ces données sous forme « d'initialisation avant calcul » avec le module de gestion des « Paramètres non maillés ». Cette deuxième approche, quoique légèrement moins « visuelle », est tout à fait adaptée aux cas simples. Elle a l'avantage de générer uniquement un seul champ maillé : le champ de la perméabilité ce qui facilite fortement une éventuelle modification de maillage, et permet d'examiner facilement toutes les données d'un coup d'œil.

15.1.3. Définition des paramètres non maillés

On procède comme dans les exemples précédents.

On actionne l'icône  pour faire apparaître le menu général des « Paramètres non maillés », puis ➔ « Profil d'utilisation ». On choisit alors :

<p>1 = Régime Transitoire</p> <p>2 = Salinité (1=Oui ; 2=Calcul de la Salinité et de la Densité)</p>
--

(On choisit « Régime transitoire », car on réalisera ultérieurement un calcul en régime transitoire.)

Après avoir sauvegardé, on retourne au menu général des « Paramètres non maillés », puis on choisit « Paramètres généraux ». On définit alors les paramètres suivants.

Paragraphe : « Contrôle de la Résolution Hydrodynamique » :

<p>3 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)</p> <p>5e-6 = Variation moyenne de charge entre 2 itérations pour Convergence</p> <p>50 = Nombre d'itérations internes pour le solveur [Déf=10]</p> <p>Perman = Régime Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]</p>
--

Paragraphe : « Unités des données » :

<p>cm/s = Unité de Perméabilité des Aquifères en m/s (ou m2)</p> <p>1e-7 = Unité de Débit en m3/s (kg/s si Gaz)</p> <p>cm = Unité de Charge, Altitude en m</p> <p>% = Unité de coefficient d'Emmagasinement Libre en [-] [% si en %]</p> <p>cm = Unité de Coordonnée Horizontale des mailles en m</p> <p>% = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-] [% si en %]</p> <p>1e-6 = Unité de Masse en kg</p>
--

Paragraphe : « Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs » :

100 = Épaisseur Tranche de coupe (Unité de Coordonnées de Mailles ou Degrés)
Coupe = Orientat. maillage : 0=Standard ; 1=Coupe Verticale : Pesanteur sur Oy

Paragraphe : « Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité » :

25 = Nombre maximal d'itérations pour *Couplage* Densité/Pression
6.6e-6 = Diffusion moléculaire (m2/s) [* = Spatialisée]

Paragraphe : « Salinité, Densité » :

DOUCE = Effet de la Densité (0=Non 1=Charge 2=Pression 3=Charge_eau_Douce)
LIN = Loi Densité = F(Salinité) (0=Non 1=Linéaire 3=Schlum_VDB)
1 = Dérivée de la loi Densité = F(Salinité) [si loi Linéaire] [Déf=0.7]
1e-4 = Variation moyenne de Salinité entre 2 itérations pour convergence
Perman = Régime Transport Salinité [0=Transitoire ; 1=Permanent]
1 = Calcul (Transport) de la Salinité

Il est indispensable de sélectionner « **1** = Calcul de la Salinité » sinon la salinité est uniquement « prise en compte » mais pas « calculée » à partir des fonctionnalités de transport couplé.

Paragraphe « Initialisation avant calculs »

Comme nous l'avons rappelé, c'est dans ce paragraphe qu'on peut définir des modifications ponctuelles dans le maillage avant calculs. C'est ici aussi qu'on peut demander la sauvegarde de champs calculés au pas de temps n°0 c'est-à-dire en régime permanent. Au lieu de définir graphiquement les champs de Débit, de Salinité, et de Salinité Extérieure, on peut les définir ici, de la même suivante :

On sélectionne le Paragraphe « Initialisation avant calculs » puis :

« Nouvelles Actions » → *Thème* « Transport, Salinité, Trajectoires » → *objet* « POROSITE » → *action* « GRILLE » et on lui affecte la valeur « =35 » (sans oublier le signe « = »).

Puis dans ce même thème : *objet* « SALINITE » → *action* « MAILLE » et on choisit : *Col* **41**, *Ligne* **1**, *Couche* *, *Valeur* **25**.

Puis *objet* « SALIN_EXT » → *action* « MAILLE » et on choisit : *Col* **41**, *Ligne* **1**, *Couche* *, *Valeur* **25**.

Puis dans le thème « Paramètres Hydrodynamiques classiques » *objet* « CHARGE » → *action* « GRILLE » et on lui affecte la valeur « 0 » (qui était de toute façon la valeur par défaut).

Puis *objet* « DEBIT » → *action* « MAILLE » et on choisit : *Col* **1**, *Ligne* **1**, *Couche* *, *Valeur* **33**.

Puis *objet* « DEBIT » → *action* « MAILLE » et on choisit : *Col* **41**, *Ligne* **1**, *Couche* *, *Valeur* **9999**.

Pour les sauvegardes, on choisit :

- objet « CHARGE » → action « EDITION » indice 1
- objet « SALINITE » → action « EDITION » indice 1
- objet « VITESSE » → sauvegarde 1 = « Vitesse centrée »

15.2. RÉSULTATS

Les calculs se terminent en une seconde et convergent très bien.

La Figure 59 présente les courbes d'iso-salinité (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 60 présente la charge hydraulique réelle (en cm). Elle montre nettement que les vitesses ne sont pas perpendiculaires aux courbes iso-charge.

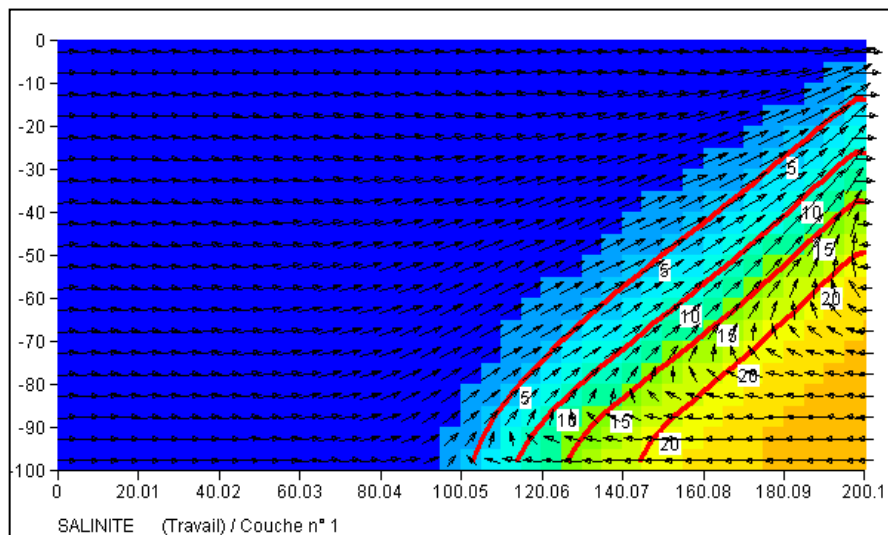


Figure 59 – Champ de Salinité calculée.

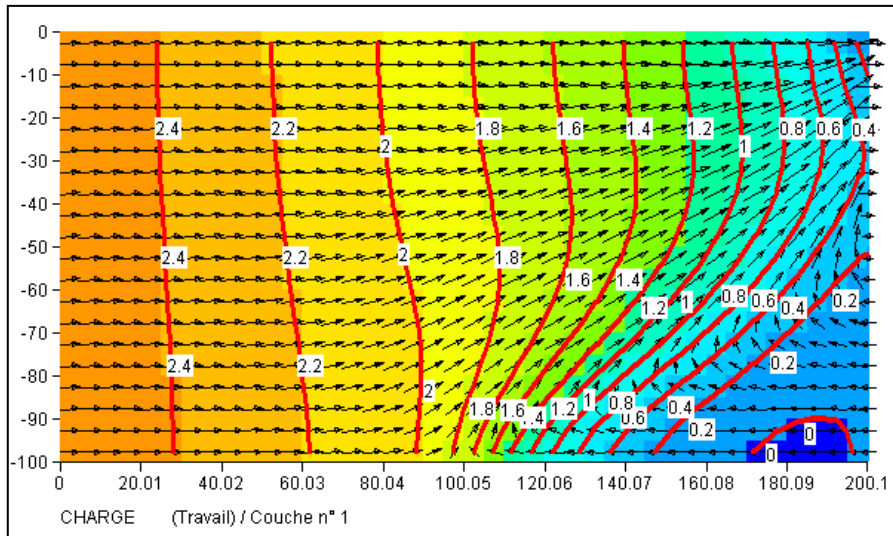


Figure 60 – Champ de la charge hydraulique réelle calculée.

15.3. MODÉLISATION EN RÉGIME TRANSITOIRE, SANS DIFFUSION

La deuxième modélisation de ce système est faite en régime transitoire et sans diffusion ni dispersion, ce qui générera une interface abrupte. Pour un système sans diffusion, à interface abrupte, on utilise la méthode de transport TVD. Le transport est calculé en régime transitoire. En revanche, les calculs hydrodynamiques sont réalisés en régime permanent puisque le système étant captif, le coefficient d'emmagasinement captif est négligeable et le champ de vitesse s'établit très rapidement. La simulation est réalisée pendant 15 pas de temps de durée croissante, de 1 mn au début à 10 mn à la fin, qui représentent une durée cumulée égale à 80 minutes. Pour mieux suivre l'évolution du biseau, chacun de ces 15 pas de temps de modèle a été découpé en 5 sous-pas de temps. Les paramètres hydrodynamiques et les conditions aux limites sont identiques à ceux du régime permanent : le système est initialement rempli d'eau douce, un biseau salé se développera donc progressivement vers la gauche. Pour ce calcul, on a légèrement modifié le maillage. On utilise un maillage régulier avec 40 colonnes égales de 5 cm (au lieu de 41 colonnes avec la 41^{ème} colonne de 0.1 cm). En effet, la méthode de transport TVD serait pénalisée par les très petites mailles. Comme le transport est en régime transitoire, on fixe un maximum de 10 itérations de couplage entre l'hydrodynamique et le transport de la salinité.

En résumé, les paramètres sont les suivants :

Couplage :

- Nombre maximum d'itérations de couplage = 10
- Coefficient de sous-relaxation = 0.7 (mais sans sous-relaxation on obtient également des résultats corrects).

Hydrodynamique :

- Régime = Permanent
- Méthode = Calcul en charge d'eau douce

- Nombre maximal d'itérations à chaque pas de temps = 3 (et 50 itérations internes au maximum)

Transport :

- Régime = Transitoire.
- Méthode = TVD (« Total Variation Diminishing »).
- Diffusion = 0
- Dispersion = 0

La Figure 61 et la Figure 62 présentent les courbes d'iso-salinité (kg/m^3) respectivement après 15 mn et après 80 mn. On voit que l'interface est bien abrupte, sans dispersion numérique.

Paragraphe : « Pas de temps et sous-pas de temps » :

15 = Nombre max possible de Pas de temps de Modèle en Transitoire
5 = Nombre de Sous-Pas de temps de modèle

Paragraphe : « Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité » :

10 = Nombre maximal d'itérations pour *Couplage* Densité/Pression
0.7 = Coefficient de Relaxation pour Couplage Densité/Pression [Déf=1]
TVD = Schéma de Transport [0=D_Finies ; 1=Random_W ; 2=Caract=MOC ; 3=TVD]
0 = Diffusion moléculaire (m²/s) [* = Spatialisée]

Paragraphe : « Salinité, Densité » :

0 = Régime Transport Salinité [0=Transitoire ; 1=Permanent]

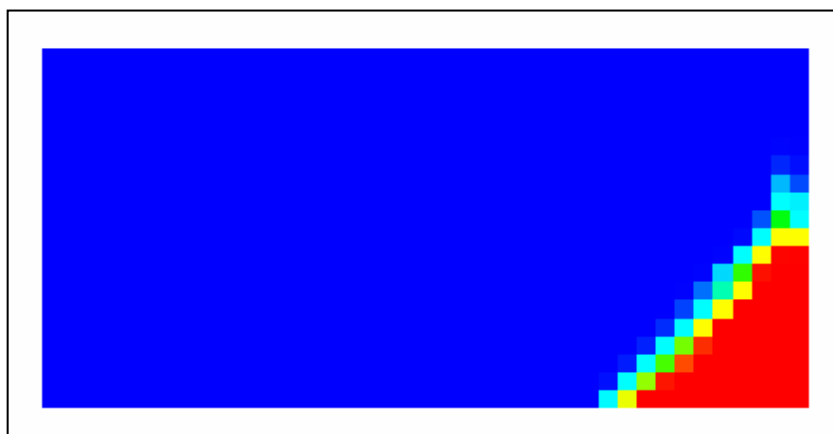


Figure 61 – Champ de Salinité calculée après 15 minutes.

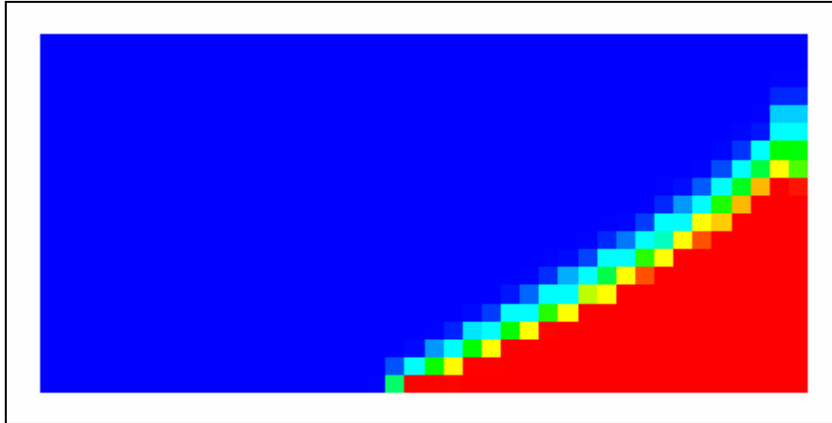


Figure 62 – Champ de Salinité calculée après 80 minutes.

16. Exemple n°6 : Simulation d'un doublet géothermique

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 m³/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 système 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 : $D = 0$ m²/s.
- Dispersivité longitudinale : $\alpha_L = 10$ m (dispersivité transversale = 0).
- Débit de pompage et de réinjection = 50 m³/h (soit 12.5 m³/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/m³/°C dans l'aquifère, $2.1 \cdot 10^6$ J/m³/°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 sur **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 thermiques 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 Transferts Thermiques [0=Transitoire ; 1=Permanent]
2.5	=	Conductivité Therm. du minéral (W/m/deg) [Déf=1.5] [* = Spatialisée]
10	=	Dispersivité Longitudinale Thermique (m) [* = Spatialisée]
0	=	Dispersivité Transversale Thermique (m) [* = Spatialisée]
0	=	Capacité thermique de l'Eau (J/kg/deg.) [Déf=4185]
*	=	Capacité therm Volum. Minéral (J/m3/deg) [Déf=2e6] [* = Spatialisée]
0	=	Conductivité Thermique Eau (W/m/deg) [Déf=0.6]
1	=	Calcul du champ de Température (Transport)

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=	-12.5;
/DEBIT/MAILLE	C=	51L=	1P=	1V=	12.5;
/TEMPER_EXT/MAILLE	C=	51L=	1P=	1V=	12;

16.1. RÉSULTATS

Les calculs se terminent en quelques minutes.

La Figure 63 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 64 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. La Figure 65 montre la température calculée dans l'aquifère si on néglige l'influence des épontes, c'est-à-dire si on considère qu'elles sont adiabatiques. Dans ce cas le refroidissement est beaucoup rapide (Figure 66).

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 66 montre que, bien que le gradient soit très faible, le refroidissement est alors significativement plus long.

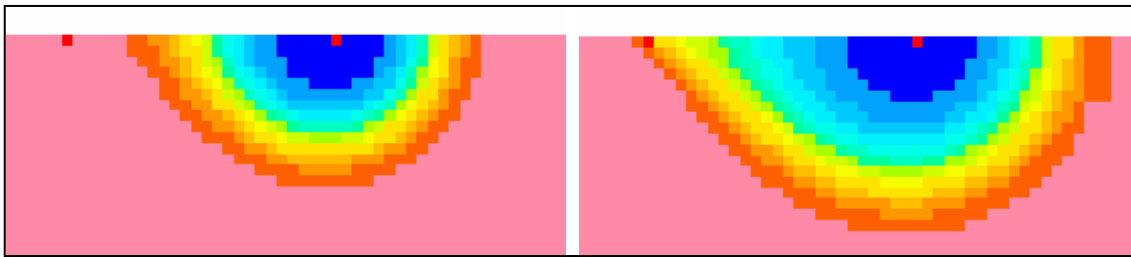


Figure 63 – Vue en plan de la température dans l'aquifère après 17.5 et 35 ans.

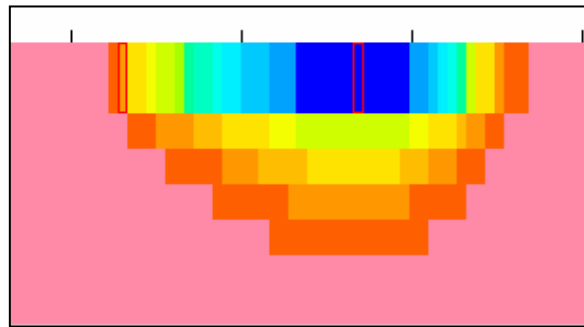


Figure 64 – Vue en coupe verticale de la température dans l'aquifère et les épontes après 35 ans.

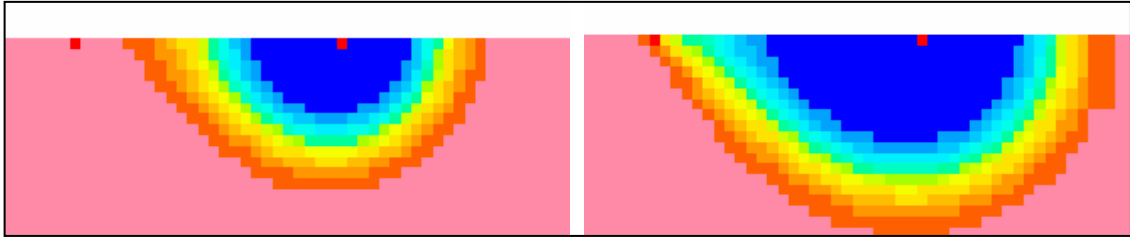


Figure 65 – Vue en plan de la température dans l'aquifère après 17.5 et 35 ans en supposant des épontes adiabatiques.

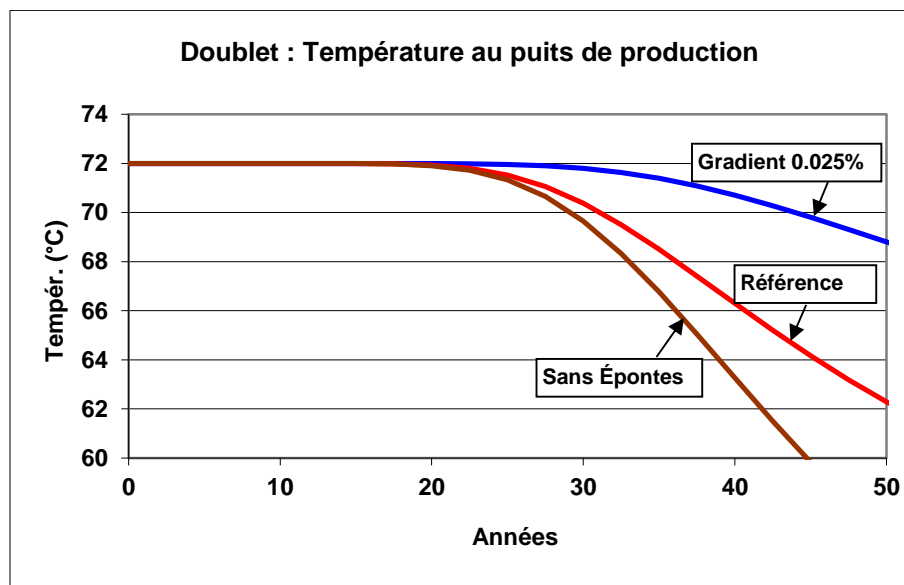


Figure 66 – Évolution de la température au puits de pompage (avec ou sans prise en compte des épontes, avec ou sans écoulement régional).

16.2. CALCULS AVEC 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 $\frac{1}{2}$ 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 = Épentes thermiques simulées par une solution analytique (Vinsome)
 ou bien, plus lisiblement :
Vinsome = Épentes thermiques simulées par une solution analytique (Vinsome)

Il faut aussi donner un indice d'épente thermique égal à 1 dans la couche n°2. Ceci peut être fait en sélectionnant le champ « **Indice d'épente thermique (solution analytique)** », par exemple dans le paragraphe « Initialisation avant calculs » (Figure 67).

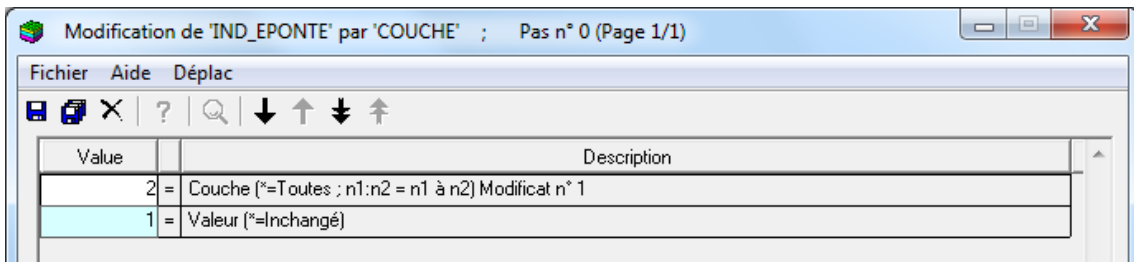


Figure 67 – Définition d'un « indice d'épente thermique analytique » dans la couche n°2.

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 68 montre que les résultats obtenus sont quasiment identiques.

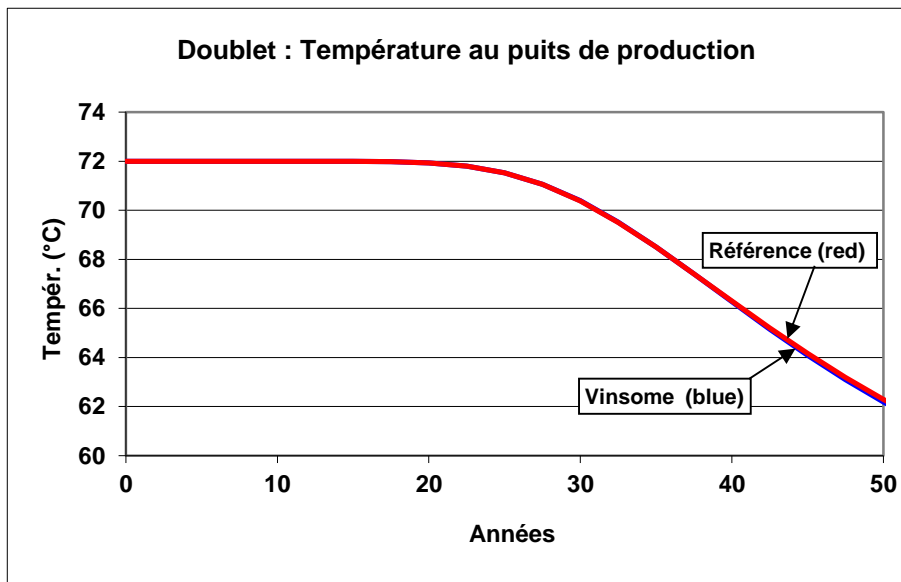



Figure 68 – Évolution de la température au puits de pompage : comparaison de la méthode approchée de Vinsome avec le calcul de référence avec 6 couches d'épentes.

16.3. 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 utiliser cette fonctionnalité, il faut avoir défini un « profil d'utilisation avancée » (ou bien aucun profil).

Pour définir un asservissement 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 69).

On clique sur « Préprocesseur » puis « Créer un nouveau fichier « Asservis. Température injection' ». On définit alors, Figure 70, les numéros de colonne, ligne, couche, gigogne du puits de production (ici colonne n°26, ligne n°1, couche n°1), puis 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 °C, c'est-à-dire une injection à une température 50° C plus basse que la température du puits de production.

On sauvegarde alors ce fichier sous le nom « Doublet_6_50.t_reinj ». Le nom de ce fichier sera donc dans le fichier projet. Il n'y a pas d'autre modification à effectuer.

La Figure 71 montre l'évolution de la température au puits de production qui diminue de 72°C au début à 54°C après 100 ans. La température d'injection passe donc de 72°C - 50°C = 22°C au début, à 4°C après 100 ans.

La Figure 72 montre la comparaison de la simulation de référence avec une température d'injection permanente de 72°C – 50 = 22°C, avec la simulation avec asservissement. Il apparaît qu'à partir de 60 ans la simulation précise, avec asservissement, est plus basse. L'écart est de 2.2°C après 100 ans.

Il est également possible de modifier les paramètres de l'asservissement à certains pas de temps, généralement l'écart de température (non représenté ici). On crée un autre fichier d'asservissement, par exemple « Asserviss_apres_40_ans.t_reinj ». On demande alors une modification de l'objet « TEMPER_RE-INJ » par « FICHIER ».

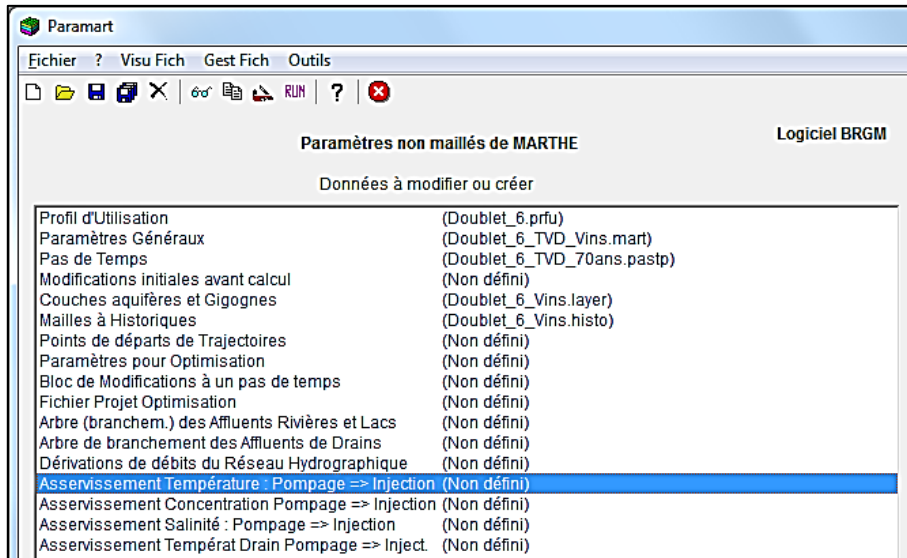


Figure 69 – Création d'un fichier d'asservissements de température.

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 70 – Définition d'asservissements de température entre un puits de production et un puits d'injection.

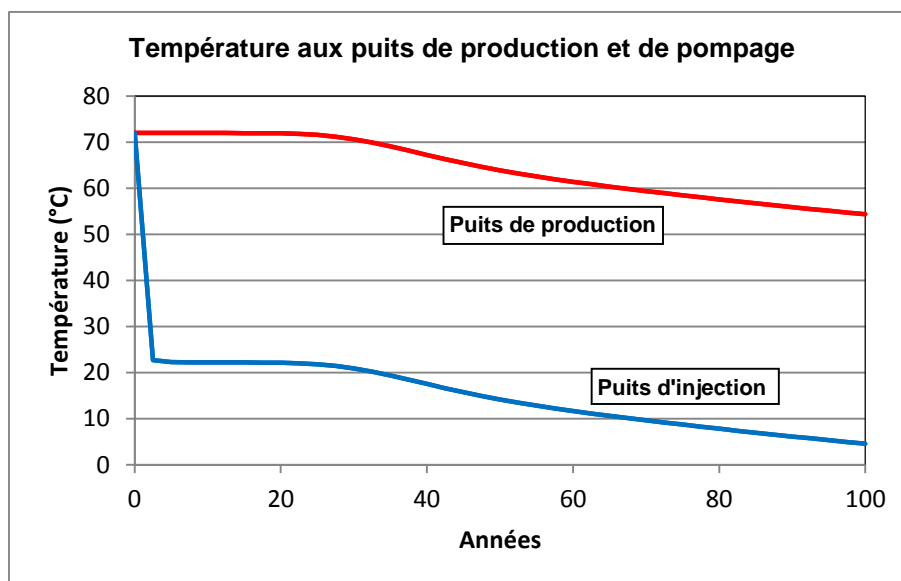


Figure 71 – Asservissements de température : évolution de la température de production et d'injection.

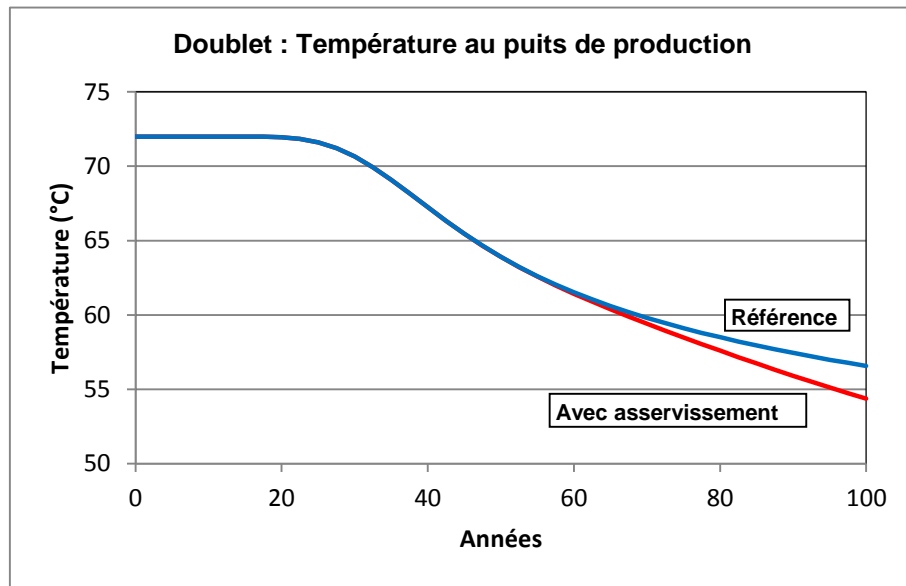


Figure 72 – Mise en évidence de l'influence de l'asservissement de la température d'injection.

17. Exemple n°7 : Écoulement sous un cours d'eau, à travers la Zone Non Saturée

Cet exemple, est adapté de l'exemple n°6 de calcul en zone non saturée cité par Cooley, R.L. (1983). Il montre comment réaliser un calcul en Zone Non Saturée pour calculer l'évolution du profil de saturation sous le cours d'eau et la réponse de la nappe. La mise en œuvre des calculs en Zone Non saturée avec le code MARTHE est décrite par Thiéry (2015c), rapport [BRGM/RP-64495-FR](#). Le système à modéliser est constitué d'une nappe et d'un cours d'eau de largeur 12 mètres dont le fond du lit est situé 14 mètres plus haut que la surface libre de la nappe (Figure 75).

Initialement tout le système, zone saturée et zone non saturée, a une charge hydraulique uniforme égale à +2 mètres. Le cours d'eau est alors instantanément rempli d'une hauteur d'eau de 2 mètres au-dessus du fond de son lit et maintenu à cette hauteur. On calcule alors en coupe verticale l'évolution du front d'humidification.

Les caractéristiques du système sont les suivantes :

Géométrie :

- Altitude du substratum de la nappe = 0 m
- Altitude de la surface libre initiale de la nappe = +2 m
- Altitude du fond du lit du cours d'eau = +16 m
- Largeur du cours d'eau = 12 m
- Épaisseur de la tranche de coupe = 1 m

État initial :

- Charge hydraulique uniforme dans tout le domaine = 2 m
- Charge hydraulique dans le fond du lit et sur les berges (jusqu'à l'altitude 18 m) initialisée à 8 m.

Conditions aux limites :

- Charge hydraulique imposée dans la nappe (à 2 m) à l'abscisse 17 mètres de l'axe du cours d'eau, depuis l'altitude 0 m jusqu'à l'altitude 2 m.
- Charge hydraulique imposée (à 18 m) dans le cours d'eau.

Paramètres hydrodynamiques :

- Perméabilité à saturation : $K_s = 1 \cdot 10^{-2}$ m/h (soit $2.778 \cdot 10^{-6}$ m/s)
- Coefficient d'emmagasinement spécifique = $1 \cdot 10^{-4}$ m⁻¹.
- Teneur en eau à saturation (porosité efficace) : $\theta_s = 25$ %

- Teneur en eau résiduelle : $\theta_R = 5 \%$
- Loi de rétention = Homographique : $\frac{h}{h_t} = \left[\frac{(\theta_s - \theta)}{(\theta - \theta_R)} \right]^{b_t}$ (en notant h la pression et θ la teneur en eau).
- « Succion à demi-saturation » : $h_t = 1.778 \text{ m}$
- Exposant de la loi de rétention : $b_t = 0.25$
- Loi de Perméabilité relative = Puissance : $Kr = \left[\frac{(\theta - \theta_R)}{(\theta_s - \theta_R)} \right]^{b_k}$
- Exposant de la loi de perméabilité relative : $b_k = 4$
- Calcul en régime transitoire

17.1. MODÉLISATION

La modélisation de ce système ne pose pas de problèmes. On adopte un schéma en « Pseudo-coupe verticale » et compte tenu de la symétrie du système on modélise uniquement la partie droite du domaine, à partir de l'axe du cours d'eau. Le maillage est formé de 34 colonnes de 0.5 m de largeur et de 40 lignes de 0.5 m de largeur qui représentent 40 couches de modélisation. L'extension verticale modélisée s'étend donc de 0 à 20 m et l'extension latérale de 0 à 17 m.

Pour donner une épaisseur de 1 mètre : lors dans la création dans WinMarthe on fixe « Cote Topog. = 0 » et « Épaisseur = 1 ». On pourrait également définir ultérieurement une « Altitude Topographique » = 0, et une « Altitude du substratum » = -1 m, (ou bien Topographie = -10 m et Substratum = -11 m.

Dans le « Profil d'utilisation », on sélectionne : « Zone Non-Saturée »

L'hydrodynamique est supposée en régime transitoire pendant une période de 400 heures, et on sauvegarde les champs de teneur en eau et de pression calculés toutes les 10 heures.

Paramètres numériques :

Compte tenu du caractère très non linéaire du système on fixe un nombre maximal d'itérations externes égal à **150** et un coefficient de sous-relaxation initialement égal à 0.7. En fait pour obtenir une convergence correcte, ce coefficient de sous-relaxation doit être diminué et fixé à **0.5**.

Compte tenu de la perméabilité relative initiale extrêmement faible, on choisit une pondération « Amont » (on obtient une simulation équivalente avec une pondération « Arithmétique »).

Fichier des « Paramètres Généraux »

Dans le fichier des paramètres [.mart] on définit avec le préprocesseur :

Paragraphe « Contrôle de la Résolution Hydrodynamique »

150 = Nombre maxi d'itérations par pas de temps de calcul suivant le pas n°0
 0 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)
 2e-5 = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour Convergence
 0.5 = Coefficient de Relaxation des calculs [Déf=1]
AMONT = Pondéra. Perméab. Voisines (1=Géomét 3=Amont 4=Harmo 5=Arith Déf=Opti)

Paragraphe : « Unités des données » :

m/h = Unité de Perméabilité des Aquifères en m/s (ou m2)
 1e-8 = Unité de Débit en m3/s (kg/s si Gaz)
 heu = Unité de Temps (des Pas de modèle) (sec,min,heu, jou, déca, moi, ann)
Spécif = Emmag. Captif lus (0=Hydrogéol. ; 1=Spécifiques ; 2=Compressibil.)
 % = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-] [% si en %]

Paragraphe : « Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs » :

Coupe = Orientat. maillage : 0=Standard ; 1=Coupe Verticale : Pesanteur sur Oy

Paragraphe : « Prise en compte de la Zone Non-Saturée » :

1 = Calcul en Zone Non Saturée [0=Non 1=Oui]
 0.1 = Durée minimale du pas de temps de calcul interne
 20 = Durée maximale du pas de temps de calcul interne
 5 = Variation maximale de Teneur en Eau pendant le Pas de temps de calcul
 0.5 = Erreur maximale de Bilan acceptée [**en %** ou en Volume d'eau]
 0 = Type d'Erreur Bilan [0=% CVG_Int 1=Bilan Glob Stock 2=Bilan Glob %]
 50 = Succion Maximale <==> Assèchement maximal
 1e-8 = Perméabilité Minimale (sécurité numérique)
Homog = Loi Rétention [1=Homogr 2=Puissance 3=Logar. 4=Van-Gen 5=B&C etc]
Puiss = Loi Perméa. [1=Homogr(prs) 2=Puiss(Satur) 4=Expon(prs) 5=V.G. etc.]
 1.778 = Succion à Demi-Saturation
 0.25 = Exposant de la Loi de Rétention
 4 = Exposant de la Loi de Perméabilité (sauf si loi Exponentielle ou V.G.)

17.2. RÉSULTATS

Les calculs se terminent en quelques secondes et convergent parfaitement (écart de bilan de 10^{-3} % soit 10^{-5}).

La Figure 73 montre l'évolution de la saturation calculée sous le cours d'eau. À titre de vérification, un calcul avec des mailles de dimension 4 fois plus petites (0.125 m au lieu de 0.5 m, soit 16 fois plus de mailles) a également été réalisé (Figure 74). Les calculs sont plus

longs et durent plusieurs minutes, mais les résultats sont extrêmement proches ce qui permet de vérifier que le maillage de 0.5 m était adapté. La Figure 74 montre l'évolution de la surface libre (pression hydraulique = 0). On voit que la nappe remonte après 160 heures et le front de saturation rejoint la nappe après 170 heures.

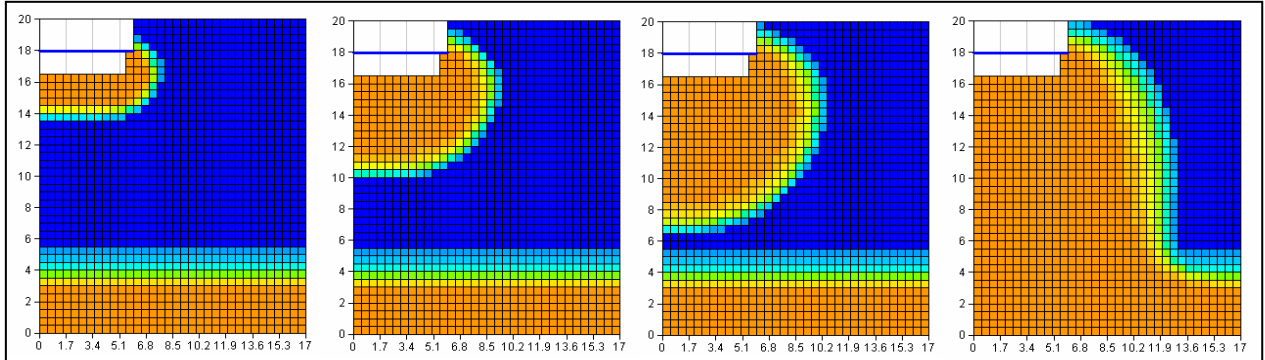


Figure 73 – Profil de teneur en eau après 10, 50, 100 et 300 heures (maillage de 0.5 m).

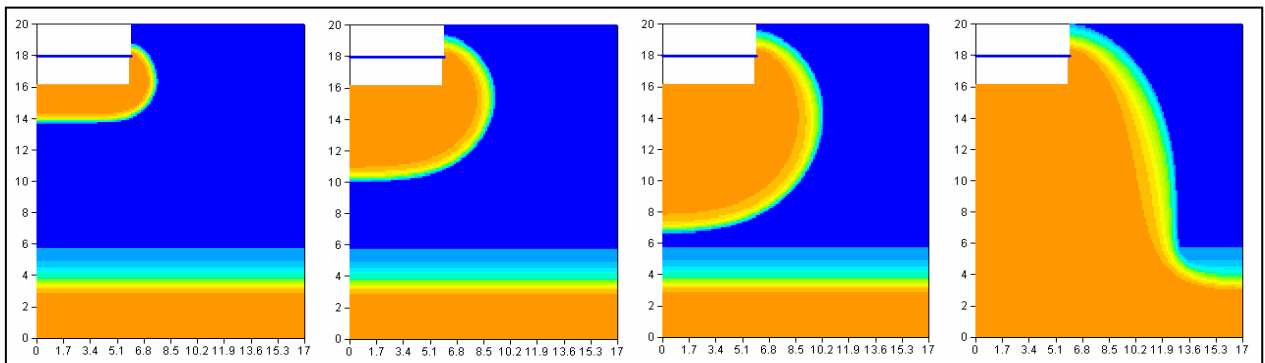


Figure 74 – Profil de teneur en eau après 10, 50, 100 et 300 heures (maillage de 0.125 m).

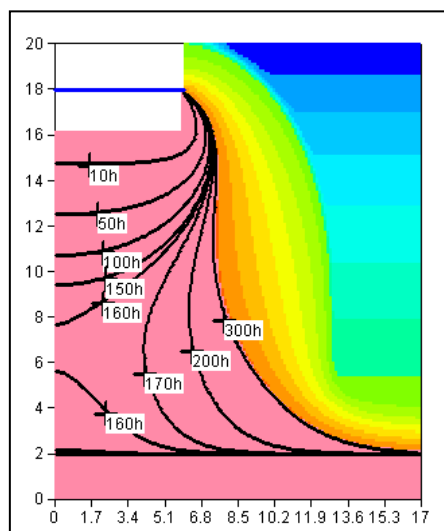


Figure 75 – Évolution au cours du temps de la surface libre (pression = 0).

17.3. CALCUL EN RADIAL

Il est quasi immédiat de refaire ce calcul en radial, c'est-à-dire de calculer le front d'infiltration sous un bassin circulaire de diamètre 12 mètres. Il suffit comme précédemment de choisir « maillage radial » dans le fichier des couches [.layer]. On obtient alors en quelques secondes la simulation correspondante. Les résultats sont peu différents, comme le montre la Figure 76. La « bulle » de saturation est seulement un peu moins large, car elle diffuse en radial, donc dans les deux directions au lieu de diffuser uniquement dans la direction ox perpendiculaire à l'axe du cours d'eau.

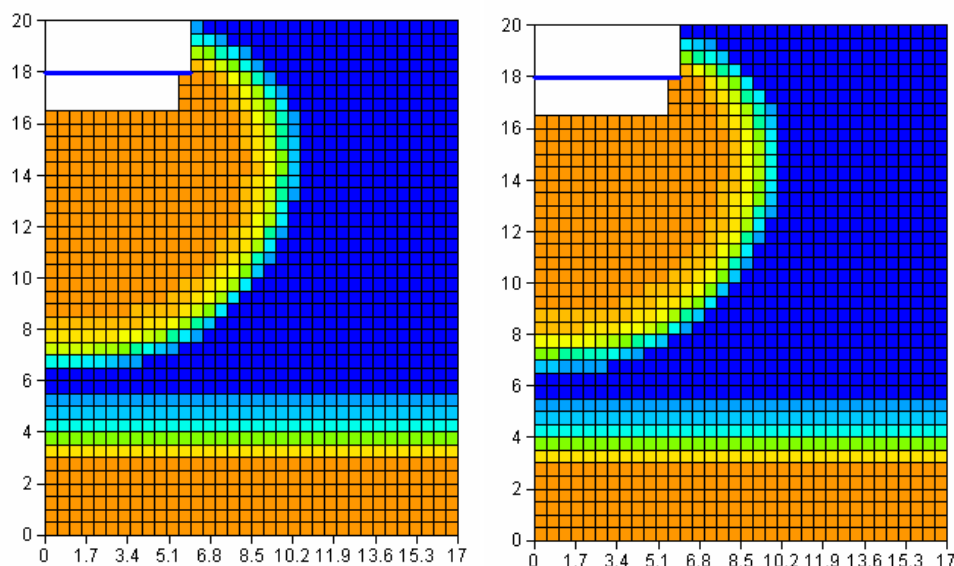


Figure 76 – Profil de teneur en eau après 100 heures : à gauche canal, à droite bassin circulaire.

17.4. TRANSPORT DE MASSE EN ZONE NON SATURÉE

Il est possible de réaliser en quelques clics un calcul de transport en zone non saturée en régime hydraulique transitoire. On procède comme dans les exemples précédents de calcul transport. On modifie tout d'abord dans le fichier profil d'utilisation [.prfu] en sélectionnant « Transport de masse classique ». Puis on définit les quelques paramètres suivants :

Paragraphe « Couplage et Transport »

```
TVD = Schéma de Transport [0=Diff_Finies ; 1=Random_W ; 2=Caract=MOC ; 3=TVD]
1.5 = Dispersivité Longitudinale (m) [* = Spatialisée]
0.2 = Dispersivité Transversale (m) [* = Spatialisée]
```

On utilise donc la méthode de transport TVD, qui est très performante. On conserve le nombre d'itération par défaut qui est égal à 20.

Paragraphe « Concentration et Trajectoires »

```
1 = Calcul de Concentration
(Par défaut le transport est réalisé en régime transitoire)
```

On pense également :

- À mettre une concentration initiale égale à 1000 unités dans les mailles représentant le fond et les berges de la rivière (les mailles dans lesquelles on a imposé une charge hydraulique de 18 mètres) et à mettre également une « concentration extérieure » égale à 1000 dans ces mêmes mailles.
- À demander, avec le préprocesseur, dans le fichier des pas de temps [.pastp] la sauvegarde du champ de concentration calculé à certaines dates.

On lance alors la simulation qui s'effectue en quelques secondes. La Figure 77 montre le champ de concentration calculée après 300 heures.

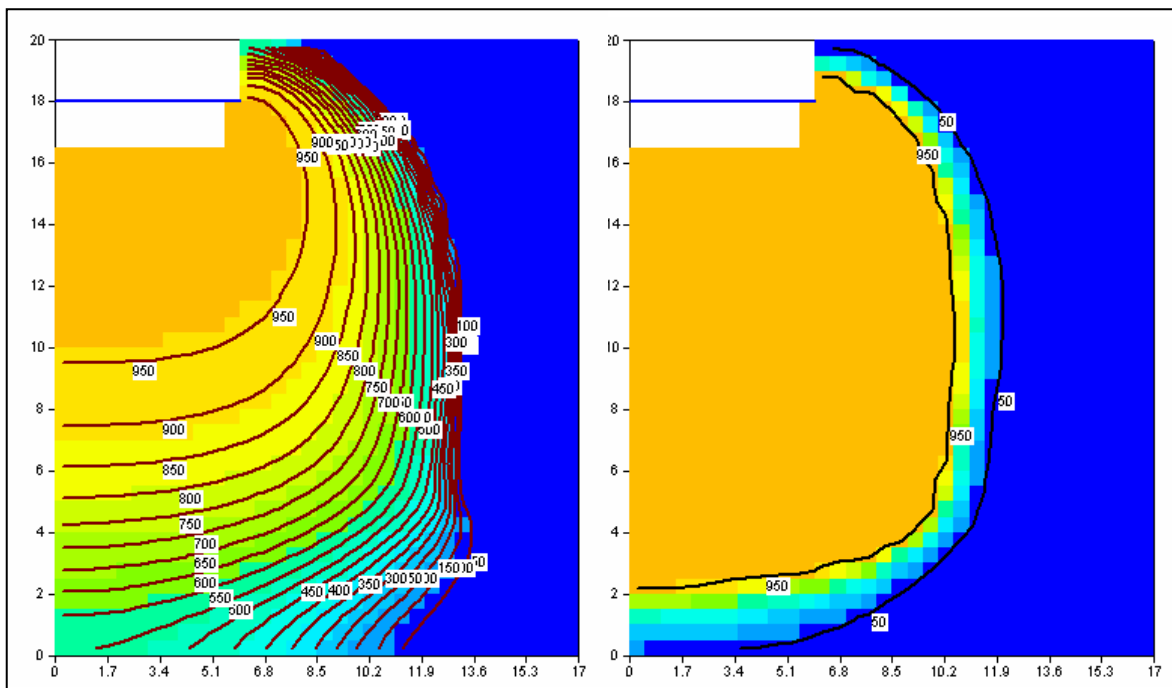


Figure 77 – Concentration après 300 heures : à gauche avec dispersivité, à droite sans dispersivité.

17.5. PRISE EN COMPTE D'UN FLUX D'INFILTRATION

On explique dans ce paragraphe comment il faudrait procéder pour introduire un flux d'infiltration ou un flux de recharge dans un schéma en « Pseudo-coupe verticale ».

17.5.1. Zones de sol et Zones météo

Dans MARTHE, les « Zones de Sol » et les « Zones météo » sont définies dans la « couche n°0 ». Dans les maillages en « Pseudo-coupe verticale », c'est la ligne n°1 qui correspond à cette couche n°0. C'est dans cette ligne n°1 qu'il faut définir les numéros de Zone de Sol et les numéros de Zone Météo (Figure 78)

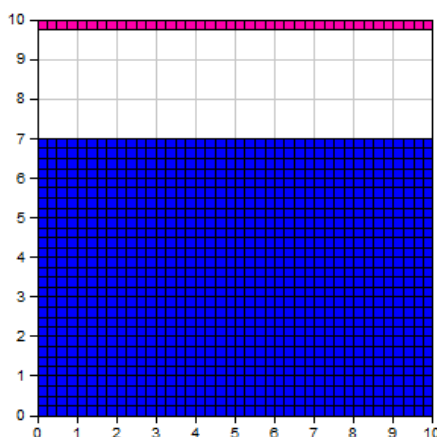


Figure 78 – Maillage en « Pseudo-coupe verticale » :
c'est la ligne n°1, en rose, qui correspond à la couche n°0.
C'est dans cette ligne qu'il faut définir les numéros de zone de sol et les numéros de zone météo.

17.5.2. Flux de recharge

Un flux de recharge peut être défini par « Zone Climatique ». Il peut également être défini par « Grille », par « Couche », par « Zone géométrique » ou par « Maille ». Si on définit un flux de recharge par maille (ou par groupe de maille), seules les valeurs définies dans les mailles affleurantes seront prises en compte (Figure 79).

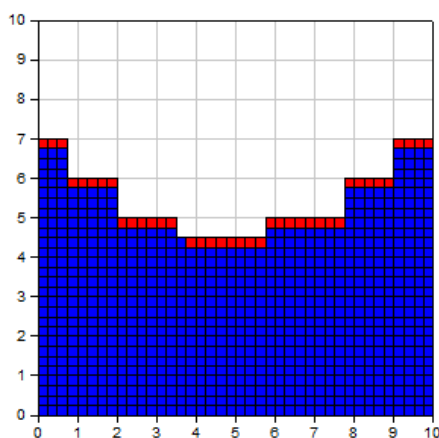


Figure 79 – Maillage en « Pseudo-coupe verticale » : Définition de flux de recharge par « maille ».
Seuls les flux de recharge définis dans les mailles affleurantes (en rouge) sont pris en compte.

18. Exemple n°8 : Écoulement à travers la Zone Non Saturée en milieu hétérogène à surfaces libres multiples

Cet exemple, est adapté de l'exemple n°4 de calcul en zone non saturée cité par Cooley, R.L. (1983). Il montre comment réaliser un calcul en Zone Non Saturée dans un système hétérogène complexe à fort contraste de perméabilité présentant plusieurs surfaces libres. La mise en œuvre des calculs en Zone Non saturée avec le code MARTHE est décrite par Thiéry (2015c), rapport [BRGM/RP-64495-FR](#). Le schéma à modéliser concerne l'écoulement à travers la berge d'un cours d'eau qui entaille un système aquifère composé de deux couches perméables séparées par une couche 1000 fois moins perméable. Une charge hydraulique de 26 m est imposée sur la limite droite (et une charge hydraulique de 0 m au fond du cours d'eau, à gauche) comme le montre la Figure 80.

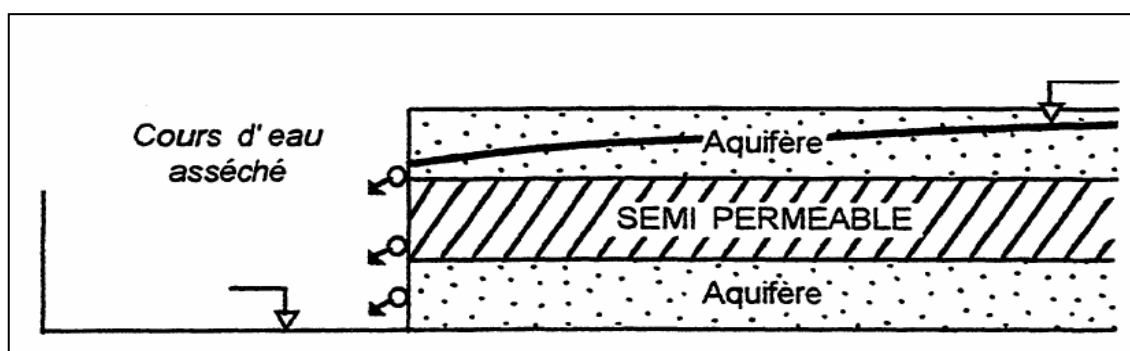


Figure 80 – Écoulement en zone non saturée dans un milieu hétérogène.

On calcule alors en coupe verticale l'état d'équilibre en régime permanent.

Les caractéristiques du système sont les suivantes :

Géométrie :

- Largeur du domaine = 200 mètres ($x = 0$ à 200 m)
- Hauteur du domaine = 26 mètres ($y = 0$ à 26 m)
- Altitudes du bas de chaque « couche » = 0 mètre, 8 mètres et 18 mètres
- Modélisation en coupe verticale

Conditions aux limites :

- Charge hydraulique imposée sur la limite droite : charge = 26 mètres
- Surface de suintement possible sur toute la limite gauche.
- Charge hydraulique imposée à 18 m sur la maille du bas de la « couche » n°1 sur la limite de gauche

Paramètres hydrodynamiques :

- Loi de Perméabilité relative = Puissance : $Kr = \left[\frac{(\theta - \theta_R)}{(\theta_S - \theta_R)} \right]^{b_k}$
- Loi de rétention = Homographique : $\frac{h}{h_t} = \left[\frac{(\theta_S - \theta)}{(\theta - \theta_R)} \right]^{b_t}$ (en notant h la pression et θ la teneur en eau).
- Perméabilité à saturation :
 - Couches n°1 et n°3 : $K_s = 1.10^{-2}$ m/s
 - Couche n°2 (semi-perméable) : $K_s = 1.10^{-5}$ m/s
- Teneur en eau à saturation (porosité efficace) : θ_S et teneur en eau résiduelle : θ_R
 - Couches n°1 et n°3 : $\theta_S = 18.75\%$ et $\theta_R = 3.75\%$
 - Couche n°2 : $\theta_S = 10\%$ et $\theta_R = 5\%$
- « Succion à demi-saturation » :
 - Couches n°1 et n°3 : $h_t = 2.1147$ mètres
 - Couche n°2 : $h_t = 4.4721$ mètres
- Exposant de la loi de rétention : $b_t = 0.25$ (0.5 dans le semi-perméable)
- Exposant de la loi de perméabilité relative : $b_k = 4$
- Calcul en régime permanent

18.1. MODÉLISATION


Pour modéliser ce système en régime permanent on adopte un schéma en « Pseudo-coupe verticale ».

Dans le « Profil d'utilisation » on sélectionne « Zone Non-Saturée ».

Le maillage est formé de 100 colonnes de 2 mètres de largeur et de 72 lignes de largeurs variables.

- La couche n°1 est représentée par les lignes n°1 à n°16 de 0.5 m d'épaisseur
- La couche n°3 est représentée par les lignes n°57 à n°72 également de 0.5 m d'épaisseur.

- La couche n°2 (semi-perméable) est représentée par les lignes n°17 à n°56 de 0.25 m d'épaisseur.

Pour créer un tel maillage irrégulier, on peut procéder comme suit : on clique sur l'icône  ou bien sur **Fichier → Nouveau**. On donne alors un nom de fichier pour le projet à créer et on précise le nombre de couches (**1** couche, cote topogr. = **0** ; Épaisseur = **1**). On coche alors « maillage irrégulier » dans le cadre « divers », puis on valide par le bouton « OK ». Des menus apparaissent alors pour définir les coordonnées de l'origine et les largeurs des lignes et des colonnes.

Une fois le maillage créé, on définit les champs spatialisés :

Perméabilité : Valeur 1000 dans les lignes n°1-16 et n°57-72, valeur 1 dans lignes n°17-56 (on choisira une unité utilisateur de perméabilité égale à 10^{-5} m/s).

Charge hydraulique initiale : Valeur initiale fixée partout à 20 m (pour faciliter l'initialisation des calculs). Sur toute la limite droite, on impose la valeur 26 m. Dans la maille (colonne=1, ligne=16) de la limite gauche, on impose une charge égale à 18 m.

Débit = 9999 pour imposer la charge hydraulique : sur toute la limite droite et dans la maille (colonne=1, ligne=16) de la limite gauche.

Index de suintement = 1 sur la limite gauche (sauf dans la maille col=1, ligne=16 où la charge hydraulique est imposée).

Zones de Géométrie : Valeur = 1 dans les lignes n°1-16 et n°57-72, valeur 2 dans lignes n°17-56, qui correspondent à la couche moins perméable.

Paramètres généraux :

Compte tenu du caractère non linéaire du système on fixe un nombre maximal d'itérations externes égal à **60** et un coefficient de sous-relaxation égal à **0.3**.

Paragraphe « Contrôle de la Résolution Hydrodynamique »

<p>0 = Nombre maxi d'itérations par pas de temps de calcul suivant le pas n°0 60 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial) 1e-5 = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour Convergence 0.3 = Coefficient de Relaxation des calculs [Déf=1] 0 = Pondéra. Perméab. Voisines (1=Géomét 3=Amont 4=Harmo 5=Arith Déf=Opti) Perman = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]</p>

Paragraphe : « Unités des données » :

<p>1e-5 = Unité de Perméabilité des Aquifères en m/s (ou m2) 1e-5 = Unité de Débit en m3/s (kg/s si Gaz) % = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-] [% si en %]</p>
--

Paragraphe : « Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs » :

<p>Coupe = Orientat. maillage : 0=Standard ; 1=Coupe Verticale : Pesanteur sur Oy</p>
--

Paragraphe : « Prise en compte de la Zone Non-Saturée » :

1 = Calcul en Zone Non Saturée [0=Non 1=Oui]
50 = Succion Maximale <=> Assèchement maximal
1e-8 = Perméabilité Minimale (sécurité numérique)

Ce n'est pas dans ce paragraphe qu'on définit les paramètres des lois de perméabilité et de rétention, car ils sont spatialisés. On définit ces paramètres dans le paragraphe « Initialisation avant calculs » du fichier des paramètres généraux.

Dans le menu « Paramètres généraux » → Paragraphe « Initialisation avant calculs » → « Nouvelles Actions » → *Thème* « Zone Non Saturée, Eau salée, Multiphasique » → *Objet* « Paramètres des lois Non Saturé » (PARA_NON_SATU) → Action « Modification par Zones (Géométriques) ». On définit alors les paramètres des deux zones :

- Zone n°1 :

1 = Numéro de la Zone de paramètres Zone Non Saturée
Homog = Loi de Rétention [1=Homogr. 2=Puiss. 3=Logar 4=Van_Gen 5=B&C ,etc]
2.1147 = Succion à 1/2 Saturation de la loi de Rétention
0.25 = Exposant de la loi de Rétention
Puiss = Loi de Perméab. [1=Homogr., 2=Puiss, 4=Expon, 5=Van_Gen ,6=B&C, etc]
4 = Exposant de la loi de Perméabil. (sans objet si Loi expon ou Van_Gen)

- Zone n°2 (couche moins perméable) :


2 = Numéro de la Zone de paramètres Zone Non Saturée
Homog = Loi de Rétention [1=Homogr. 2=Puiss. 3=Logar 4=Van_Gen 5=B&C ,etc]
4.4721 = Succion à 1/2 Saturation de la loi de Rétention
0.5 = Exposant de la loi de Rétention
Puiss = Loi de Perméab. [1=Homogr., 2=Puiss, 4=Expon, 5=Van_Gen ,6=B&C, etc]
4 = Exposant de la loi de Perméabil. (sans objet si Loi expon ou Van_Gen)

On demande (au pas de temps n°0) la sauvegarde des champs de charge hydraulique, de teneur en eau et de pression hydraulique.

18.2. RÉSULTATS

Les calculs se terminent en quelques secondes et convergent parfaitement (écart de bilan interne des débits égal à 10^{-2} % soit 10^{-4} ; écart de bilan global égal à 10^{-3} % soit 10^{-5}).

Le débit total entrant par la limite de gauche est égal à $1148.5 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$ (pour une épaisseur de tranche de 1 m).

Compte tenu de la géométrie qui est un rectangle 8 fois plus large que haut, on utilise l'icône  pour définir une exagération d'un facteur 3 de la coordonnée « y » qui représente l'altitude. La Figure 81 présente le champ de teneur en eau ainsi que la limite de saturation définie par l'isovaleur de pression nulle. Dans la partie gauche de la couche intermédiaire (semi-perméable), on remarque que la « surface libre » est inversée, puisque

la saturation est plus faible (couleur verte) au-dessus de la surface libre qu'en dessous (couleur bleue). La Figure 82 présente le champ de la charge hydraulique qui montre un écoulement quasi horizontal dans les couches n°1 et n°3, et relativement vertical dans la couche moins perméable.

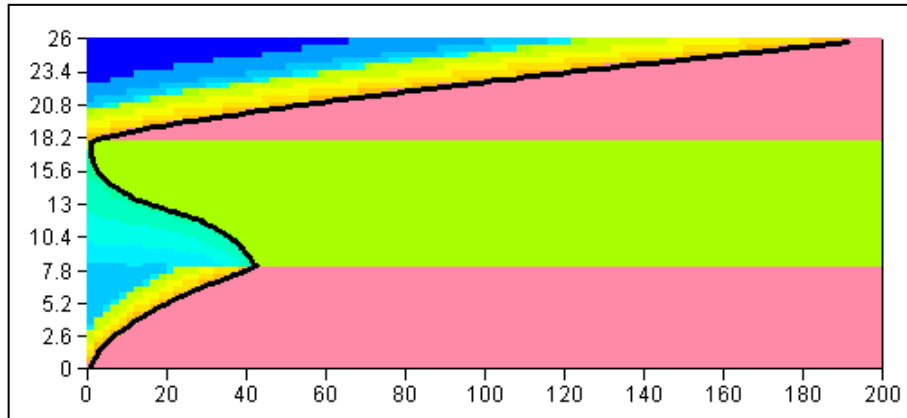


Figure 81 – Teneur en eau. La ligne noire représente la limite de pression nulle, donc la surface libre.

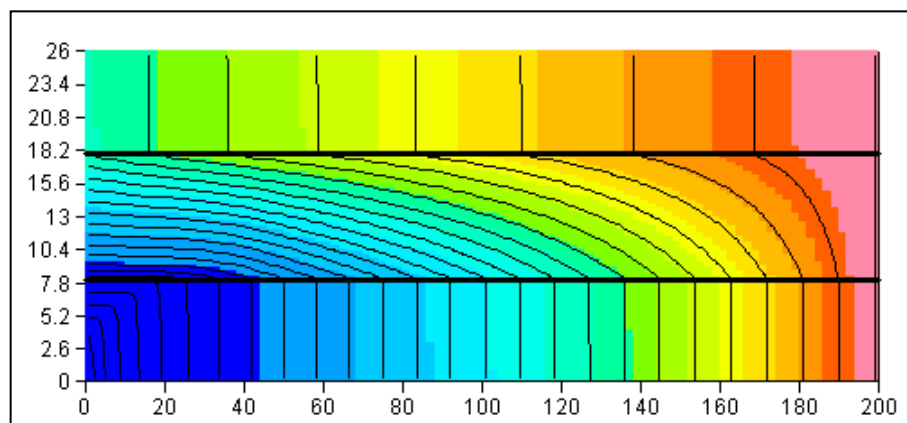


Figure 82 – Champ de la charge hydraulique et isovaleurs tous les 1 m de charge.

19. Exemple n°9 : Aquifère côtier avec intrusion saline

Cet exemple, montre comment réaliser un calcul en multiphasique pour prendre en compte un biseau salé dans une île située en mer. Le calcul est réalisé en triphasique car il y a 3 phases immiscibles : l'air (quand la nappe est libre), l'eau douce, et l'eau salée qui joue ici le rôle de phase non aqueuse. L'intérêt de l'approche multiphasique est de permettre, dans les cas simples, une simulation monocouche, alors qu'une approche avec « effets densitaires » nécessiterait obligatoirement une simulation 3D ou multicouche beaucoup plus lourde. En revanche, l'approche multiphasique considère une interface abrupte entre l'eau douce et l'eau salée, sans zone de mélange.

Cet exemple est librement inspiré de l'île de Marie Galante (Guadeloupe). Il s'agit d'une île schématisée par un carré de 14 km de côté (Figure 83). Le domaine comporte deux zones : la première zone est formée des bandes de 3 km de large le long des 4 côtés, la seconde est formée du carré de 8 km de côté restant. La seconde zone (la zone centrale) est moins perméable et reçoit davantage de recharge. Un premier calcul, qui comporte un champ captant est réalisé en régime permanent. Un deuxième calcul, réalisé en régime transitoire, montre l'influence d'une réduction importante de la recharge.

Les caractéristiques du système sont les suivantes :

Densité :

- Densité de l'eau salée = 1.025

Géométrie :

- L'île est formée d'un carré de 14 km de côté
- La zone n°2 est formée du carré de 8 km de côté au centre du domaine
- La zone n°1 est formée de la « couronne » restante de 3 km de large
- Altitude du substratum = -100 m
- Altitude topographique = 50 m (la nappe est libre).

État initial :

- Charge d'eau douce uniforme dans tout le domaine = 2 m (sauf sur les 4 côtés)
- Charge d'eau salée équilibrée selon le schéma de Ghyben-Herzberg, donc à la valeur : $-2 \text{ m} / (1.025 - 1) = -80 \text{ m}$

Conditions aux limites :

- Les 4 côtés de l'île sont en contact avec la mer :
 - Charge d'eau douce imposée = 0 m

- Charge d'eau salée imposée = 0 m

Paramètres hydrodynamiques :

- Perméabilité = $16 \cdot 10^{-5}$ m/s dans la zone n°1 ; $8 \cdot 10^{-5}$ m/s dans la zone n°2
- Coefficient d'emmagasinement spécifique = $1 \cdot 10^{-4}$ m⁻¹.
- Porosité = 10 %
- (Pour les calculs multiphasiques, comme pour les calculs en zone non saturée, il n'y a pas de coefficient d'emmagasinement en nappe libre à définir. C'est la porosité qui est utilisée)

Maillage :

- Maillage grossier : 28 lignes et 28 colonnes de mailles carrées 0.5 km de côté.
- Maillage plus fin : 112 lignes et 112 colonnes de mailles carrées de 125 m de côté.

19.1. CALCUL EN RÉGIME PERMANENT

Pour ce calcul en régime permanent on a supposé les valeurs suivantes de la recharge par les précipitations et des pompages :

- Recharge : 4.2 mm/an dans la zone n°1 et 90 mm/an dans la zone n°2
- Quatre pompages à l'abscisse $x = -312.5$ m. Les débits pompés sont respectivement :
 - $35 \text{ m}^3/\text{h}$ aux ordonnées -312.5 m et $+312.5$ m
 - $50 \text{ m}^3/\text{h}$ aux ordonnées -812.5 m et $+812.5$ m

Les coordonnées sont données par rapport au centre de l'île.

Compte tenu du caractère non linéaire du système on fixe un nombre maximal d'itérations externes égal à 50, et un coefficient de sous-relaxation égal à 0.7.

Paragraphe « Contrôle de la Résolution Hydrodynamique »

<code>50</code> = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)
<code>1e-7</code> = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour Convergence
<code>0.7</code> = Coefficient de Relaxation des calculs [Déf=1]
<code>Perman</code> = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe : « Unités des données » :

1e-5 = Unité de Perméabilité des Aquifères en m/s (ou m2)
m3/h = Unité de Débit en m3/s (kg/s si Gaz)
année = Unité de Durée Hydroclimatique (sec,min,heu, jou, déca, moi, ann)
ann = Unité de Temps (des Pas de modèle) (sec,min,heu, jou, déca, moi, ann)
km = Unité de Coordonnée Horizontale des mailles en m
Spécif = Emmag. Captifs lus (0=Hydrogéol. ; 1=Spécifiques ; 2=Compressibil.)
% = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-] [% si en %]

Paragraphe : « Eau, Gaz, Huile, Eau Salée » :

2 = Calcul de la Phase Huile, Eau Salée (NAQ) [0=Non 1=Oui 2=Eau Salée]

Paragraphe : « Écoulement d'Huile, Eau Salée, NAQ » :

1.025 = Densité de l'Huile, Eau Salée, NAQ [Défaut=1]

Grandeurs utilisées :

- « CHARGE » = Charge de l'eau douce.
- « CHARGE_HUILE » = Charge de l'eau salée.
- « DEBIT » = Débit de l'eau douce. Valeur = 9999 : impose la charge de l'eau douce.
- « DEBIT_HUILE » = Débit de l'eau salée. Valeur = 9999 impose la charge de l'eau salée.
- « SATURAT » = Teneur en eau douce.
= Porosité x Épaisseur_Douce / Épaisseur_Aquifère.
- « SATUR_NAQ » = Teneur en eau salée.
= Porosité x Épaisseur_Salée / Épaisseur_Aquifère.
- « SATUR_LIQ » = Teneur en liquide.
= Porosité x Épaisseur_Liquide / Épaisseur_Aquifère.
- « INTERFACE » = Altitude de l'interface (9999 là où il n'est pas présent)

19.2. RÉSULTAT DU CALCUL EN RÉGIME PERMANENT

Les calculs avec le maillage fin s'effectuent en une fraction de seconde et convergent parfaitement. Pour visualiser les résultats, on a demandé, dans le fichier [.past] la sauvegarde sur fichier des champs calculés de « CHARGE », « SATURAT », « INTERFACE ». La Figure 83 présente la charge d'eau douce calculée (de 0 à 2.8 m) et l'altitude de l'interface. La couleur grise correspond aux régions dans lesquelles il n'y a pas d'eau salée. On voit nettement le biseau qui s'étend sur une couronne de 5 km environ, et

est repoussé au centre par la recharge. À proximité des forages, la nappe est déprimée et l'eau salée est attirée vers les pompages (Figure 84).

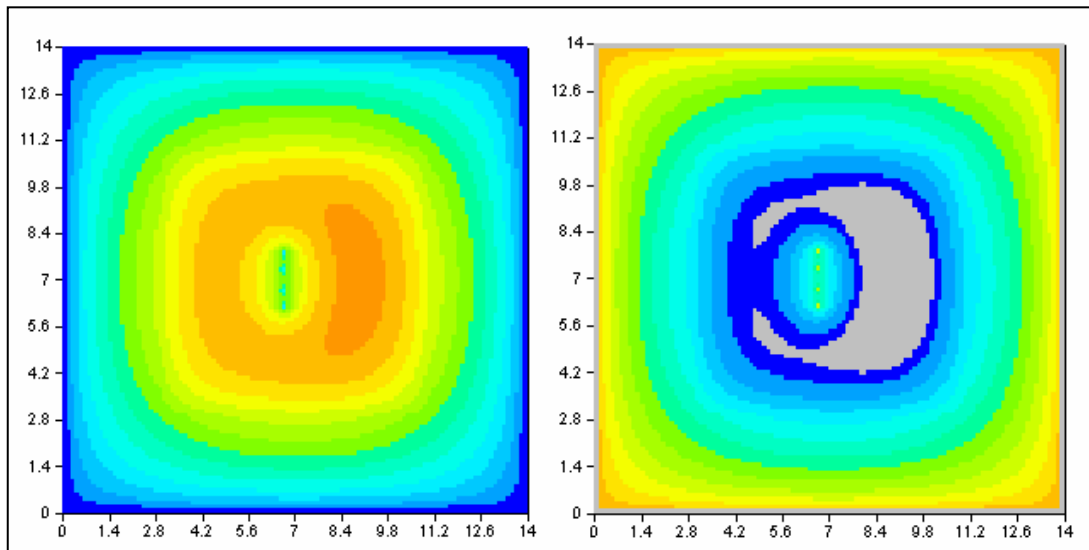


Figure 83 – À gauche : charge d'eau douce. À droite : altitude de l'interface salée.

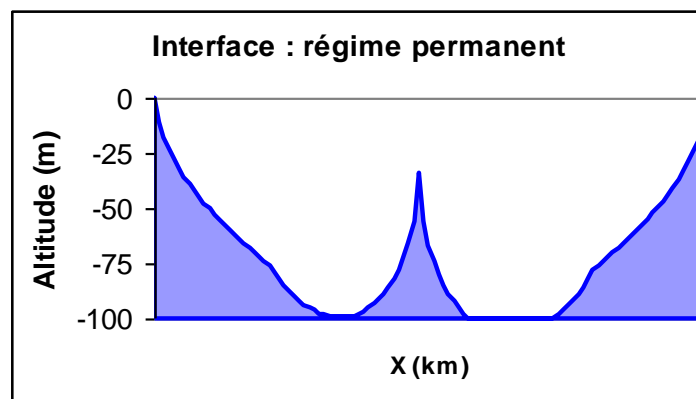


Figure 84 – Vue en coupe Ouest-Est de l'altitude de l'interface d'eau salée (ordonnée = 0 km).

19.3. CALCUL EN RÉGIME TRANSITOIRE

Pour ce calcul en régime transitoire, on suppose qu'il n'y a pas de pompages.

Les valeurs de recharge en régime permanent sont initialement de :

- 9 mm/an dans la zone n°1 et 200 mm/an dans la zone n°2

Puis, pour le régime transitoire on suppose que la recharge est (instantanément) réduite de 70 %, soit les valeurs suivantes :

- 2.7 mm/an dans la zone n°1 et 60 mm/an dans la zone n°2

Les paramètres de calcul sont les suivants (les paragraphes identiques au régime permanent ne sont pas répétés ici) :

Paragraphe « Contrôle de la Résolution Hydrodynamique »

75 = Nombre Maxi d'itérations par pas de temps calcul suivant le pas n°0
 50 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)
 1e-7 = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour Convergence
 0.3 = Coefficient de Relaxation des calculs [Déf=1]
 Transit = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe : « Prise en compte de la Zone Non-Saturée » :

2 = Durée minimale du pas de temps de calcul interne
 25 = Durée maximale du pas de temps de calcul interne
 10 = Variation Maximale de Teneur en Eau pendant le Pas de temps de calcul
 1 = Erreur maximale de Bilan acceptée [en %]
 0 = Type d'Erreur Bilan [0=% CVG_Int ; 1=Bil Glob Stock ; 2=Bilan Glob %]

Les calculs avec le maillage fin s'effectuent en quelques minutes et convergent bien (bilan cumulé équilibré à moins d'1/10 %). Les calculs avec le maillage grossier convergent en quelques secondes et donnent sensiblement les mêmes résultats. La Figure 85 montre l'interface salée calculée en début de calcul, puis après respectivement 50 ans et 300 ans. On voit que la réduction de recharge permet au biseau salé de s'étendre considérablement, passant de 1.6 km de large à 3.8 km après 300 ans. La charge hydraulique maximale passe de +6.97 m à +2.98 m en fin de simulation. Le calcul montre cependant que les réactions du biseau sont très lentes. Si le substratum était plus profond, ou bien si la recharge était encore plus faible, on observerait une lentille d'eau douce flottant sur l'eau salée.

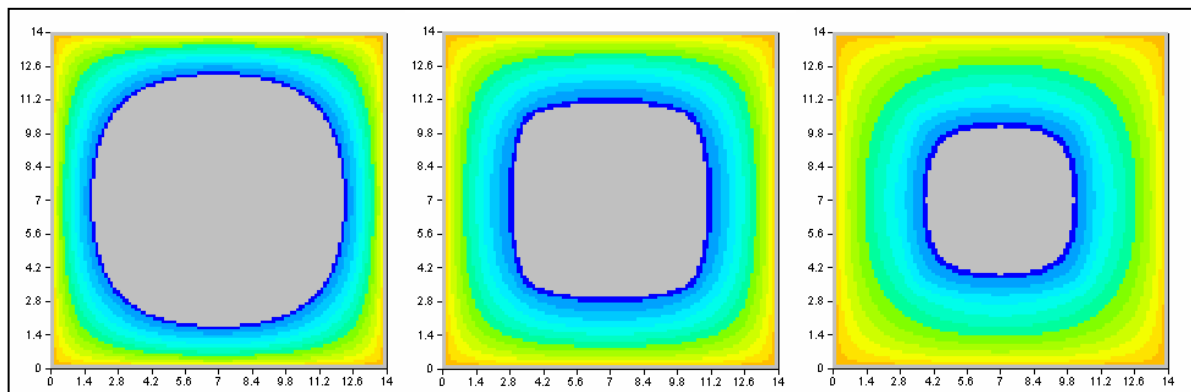


Figure 85 – Altitude de l'interface eau douce-eau salée à $t=0$, $t=50$ ans et $t=300$ ans.

20. Exemple n°10 : Hydrosystème multicouche avec rivières

Cet exemple, montre comment réaliser la simulation d'un système multicouche avec un réseau hydrographique formé de plusieurs affluents de rivières. On commence par une modélisation avec une altitude d'eau dans la rivière fixée. Dans une deuxième phase, l'altitude de l'eau dans la rivière est liée au débit de rivière par la formule de Manning-Strickler. La simulation du niveau, et du débit de nappe et de rivières est d'abord réalisée en régime permanent, puis en régime transitoire pour prendre en compte la propagation de crue résultant d'un fort événement de pluie. Dans une troisième phase, on modélise le transport couplé dans la nappe et le réseau hydrographique pour simuler les conséquences d'une injection de polluant dans un tronçon de rivière.

Les caractéristiques du système sont les suivantes :

Géométrie :

- Le système modélisé est formé de 3 couches aquifères.
- La couche n°1 affleure au Nord, la couche n°2 affleure dans la partie centrale et la couche n°3 affleure au Sud (Figure 86 et Figure 87).
- En plan l'hydrosystème a la forme d'un rectangle de 102 km dans la direction Ouest-Est (de l'abscisse -51 à +51) sur 300 km dans la direction Sud-Nord (de l'ordonnée 0 à 300).
- L'épaisseur totale de l'aquifère est de 200 m (de l'altitude -100 à +100 m).
- Le substratum de la couche n°1, quand elle existe, est à l'altitude -33.33 m, celui de la couche n°2, quand elle existe, est à l'altitude -66.66 m et celui de la couche n°3 est à l'altitude -100 m.
- L'altitude topographique est uniforme, à la valeur +100 m.

Conditions à la limite :

- La seule condition à la limite est une charge imposée égale à 0 m dans la maille la plus aval, c'est-à-dire dans la 3^{ème} couche, au point de coordonnées $x = -2$ km, $y = +1$ km.

Paramètres hydrodynamiques :

- Perméabilité des aquifères = 10^{-4} m/s à 10^{-3} m/s selon les simulations.
- Coefficient d'emmagasinement spécifique = $1 \cdot 10^{-5} \text{ m}^{-1}$.
- Coefficient d'emmagasinement libre = 5 %
- Porosité = 5 %

Réseau hydrographique :

- Le réseau hydrographique est constitué de 6 affluents numérotés 10, 20, 30, 40, 50 et 60. L'écoulement est globalement dans la direction Nord-Sud (Figure 88).
- Les coordonnées des extrémités des affluents sont données dans le Tableau 4.
 - Largeurs des cours d'eau : elles sont données dans le Tableau 4.
 - Altitude de l'altitude du fond du lit = 0 m.
 - Altitude (initiale) de l'eau dans la rivière = 4 m.
 - Épaisseur du lit et des berges = 0.1 m
 - Perméabilité du lit et des berges = 10^{-6} m/s
 - Rugosité du lit (« n » de Manning-Strickler) = 0.04
 - Pente du lit (pour Manning-Strickler) = 10^{-4} .
- Trois zones de sol sont définies : la zone n°5 dans le tiers supérieur (ordonnées de 200 à 300 km), la zone n°10 au milieu (ordonnées de 100 à 200 km) et la zone n°15 dans le tiers inférieur (ordonnées de 0 à 100 km).

Maillage :

- On choisit un maillage régulier avec 51 colonnes de 2 km de largeur et 150 lignes de 2 km de hauteur.
- Trois couches d'épaisseurs variables.

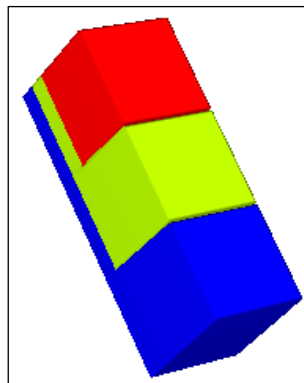


Figure 86 – Hydrosystème multicouche avec rivières.

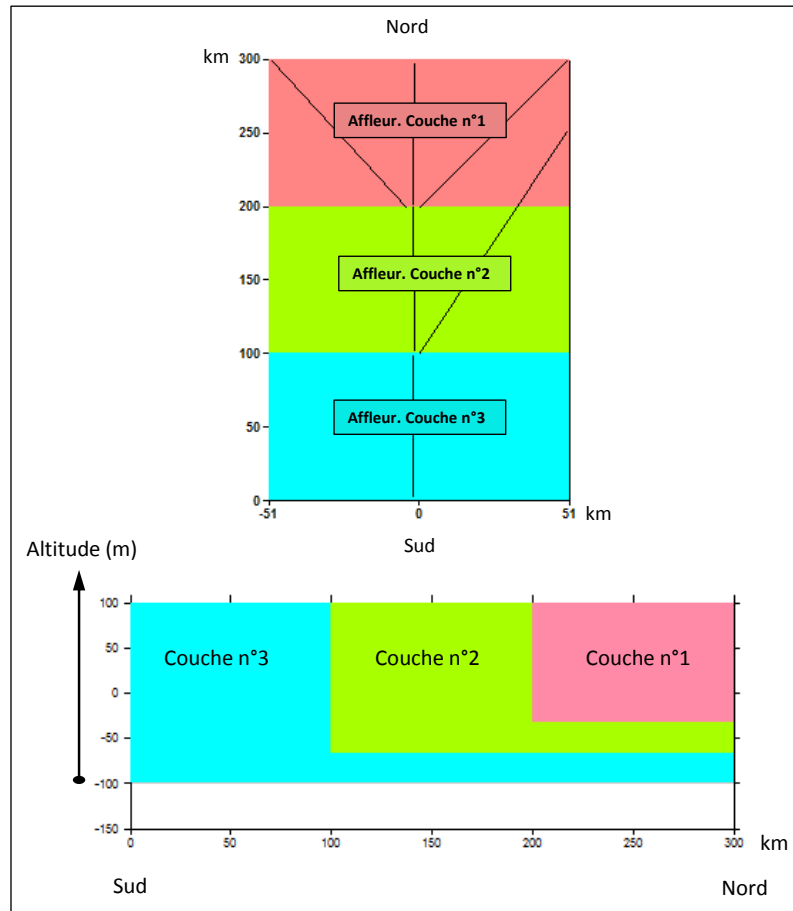


Figure 87 – Géométrie de l'hydrosystème multicouche avec rivières.
 En haut : vue en plan ; en bas : vue en coupe verticale.

N° Affluent :	10		20		30		40		50		60	
Départ (km)	-2	297	-2	199	-2	99	50	299	-50	299	50	251
Arrivée (km)	-2	201	-2	101	-2	3	0	199	-4	199	0	99
Largeur (m)	50		100		100		50		50		50	

Tableau 4 – Coordonnées en km des extrémités des 6 affluents, et largeurs en m.

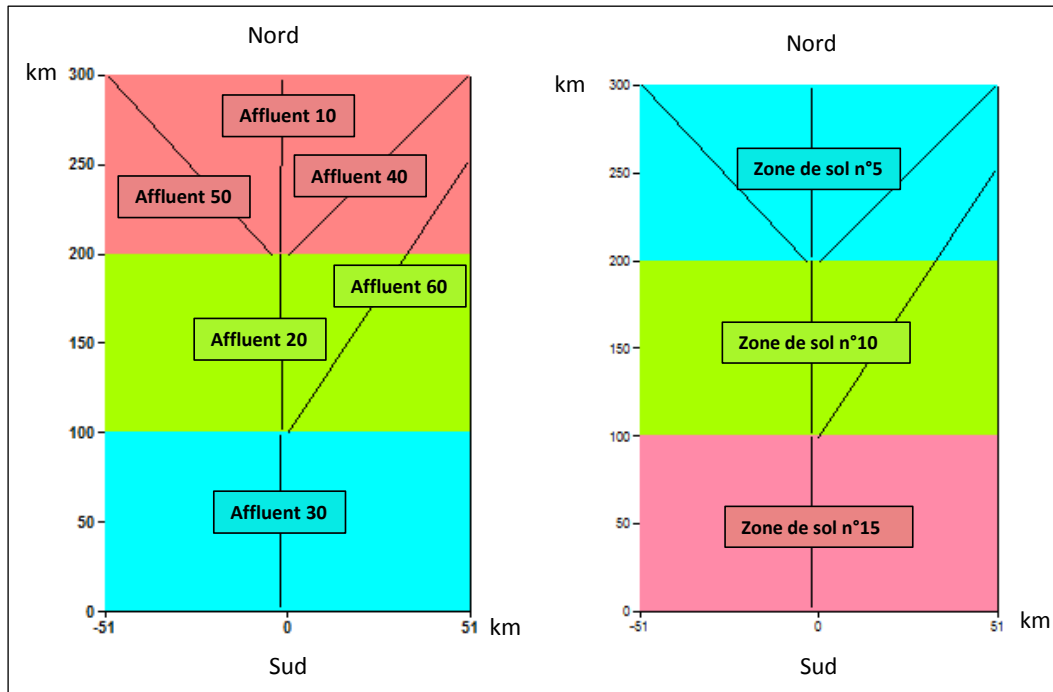



Figure 88 – Description du réseau hydrographique et des zones de sol.

20.1. CRÉATION DU MAILLAGE

- Titre du projet : **Didact_Riv_3D** ;
- Coin Sud-Ouest : $X = -51$; $Y = 0$; (km)
- Coin Nord-Est : $X = +51$; $Y = 300$; (km)
- Largeur des colonnes = **2** ; Hauteur des lignes = **2** ; (km)
- Nombre de couches = **3** ;
- Valeur de perméabilité par défaut = **1** ;
- Altitude topographique = **100** ; (m)
- Épaisseur (de chaque couche) = **60**. (m)

Pour avoir une représentation plus agréable, avec un rectangle un peu moins allongé, on utilise l'icône  « Distorsion Y / X pour vues en plan » et on fixe un facteur égal à 0.5.

On sélectionne alors le champ du substratum et on lui affecte les valeurs d'altitude suivantes :

- Couche n°1 : **-33.33** ; Couche n°2 : **-66.66** ; Couche n°3 : **-100**.

Définition de l'extension des couches n°1 et n°2 :

Bien qu'il eût été plus pratique de définir plus tard ces extensions de couches, on le fait ici car c'est plus didactique.

Pour faire affleurer la couche n°2 et la couche n°3 là où elles doivent affleurer, on procède de la manière suivante :


- On sélectionne le champ de la perméabilité.
- Couche n°1 : on sélectionne les lignes des 2/3 inférieur du domaine (lignes 51 à 150) et on leur affecte une valeur de perméabilité égale à 0.
- Couche n°2 : on sélectionne les lignes du 1/3 inférieur du domaine (lignes 101 à 150) et on leur affecte une valeur de perméabilité égale à 0.

20.2. DÉFINITION DU RÉSEAU HYDROGRAPHIQUE

Définition des numéros d'affluent :


On crée le nouveau champ « **Numéros d’Affluent rivières** » dans le thème « Réseau hydrographique, Drains, Lacs » et on se place sur la couche n°1 car le réseau hydrographique est défini dans la couche de surface, c’est-à-dire la couche n°1.

Pour voir apparaître toutes les mailles de cette couche, y compris les mailles non aquifères, c’est-à-dire ayant une perméabilité égale à 0, on choisit l’option « **Mailles de l’extension globale du modèle** » (ou « Toutes les mailles de la couche ») dans le menu « Vue ».


On sélectionne alors l’icône  « Créer une courbe (ouverte) ». On dessine alors successivement les affluents :


- Affluent n°10 : du point (x=-2, y=297) au point (x=-2, y=201), c’est-à-dire de (col. = 25, ligne = 2) à (col. = 25, ligne = 50).
- Affluent n°20 : du point (col. = 25, ligne = 51) au point (col. = 25, ligne = 100).
- Affluent n°30 : du point (col. = 25, ligne = 101) au point (col. = 25, ligne = 149).
- Affluent n°40 : du point (col. = 51, ligne = 1) au point (col. = 26, ligne = 51).
- Affluent n°50 : du point (col. = 1, ligne = 1) au point (col. = 24, ligne = 51).
- Affluent n°60 : du point (col. = 51, ligne = 25) au point (col. = 26, ligne = 101).

Pour faire ce dessin, le plus simple est de sélectionner auparavant les points de début et de fin. Ils apparaissent en rouge et il est facile de tracer le segment. Pour chaque affluent, on clique sur le point du début, puis on double-clique sur le point de fin. On voit alors se dessiner un trait représentant l’affluent. On donne alors successivement comme nom de polygone « Affluent_10 », puis « Affluent_20 », etc.


Le dessin apparaît dans la couche graphique de nom « Dessin » dans le menu de « Gestion des polygones », auquel on accède par l’icône .

On souhaite conserver le dessin des affluents pour les visualiser ultérieurement. Dans ce but, dans ce menu « Gestion des polygones », à droite du polygone « dessin », on appuie sur le bouton « Enregistrer » et on mémorise ces dessins d’affluents dans un fichier de nom « Didact_Riv_3D_Rivieres.blh ».

Avant de commencer, on désélectionne toutes les mailles qui pouvaient avoir été sélectionnées auparavant en cliquant sur l'icône .

Pour affecter les numéros d'affluents, on utilise l'icône  « Sélection des mailles sur une courbe ». On clique sur le dessin d'un affluent (ou à proximité immédiate du dessin). On commence par exemple par l'affluent n°10. Toutes les mailles traversées par cet affluent sont sélectionnées. On leur affecte la valeur 10.


On fait la même opération avec l'affluent n°20, mais les mailles de la couche n°1 qui sont traversées par cet affluent n°20 ne se sélectionnent pas, car ce ne sont pas des mailles aquifères. En effet, c'est la couche n°2 qui affleure dans cette zone.

Il faut donc « donner accès aux mailles extérieures au domaine (aquifère) » en cliquant sur l'icône , située sur la barre d'outils de droite. On peut maintenant sélectionner les mailles traversées par l'affluent n°20. On procède de la même manière pour les affluents n°30 à n°60.

Définition des numéros de tronçon :

Les « numéros de tronçon » sont des numéros d'ordre de parcours dans un affluent. Ces numéros d'ordre doivent être croissants, dans chaque affluent, depuis son extrémité amont jusqu'à son extrémité aval.


On crée le nouveau champ « **Numéros de Tronçon rivières** », dans le thème « Réseau hydrographique, Drains, Lacs » et on se place sur la couche n°1.

Pour affecter les numéros d'affluents, on utilise l'icône  « Interpole ou numérote des valeurs le long d'une courbe », située sur la barre d'outils du haut. On clique sur le dessin d'un affluent qui se dessine alors en rouge. On choisit alors « Numérotation » puis l'« **incrément de numérotation** », c'est-à-dire le « pas » de numérotation. Par défaut, la valeur de l'incrément est égale à 1, mais on peut choisir 2 par exemple, pour le cas où on voudrait ajouter ultérieurement des points intermédiaires. On choisit « Numéroté à partir du Premier point » puisqu'on voit que les coordonnées affichées sont bien les coordonnées du tronçon amont (sinon on aurait choisi « Dernier point »). On clique « OK » et les mailles situées sur l'affluent choisi sont sélectionnées et sont numérotées automatiquement. Par exemple pour l'affluent n°10, les numéros vont de 1 à 97 de 2 en 2. On fait la même opération successivement pour tous les affluents.

On n'oublie pas de sauvegarder régulièrement le travail.

Définition de l'arbre de branchement des affluents.

Le branchement des affluents est défini par l'« Arbre de branchement des affluents de rivières ». Pour chaque affluent on donne le numéro, unique, de l'affluent qui est situé à son aval. Par convention quand un affluent n'a pas d'aval, c'est-à-dire quand il constitue un exutoire, on définit que son affluent aval est l'affluent n°0.

Pour créer l'arbre de branchement, on utilise l'icône , pour accéder au menu des « Paramètres non maillés ». On sélectionne alors « Arbre de branchement des affluents de rivière » (Figure 89).

On clique sur « Préprocesseur » puis « Créer un nouveau fichier « Arbre affluents Rivières/Lacs ». On définit alors, Figure 90, les numéros aval des 6 affluents.

On sauvegarde alors ce fichier sous le nom « Didact_Riv_3D.arb_r »

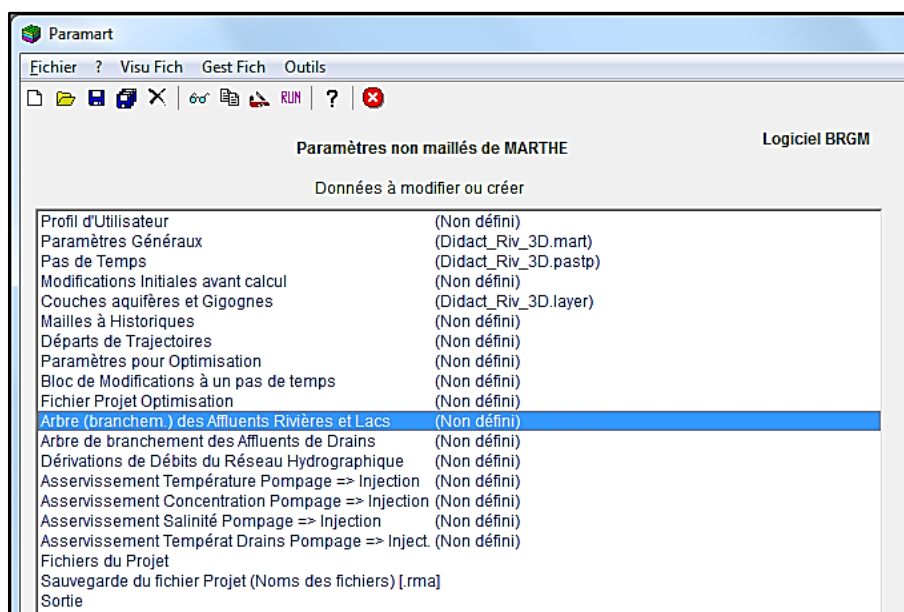
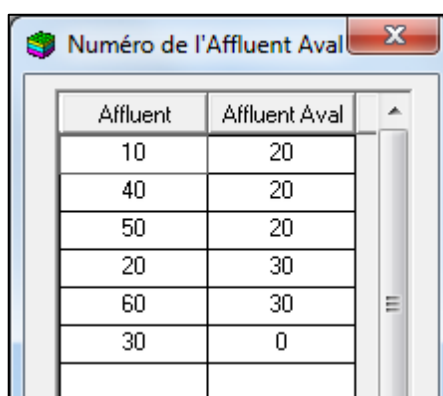


Figure 89 – Création d'un fichier d'arbre de branchement des affluents de rivière.



Affluent	Affluent Aval
10	20
40	20
50	20
20	30
60	30
30	0

Figure 90 – Définition de l'arbre de branchement des affluents de rivière.

Définition du profil d'utilisation.

Comme, après une première simulation en régime permanent, on va réaliser ultérieurement des simulations en régime transitoire, avec transport de masse, on définit un « Profil d'utilisation » en sélectionnant, c'est-à-dire en donnant la valeur « 1 », aux options suivantes :

- 1 = Régime Transitoire.
- 1 = Transport de masse classique.
- 1 = Rivières, Drains, Lacs (1=Rivières et Lacs ; 2=Drains ; 3=tous les 3).

Et on sauvegarde ce profil sous le nom « Didact_Riv_3D.prfu »

Après avoir sauvegardé le projet on retourne dans WinMarthe *sensu stricto*.

20.3. DÉFINITION DES AUTRES CHAMPS

Définition des « Zones de sol » :

Les « Zones de sol » sont des zones dans lesquelles les paramètres hydrologiques (« réserve utile du sol », « temps de percolation », etc.) sont uniformes. On peut également, dans les cas simples, les utiliser pour y introduire des flux de pluie ou des flux d'infiltration.

On a vu que dans notre exemple il faut affecter le numéro de zone 5 dans les lignes n°1 à n°50, le numéro 10 dans les lignes n°51 à n°100 et le numéro 15 dans les lignes n°101 à n°150.

Dans WinMarthe on crée le nouveau champ « **Zones de sol** » et on se place dans la couche n°1 car les données de sol, comme les données de topographie ou de réseau hydrographique, sont définies dans la couche de surface, c'est-à-dire la couche n°1.

On vérifie que l'option « **Mailles de l'extension globale du modèle** » est bien sélectionnée dans le menu « Vue », et que l'icône « **Donner accès aux mailles extérieures au domaine (aquifère)** » est bien activée.


On sélectionne alors, avec le rectangle élastique, les lignes n°1 à n°50 et on affecte la valeur 5 aux mailles sélectionnées. De la même manière on affecte la valeur 10 aux lignes n°51 à n°100 et la valeur 15 aux lignes n°101 à n°150.

Définition de « Zones géométriques » :

Pour affecter facilement les valeurs de perméabilité, on définit des numéros de « Zones de géométrie » égales aux numéros de couche des mailles aquifères.

Dans ce but on crée le nouveau champ de « Zones géométriques ».

On retire l' « **Accès aux mailles extérieures au domaine (aquifère)** » en cliquant sur l'icône correspondante.

On sélectionne alors les mailles de la couche n°1, par l'icône , et on leur affecte la valeur 1, puis les mailles de la couche n°2, et on leur affecte la valeur 2, et enfin les mailles de la couche n°3, et on leur affecte la valeur 3.

Définition de la maille à charge hydraulique imposée


La charge est imposée à 0 mètres dans la maille la plus aval, c'est-à-dire dans la 3^{ème} couche, au point de coordonnées $x = -2$ km, $y = +1$ km. On sélectionne le champ « Débit d'eau » puis on choisit l'option « Aller à x/y/couche », dans le menu « Outils ». On

donne les coordonnées $x = -2$, $y = 1$ et couche = 3, et on arrive à la maille correspondante dans laquelle on fixe une valeur de débit égale à 9999 pour imposer la charge hydraulique.

20.4. SIMULATION EN RÉGIME PERMANENT

On réalise un premier calcul en régime permanent, d'abord avec des altitudes de l'eau permanentes dans la rivière, puis avec la formule de Manning-Strickler reliant le niveau d'eau dans la rivière à son débit. Pour ce régime permanent on considère un flux d'infiltration égal à 20 mm/mois (c'est-à-dire 240 mm/an).

Définition des paramètres généraux.

Par l'icône , on accède au menu des « Paramètres non maillés ». On sélectionne alors « Paramètres généraux » et on crée un nouveau fichier.

Paragraphe : Contrôle de la Résolution Hydrodynamique :

<p>0 = Nombre maxi d'itérations par pas de temps calcul suivant le pas n°0</p> <p>50 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)</p> <p>20 = Nombre d'Itérations Internes pour le solveur [Déf=10]</p> <p>Perman = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]</p>

Paragraphe : Unités des données :

<p>= Unité de Hauteur Hydroclimat. (Pluie, ETP, Infilt., Rechar.) en mm</p> <p>Mois = Unité de Durée Hydroclimatique (sec, min, heu, jou, déca, moi, ann)</p> <p>km = Unité de Coordonnée Horizontale des mailles en m</p> <p>= Unité de Débit de Rivière (Déf = Unité générale de débit)</p>

Paragraphe : Réseau Hydrographique, Drains, Lacs :

<p>1 = Couplage avec un Réseau Hydrographique [0=Non ; 1=Oui]</p> <p>15 = Nombre maximal d'itérations pour le calcul des Débits de Rivières</p>

Les champs qui sont uniformes, ou uniformes par zone ou par affluent, vont être définis simplement par le préprocesseur dans le paragraphe « Initialisation avant calcul » :

- Perméabilité de l'aquifère : 10^{-4} m/s dans les zones n°1 à n°3, c'est-à-dire dans les mailles aquifères des couches n°1 à n°3.
- Longueur de tronçon de rivière = 2 km dans tout le domaine. (Ça ne pose pas de problème de définir des longueurs là où il n'y a pas de rivières. Ces données seront ignorées).
- Largeurs de tronçons de rivières 50 m dans les affluents n°10, 40, 50 et 60 et largeur de 100 m dans les tronçons n°20 et n°30. Attention : les largeurs, comme les longueurs, sont en unité de coordonnées horizontales de mailles, donc ici en km. On donne donc respectivement les largeurs 0.05 et 0.1 km.
- Altitude absolue de l'eau dans les tronçons de rivière : 4 mètres dans tous les tronçons (« T = * ») des affluents n°1 à n°60 « A = 1:60 »)
- Altitude absolue du fond de la rivière : 0 m dans tous les tronçons.
- Épaisseur du lit : 0.1 mètre dans tous les tronçons.
- Perméabilité du lit et des berges de rivière : 10^{-6} m/s dans tous les tronçons.

Paragraphe : Initialisation avant calculs :

/PERMEAB/ZONE_GEO	Z=	1:3	V=	1e-4;
/LONG_RIVI/GRILLE	N:	=2		
/LARG_RIVI/TRONCON	A=	10T=	*V=	5e-2;
/LARG_RIVI/TRONCON	A=	40T=	*V=	5e-2;
/LARG_RIVI/TRONCON	A=	50T=	*V=	5e-2;
/LARG_RIVI/TRONCON	A=	60T=	*V=	5e-2;
/LARG_RIVI/TRONCON	A=	20T=	*V=	0.1;
/LARG_RIVI/TRONCON	A=	30T=	*V=	0.1;
/HAUTEU_RIVI/TRONCON	A=	1:60	T=	*V= 4;
/FOND_RIVI/TRONCON	A=	1:60	T=	*V= 0;
/EPAI_LIT_RIV/GRILLE	N:	=0.1		
/PERM_LIT_RIVI/GRILLE	N:	=1e-6		

Définition du flux d'infiltration et des champs à sauvegarder.

Après avoir sauvegardé le fichier des « Paramètres généraux », on sélectionne « Pas de temps » et on crée un nouveau fichier. Avec le préprocesseur on définit alors uniquement le pas de temps n°0, c'est-à-dire le régime permanent.

On définit un flux d'infiltration de 20 mm/mois dans toutes les « zones climatiques ». Le flux est bien en mm/mois puisque, dans le paragraphe « Unités des données » du fichier des « paramètres généraux », l'unité de hauteurs hydroclimatiques est bien restée par défaut en mm, et l'unité de durées hydroclimatiques a été fixée à « Mois ».

Les « zones climatiques » sont par défaut les « zones de sol », puisque dans le paragraphe « Hydroclimatologie » du fichier des « paramètres généraux » on a laissé par défaut à 0 la ligne :

« 0=Type de Zones pour les Pluie, ETP, Rechar., [0=Zones de Sol ; 1=Zones Météo] ».

On demande en fin de calcul la sauvegarde :

- Du champ de la charge hydraulique calculée
- Du champ du débit d'aquifère aux limites
- Du champ du débit de rivière

```
*** Début de la simulation à la date : 0; ***
/FLUX_INFILTR/ZONE_CLIM Z= *V= 20;
/CHARGE/EDITION I= 1;
/DEBIT_LIMITES/EDITION I= 1;
/DEBIT_RIVI/EDITION I= 1;L= 0;F= 0;B= 0;
/*****/*****/ Fin de ce pas
```

Lancement des calculs.

On lance alors les calculs qui se terminent en quelques secondes.

Le réseau hydrographique est décrit dans le fichier « reseau_hydrog.txt ». Ce fichier contient davantage de détails si on a demandé l'« Écriture sur listing de toutes les données ». C'est ce fichier qu'il faut examiner si des erreurs dans le réseau hydrographique ont été détectées.

Résultats de la simulation en régime permanent à niveau d'eau fixe dans la rivière.

Le fichier « bilandeb.txt » montre que les calculs ont parfaitement convergé.

Bilans des débits des aquifères (en unité de débit, c'est-à-dire ici en m³/s) :

- Bilan (aquifères) en unité de Débit : Pas de temps n°0 - t= 0.000 -----			
Débits Sortant /Charges Imposées =			-0.6816
Débit de Recharge/Évaporation =	232.717		
Débit de Débordement/Suintement =			-85.120
Débits Rivière -> Nappe =	0.000		-146.916 (-146.916)
<hr/>			
d'où une convergence interne à	:	3.462E-08 %	d'erreur

La recharge est égale à 232.7 m³/s (77.6 m³/s sur chaque couche), dont 85.1 m³/s débordent et ruissellent vers le réseau hydrographique et 146.9 m³/s sont drainés par les rivières. Il reste 0.7 m³/s qui s'écoulent à l'aval de la nappe, par la maille à charge imposée.

Bilans des débits du réseau hydrographique (en unité de débit) :

Bilan réseau Hydrographique en unité de débit : Pas de temps n°0 - t= 0.00			
	Entrant	Sortant	Net
Venant de la Nappe =	146.916	0.000	146.916
Débordement Nappe =	85.120		
Exutoire =		-232.036	
<hr/>			
Écart de bilan global =	5.144E-07	(Bilan entrées/sorties)	

20.5. SIMULATION EN RÉGIME PERMANENT AVEC UNE LOI HAUTEUR – DÉBIT SELON LA FORMULE DE MANNING-STRICKLER

Pour prendre en compte une loi hauteur-débit selon la formule de Manning-Strickler, les ajouts sont les suivants :

Paragraphe : **Réseau Hydrographique, Drains, Lacs** :

1	=	Couplage avec un Réseau Hydrographique [0=Non ; 1=Oui]
15	=	Nombre maximal d'itérations pour le calcul des Débits de Rivières
1	=	Loi Hauteur(Débit) Rivière [0=Non ; 1=Manning_Large ; 2=Manning]
0.3	=	Coefficient de sous-Relaxation pour les Débits de Rivières [Déf=1]

On sélectionne une « Loi Hauteur-Débit » et suite à un premier calcul qui ne converge pas, compte tenu des non-linéarités, on introduit un coefficient de sous-relaxation égal à 0.3.

Paragraphe : **Initialisation avant calculs** :

On introduit une rugosité (paramètre « n » de Manning) égale à 0.04 dans tous les tronçons de tous les affluents, et une pente du lit de la rivière égale à 5 10⁻⁴.

/RUGOS_RIVI/TRONCON	A=	1:60	T=	*V=	4e-2;
/PENDE_RIVI/TRONCON	A=	1:60	T=	*V=	5e-4;

Pour obtenir l'altitude de l'eau et la profondeur d'eau calculée dans les tronçons de rivière, on ajoute dans le fichier des « Pas de temps » :

/HAUTEU_RIVI/EDITION	I= 1;P= 1;
----------------------	------------

Lancement des calculs.

On lance alors les calculs qui se terminent en quelques secondes. On vérifie, dans le fichier « bilandeb.txt » qu'ils ont parfaitement convergé.

Résultats de la simulation en régime permanent avec une loi hauteur-débit selon la formule de Manning-Strickler.

Les bilans d'eau sont quasi inchangés. La Figure 91 montre le champ de la charge hydraulique calculée. Le champ du niveau d'eau calculé est également écrit dans le fichier « chasim.out ». La visualisation de ce champ montre que la profondeur d'eau dans les rivières varie d'environ 0 m à l'amont du réseau, à 2.3 m à l'aval.

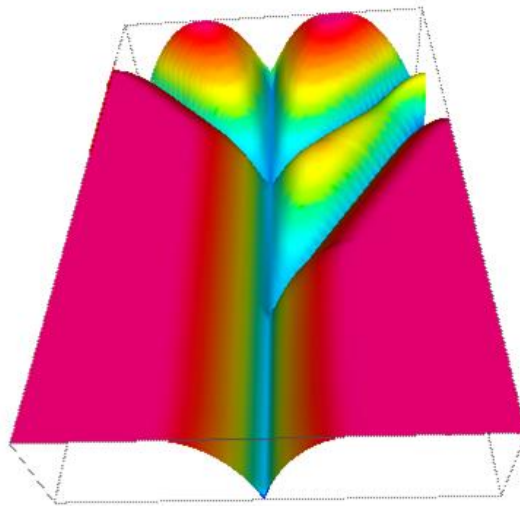


Figure 91 – Hydrosystème multicouche avec rivières : charge hydraulique calculée.

20.6. SIMULATION D'UNE CRUE EN RÉGIME TRANSITOIRE

- On réalise d'abord un calcul en régime permanent avec un flux d'infiltration égal à 20 mm/mois sur tout le domaine.
- Puis on suppose qu'après 5 jours une très forte pluie de 3000 mm/mois survient pendant une durée de 1 jour, c'est-à-dire de la date $t = 5$ j à $t = 6$ j dans la zone de sol n°5, c'est-à-dire sur le 1/3 nord du domaine. Ce flux de pluie de 3000 mm/mois pendant 1 jour correspond à une hauteur de pluie de 98.56 mm. On suppose que pendant cette journée les deux autres zones continuent à recevoir un flux de pluie de 20 mm/mois, soit une hauteur de pluie de 0.66 mm.
- À partir du jour suivant, c'est-à-dire à partir de $t = 6$ jours, le flux de pluie est égal à 0 sur tout le domaine.

On réalise une simulation pendant une période de 50 jours.

Pour cette simulation on utilise une loi hauteur - débit dans la rivière suivant la formule de Manning-Strickler. On s'intéresse en particulier à l'évolution des débits et des niveaux d'eau dans la rivière ainsi qu'à l'évolution de la charge dans la nappe à proximité de la rivière.

Définition des paramètres généraux.

Paragraphe : Sauvegardes et contrôles :

On demande la sauvegarde de l'historique du bilan hydroclimatique.

Flux = Sauvegarde des Historiques de Bilans Hydroclimat. (1=Flux ; 2=Débit)

Paragraphe : Pas de Temps et sous-pas de temps :

On demande 5 sous-pas de temps par pas de temps de modèle pour reproduire finement le passage de la crue.

5 = Nombre de sous-pas de temps de modèle [Défaut=1]

Paragraphe : Contrôle de la Résolution Hydrodynamique :

30 = Nombre maxi d'itérations par pas de temps calcul suivant le pas n°0

50 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Init.)

20 = Nombre d'itérations internes pour le solveur [Déf=10]

Transit = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe : Unités des données :

% = Unité de coefficient d'Emmagasinement Libre en [-]

= Unité de Hauteur Hydroclimat (Pluie, ETP, Infilt., Rechar.) en mm

Mois = Unité de Durée Hydroclimat. (sec, min, heu, jou, déca, moi, ann)

Jour = Unité de Temps (Pas de temps) (sec, min, heu, jou, déca, moi, ann)

km = Unité de Coordonnée Horizontale des mailles en m

Specif = Emmag. Captif lus (0=Hydrogéologues ; 1=Spécifiques ; 2=Compressib.)

= Unité de Débit de Rivière (Déf = Unité générale de débit)

Paragraphe : Réseau Hydrographique, Drains, Lacs :

1 = Couplage avec un Réseau Hydrographique [0=Non ; 1=Oui]

15 = Nombre maximal d'itérations pour le calcul des Débits de Rivières

1 = Loi Hauteur (Débit) Rivière [0=Non ; 1=Manning_Large ; 2=Manning]

1 = Routage débits Rivière [0=Non 1=Oui] si Transitoire et si loi Hauteur-Débit

0.3 = Coefficient de sous-Relaxation pour les Débits de Rivières [Déf=1]

Paragraphe : Initialisation avant calculs :

- Pour avoir un exemple plus démonstratif, on remplace la perméabilité de l'aquifère, qui était de 10^{-4} m/s, par une perméabilité de 10^{-3} m/s. On aura ainsi des gradients de charge hydraulique plus faibles, et donc davantage d'alimentation de la nappe par la rivière.

On ajoute les données suivantes :

- Un coefficient d'emmagasinement en nappe libre de 5 %.
- Un coefficient d'emmagasinement captif spécifique de 10^{-5} m^{-1} .
- Trois paramètres pour un bilan hydroclimatique avec le schéma GARDÉNIA (Thiéry 2013, 2014, 2015e). Le code de calcul GARDÉNIA est décrit dans le rapport [BRGM/RP-62797-FR](#) et [validé dans le rapport BRGM/RP-64500-FR](#) :
 - Une hauteur d'« Équi ruissellement-percolation » de 20 mm dans toutes les zones de sol.
 - Un « temps de ½ percolation » égal à 1.5 mois dans toutes les zones de sol.
 - Une hauteur d'eau initiale dans le réservoir hydrologique « H » égale à 20 mm dans toutes les zones de sol.

La Figure 92 reproduit le paragraphe « Initialisation avant calculs » situé à la fin du fichier des paramètres.

```

/PERMEAB/ZONE_GEO      Z= 1:3  V=      1e-3;
/EMMAG_CAPT/GRILLE    N: =1e-5
/EMMAG_LIBR/GRILLE    N: =5
/POROSITE/GRILLE      N: =5
/LONG_RIVI/GRILLE     N: =2
/LARG_RIVI/TRONCON    A=   10T=   *V=   5e-2;
/LARG_RIVI/TRONCON    A=   40T=   *V=   5e-2;
/LARG_RIVI/TRONCON    A=   50T=   *V=   5e-2;
/LARG_RIVI/TRONCON    A=   60T=   *V=   5e-2;
/LARG_RIVI/TRONCON    A=   20T=   *V=   0.1;
/LARG_RIVI/TRONCON    A=   30T=   *V=   0.1;
/HAUTEU_RIVI/TRONCON A=  1:60 T=   *V=   4;
/FOND_RIVI/TRONCON   A=  1:60 T=   *V=   0;
/EPAI_LIT_RIV/GRILLE  N: =0.1
/PERM_LIT_RIVI/GRILLE N: =1e-6
/RUGOS_RIVI/TRONCON  A=  1:60 T=   *V=   4e-2;
/PENTE_RIVI/TRONCON  A=  1:60 T=   *V=   5e-4;
/EQU_RUIS_PERC/ZONE_SOL Z= 1:15 V=   20;
/T_DEMI_PERCOL/ZONE_SOL Z= 1:15 V=   1.5;
/NIV_RESERV_H/ZONE_SOL Z= 1:15 V=   20;
    
```

Figure 92 – Hydrosystème multicouche avec rivières :
Paragraphe « Initialisation avant calcul » à la fin du fichier des « Paramètres généraux » [.mart].

Fichier des pas de temps.

Après une première simulation on a vu que, pour suivre précisément la pointe de crue, il fallait découper finement le temps à partir de la date 7 jours jusqu'à la date 8 jours. On a donc adopté les dates de pas de temps décrites dans le Tableau 5.

Début	0	5	6	7	7.1	7.2	7.3	7.5	7.7	8	9	...	25	35	40	45
Fin	5	6	7	7.1	7.2	7.3	7.5	7.7	8	9	10	...	30	40	45	50
Durée	5	1	1	0.1	0.1	0.1	1.2	0.2	0.3	1	1	1	5	5	5	5

Tableau 5 – Début, fin et durée en jours des pas de temps.

À la date t = 10 jours on demande la sauvegarde des composantes de débits dans les tronçons de rivière, sous forme de profils en long. Ces résultats sont sauvegardés dans le

fichier « rivsim.prn » qui est directement importable dans le tableur Excel®, ou un tableur équivalent.

La Figure 93 présente le « fichier des pas de temps » utilisé pour la simulation.

```

*** Début de la simulation à la date : 0; ***
/FLUX_INFILTR/ZONE_CLIM Z= *v= 20;
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 1: se termine à la date : 5; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 2: se termine à la date : 6; ***
/FLUX_INFILTR/ZONE_CLIM Z= 5v= 3000;
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 3: se termine à la date : 7; ***
/FLUX_INFILTR/ZONE_CLIM Z= *v= 0;
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 4: se termine à la date : 7.1; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 5: se termine à la date : 7.2; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 6: se termine à la date : 7.3; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 7: se termine à la date : 7.5; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 8: se termine à la date : 7.7; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 9: se termine à la date : 8; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 10: se termine à la date : 9; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 11: se termine à la date : 10; ***
/DEBIT_RIVI/EDITION I= 0;L= 0;F= 1;B= 0;
/***** Fin de ce pas
. . .
*** Le pas : 26: se termine à la date : 25; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 27: se termine à la date : 30; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 28: se termine à la date : 35; ***
/***** Fin de ce pas
. . .
*** Le pas : 31: se termine à la date : 50; ***
/***** Fin de ce pas
*** : : Fin de la simulation : ; ***

```

Figure 93 – Hydrosystème multicouche avec rivières : Fichier des pas de temps (extrait).

Fichier des historiques à sauvegarder.

Avec le préprocesseur on demande les historiques des champs calculés suivants :

- Hauteu_Rivi = Altitude de l'eau dans les tronçons de rivière.
(On demande la sauvegarde à l'exutoire des affluents)
- Débit_Rivi = Débit calculé à l'aval des tronçons de rivière.
(On demande la sauvegarde à l'exutoire des affluents)
- Charge = Charge hydraulique dans la nappe.
(Pour contrôle en quelques points à proximité des rivières)

On aurait pu également demander l'historique de débit d'échange nappe-rivière en certains points.

Lancement des calculs.

On lance alors les calculs qui se terminent en quelques minutes. On vérifie, dans le fichier « bilandeb.txt » et dans le fichier « histobil_debit.prn » qu'ils ont parfaitement convergé.

Résultats de la simulation d'une crue en régime transitoire.

La Figure 94 tracée à partir du fichier « histoclim.prn » présente le bilan hydroclimatique moyen sur le domaine. Il apparaît que le flux de pluie très fort pendant un jour est nettement amorti par le bilan hydroclimatique de surface. Il apparaît également que le ruissellement vers les affluents de rivière est beaucoup plus important que le flux d'infiltration.

La Figure 95 tracée à partir du fichier « histobil_debit.prn » présente le bilan global des débits dans la nappe sur le domaine en unité de débit, c'est-à-dire ici en m^3/s .

Les Figure 96 à Figure 98 présentent respectivement les historiques de débit à l'exutoire des affluents, les historiques d'altitude de l'eau à l'exutoire des affluents, des historiques de charge dans la nappe à proximité des rivières.

Les Figure 99 et Figure 100 présentent respectivement les profils en long du débit et du débit d'échange nappe -> rivière dans l'affluent n°10, après 10 jours.

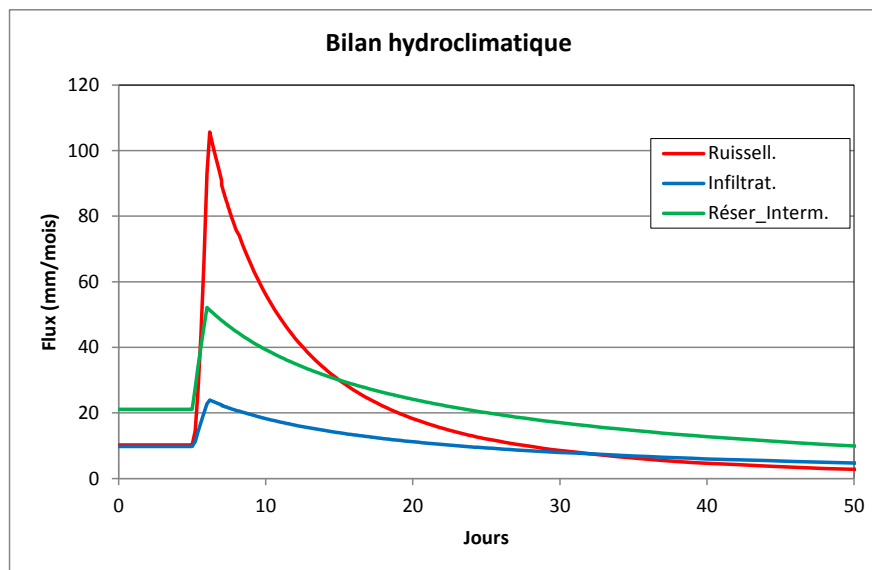


Figure 94 – Hydrosystème multicouche avec rivières : Bilan hydroclimatique.

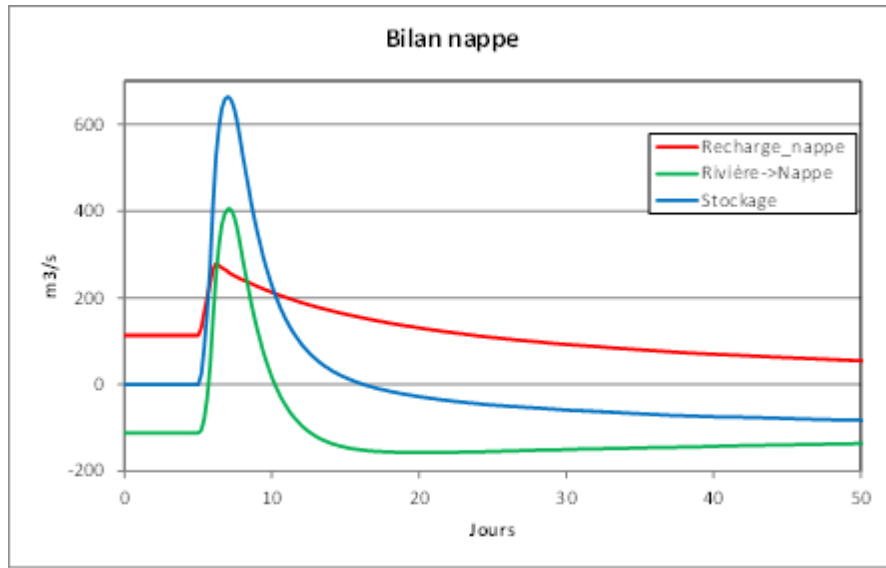


Figure 95 – Hydrosystème multicouche avec rivières : Bilan global de la nappe.

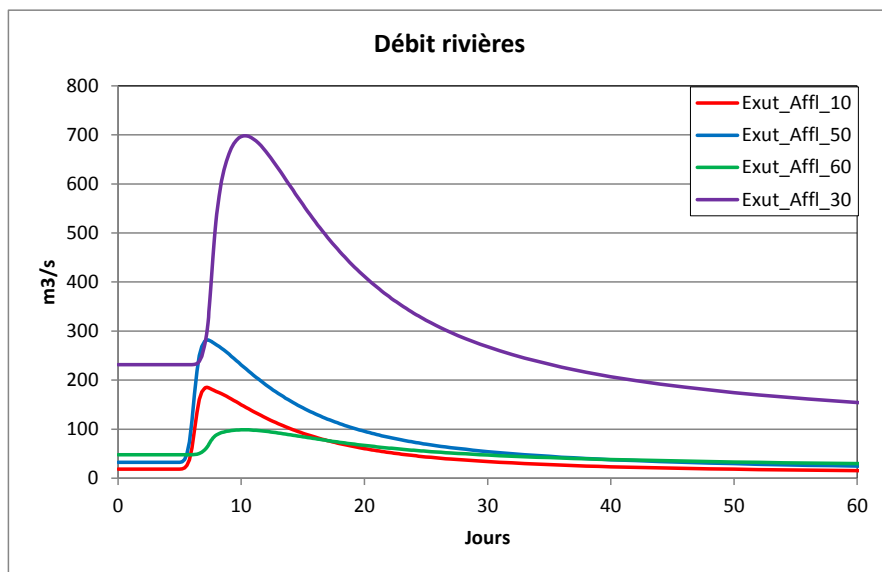


Figure 96 – Hydrosystème multicouche avec rivières : Historiques de débit dans 4 tronçons de rivières.

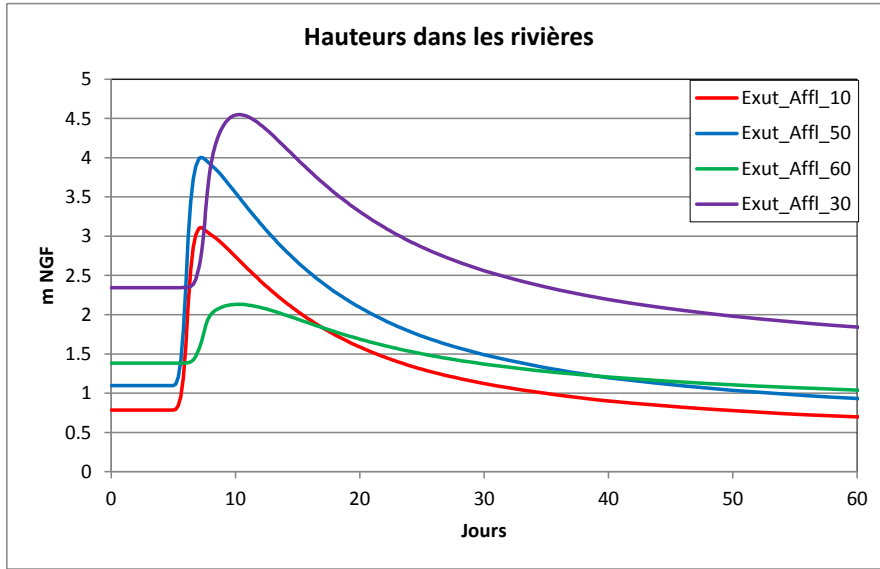


Figure 97 – Hydrosystème multicouche avec rivières. Historiques de l'altitude de l'eau dans 4 tronçons de rivière.

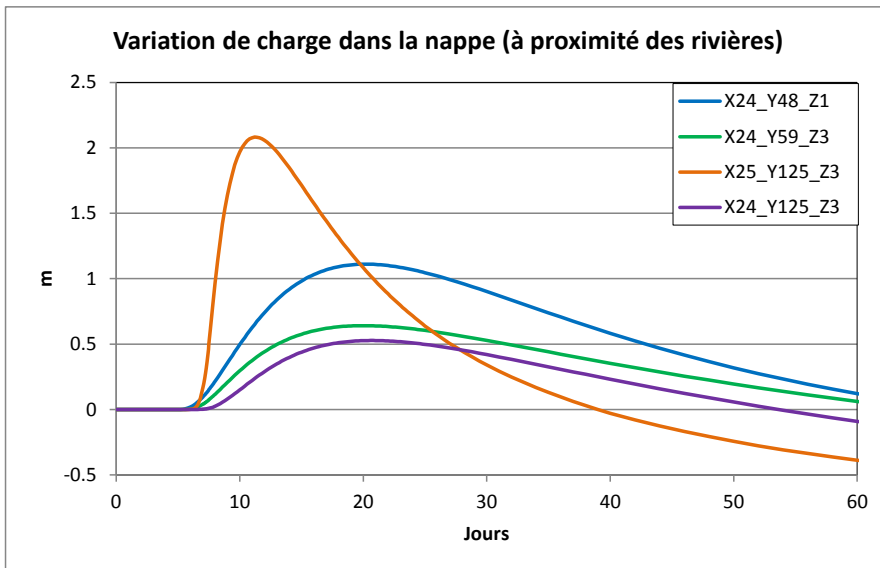


Figure 98 – Hydrosystème multicouche avec rivières : Historiques de niveau de nappe.

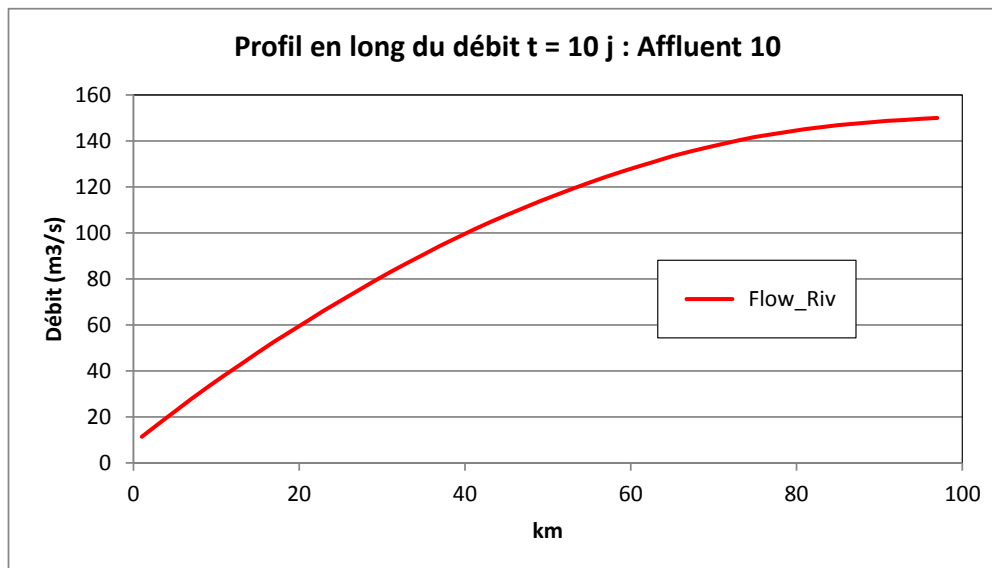


Figure 99 – Profil en long du débit dans l'affluent n°10 à la date 10 jours.

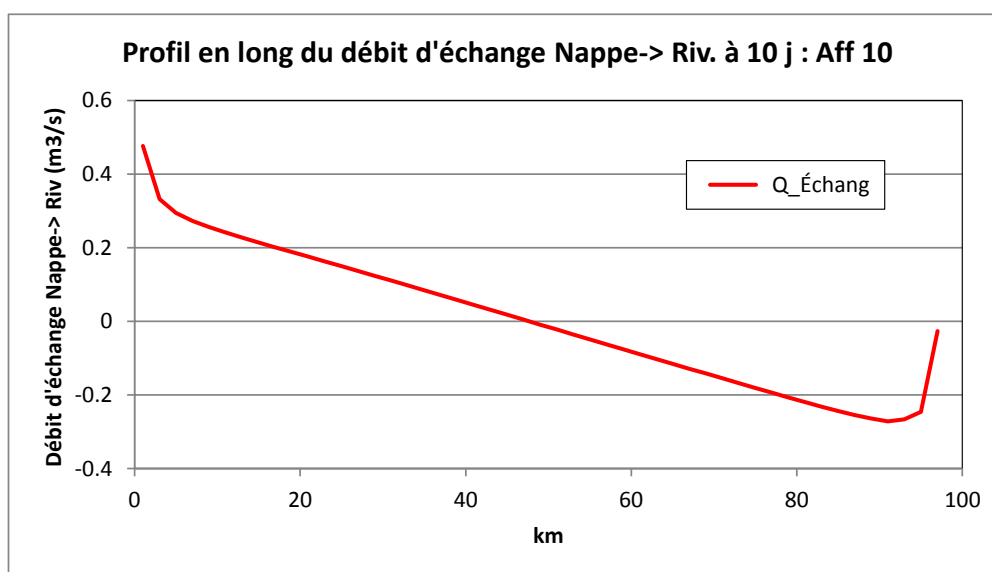


Figure 100 – Profil en long du débit d'échange Nappe-> Rivière de l'affluent n°10 à la date 10 jours.

20.7. SIMULATION DE LA CONCENTRATION RÉSULTANT D'UNE POLLUTION DANS UN AFFLUENT DE RIVIÈRE

Le scénario simulé est le suivant :

- On considère que le système est en équilibre, en régime permanent, lors d'une période sans recharge, mais avec de forts débits en amont des affluents n°40 et n°60 : Débits de $400 \text{ m}^3/\text{s}$ dans l'affluent n°40 et de $200 \text{ m}^3/\text{s}$ dans l'affluent n°60.

- Puis on suppose une injection de 500 kg/jour, résultant d'une pollution, au milieu de l'affluent n°40, dans le tronçon n°19 (c'est-à-dire dans la maille de numéro de colonne n°48, et de ligne n°7).

On simule alors l'évolution de la concentration dans les cours d'eau et dans la nappe, à proximité immédiate du cours d'eau.

Définition des paramètres généraux.

On utilise un fichier de paramètres généraux identique à celui utilisé précédemment pour la simulation d'une crue, avec cependant les modifications suivantes :

Paragraphe : Unités des données :

% = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-]
µg/L = Unité de Concentration en kg/m³
(µg est l'abréviation utilisée pour « microgramme par litre »)

Paragraphe : Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité :

100 = Nombre maximal d'itérations *Transport* Salinité/Chaleur/Concentrat.
DF = Schéma de Transport [0=D_Finies] (*ici DF ⇔ Différences Finies*)
 0 = Diffusion moléculaire (m²/s) [* = Spatialisée]
1000 = Dispersivité Longitudinale (m) [* = Spatialisée]
 0 = Dispersivité Transversale (m) [* = Spatialisée]

Paragraphe : Concentration et Trajectoires :

1 = Calcul de la Concentration
 0 = Variation moyenne de Concentration entre 2 itérat. pour convergence
Transit = Régime du Transport de Concentration [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe : Réseau Hydrographique, Drains, Lacs :

0 = Routage débits Rivière [0=Non 1=Oui] si Transitoire et si loi Hauteur-Débit
(Le routing est inutile car on considère les écoulements en équilibre)

Paragraphe : Initialisation avant calculs :

On ajoute une valeur de porosité uniforme, égale à 5 % dans tout le domaine.

/POROSITE/GRILLE N: =5

Définition du fichier des pas de temps.

Au pas de temps n°1, on introduit le flux massique de 500 kg/jour dans l'affluent n°40, tronçon n°19. On effectue une simulation pendant une durée totale de 1800 jours (5 ans), avec de petits pas de temps au début, puisque le transfert en rivière est rapide, puis avec des pas de temps plus grands, puisque les transferts dans la nappe sont beaucoup plus lents. Le Tableau 6 montre les dates de fin de pas de temps choisies. Comme pour le calcul de propagation de crue, chaque pas de temps sera découpé en 5 sous-pas de temps comme spécifié dans le paragraphe « Pas de Temps et sous-pas de temps » du fichier des paramètres. La Figure 101 présente un extrait du fichier des pas de temps.

Dates	0.5	1	1.5	2	3	4	5	7	10	12
de	15	20	25	30	60	90	120	150	180	210
fin	240	300	360	450	540	630	720	810	900	990
(jours)	1080	1170	1260	1350	1440	1550	1620	1710	1800	

Tableau 6 – Transport avec rivières : dates de fin des pas de temps en jours.

Lancement des calculs.

On lance alors les calculs qui se terminent en quelques minutes. On vérifie, dans le fichier « bilandeb.txt » et dans les fichiers « histobil_debit.prn » et « histomas.prn » qu'ils ont parfaitement convergé en termes de bilan des débits et de bilan de masse, à la fois dans la nappe et dans le réseau hydrographique.

Résultats de la simulation d'une crue en régime transitoire.

La Figure 102 présente la carte de la concentration calculée dans la couche affleurante de la nappe après 5 ans. Elle montre que la concentration en nappe est significative uniquement à proximité immédiate du réseau hydrographique, en aval du point d'injection. (En fait pour réaliser cette vue on a concaténé dans une seule couche les valeurs de chaque couche qui affleure. Pour le dessin on a considéré comme nulles les concentrations inférieures à 0.1 microgramme par litre).

La Figure 103 et la Figure 104, tracées à partir du fichier « historiq.prn », présentent respectivement l'évolution de la concentration dans la rivière au cours des 5 premiers jours et l'évolution de la concentration dans la nappe en quelques points proches de la rivière pendant 5 ans.

On voit que la concentration dans la rivière se stabilise après 1 jour à l'aval de l'affluent dans lequel se produit la fuite (affluent n°40), et après 4 jours à l'exutoire du réseau hydrographique (affluent n°30).

Dans la nappe, qui est alimentée uniquement par le réseau hydrographique dans cette simulation, les vitesses sont beaucoup plus lentes et la concentration évolue beaucoup plus lentement. Elle n'est pas encore stabilisée après 5 ans. La concentration a une valeur non nulle uniquement à proximité immédiate du réseau hydrographique.

```

Rivières 3D
<< Pas de pluie pour que la rivière alimente la nappe >>
<< Transport : Injection de 500 kg/J dans l'affluent n°40 >>
#<V7.5># --- Fin du texte libre --- ; Ne pas modifier/retirer cette ligne
*** Début de la simulation à la date : 0; ***
/FLUX_INFILTR/ZONE_CLIM Z= *V= 0;
/Q_EXTER_RIVI/TRONCON A= 40T= 1V= 400;
/Q_EXTER_RIVI/TRONCON A= 60T= 1V= 200;
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 1: se termine à la date : 0.5; ***
/QMASS_RIVI/TRONCON A= 40T= 19V= 500;
/CONCEN_RIVI/EDITION I= 1;
/CONCENTR/EDITION I= 1;V= 0;R= 0;
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 2: se termine à la date : 1; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 3: se termine à la date : 1.5; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 4: se termine à la date : 2; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 5: se termine à la date : 3; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 6: se termine à la date : 4; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 7: se termine à la date : 5; ***
/CONCEN_RIVI/EDITION I= 1;
/CONCENTR/EDITION I= 1;V= 0;R= 0;
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 8: se termine à la date : 7; ***
/***** Fin de ce pas
. . .
*** Le pas : 39: se termine à la date : 1800; ***
/CONCEN_RIVI/EDITION I= 1;
/CONCENTR/EDITION I= 1;V= 0;R= 0;
/***** Fin de ce pas
*** : : Fin de la simulation : ; ***
    
```

Figure 101 – Pollution dans un affluent de rivière : Fichier des pas de temps (extrait).

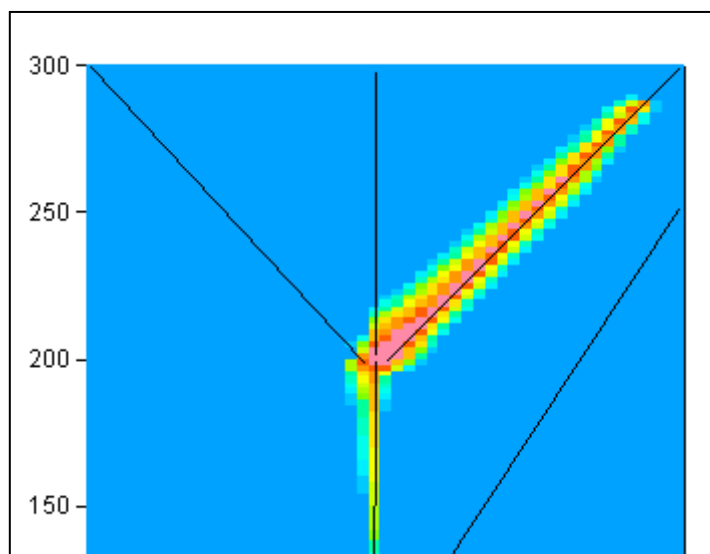


Figure 102 – Pollution dans un affluent de rivière : Concentration dans la nappe après 5 ans.

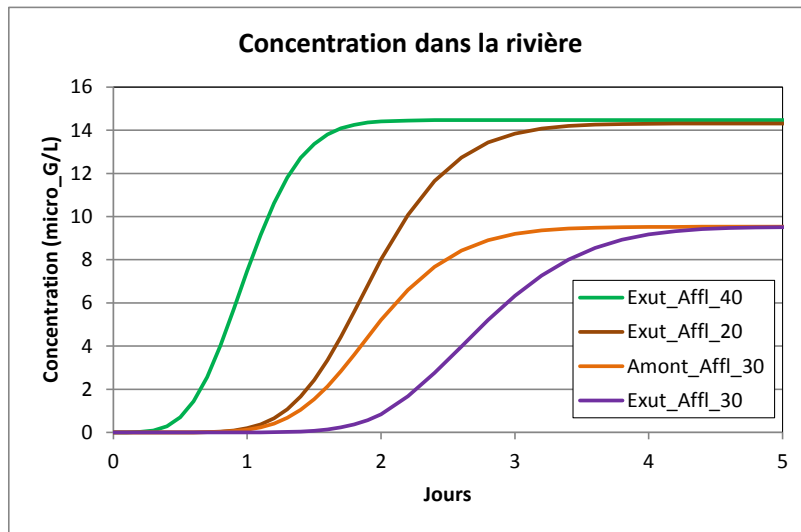


Figure 103 – Pollution dans un affluent de rivière : Évolution de la concentration dans la rivière au cours des 5 premiers jours.

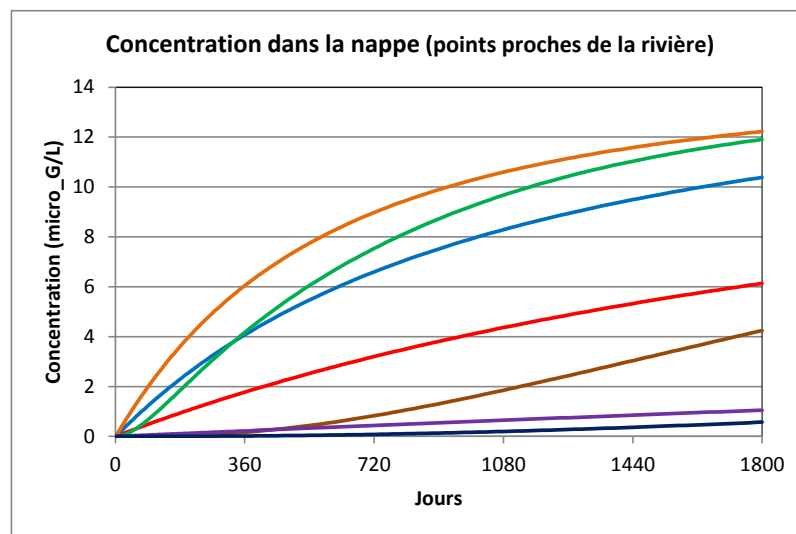


Figure 104 – Pollution dans un affluent de rivière : Évolution de la concentration dans la nappe en quelques points proches de la rivière pendant 5 ans (1800 jours).

21. Exemple n°11 : Hydrosystème simple avec bilan hydroclimatique GARDÉNIA

Cet exemple, montre comment simuler un hydrosystème dont les variations temporelles sont conditionnées par les processus hydroclimatiques sur son bassin versant. L'hydrosystème modélisé est une simplification d'un bassin versant réel. Un cours d'eau, la Voulzie à Jutigny, draine un bassin versant de 280 km², situé près de la ville de Provins. Le piézomètre Saint Martin-Chennetron, implanté dans l'aquifère des Calcaires de Champigny, suit le niveau de la nappe en un point du bassin. On modélise le domaine comme un aquifère monocouche, traversé du Nord au Sud par un cours d'eau rectiligne. (Figure 105).

Le ruissellement et l'infiltration sont calculés par MARTHE via un bilan effectué avec l'algorithme GARDÉNIA (Thiéry, 2013, 2014, 2015e).

Le code de calcul GARDÉNIA est décrit dans le rapport [BRGM/RP-62797-FR](#) et [validé dans le rapport BRGM/RP-64500-FR](#)

On dispose des données hydroclimatiques suivantes :

- La pluie mensuelle moyenne sur le bassin, en mm/mois, de 1962 à 2004. C'est une lame d'eau uniforme sur le bassin, calculé par pondération arithmétique de stations pluviométriques voisines.
- L'évapotranspiration potentielle (ETP) à Melun de 1962 à 2004, en mm/mois.
- Les valeurs du débit moyen mensuel de la Voulzie à Jutigny, en m³/s de 1974 à 2004.
- Les relevés du niveau piézométrique mensuel à St Martin-Chennetron, en m NGF, de 1970 à 2004. Ce sont les valeurs relevées aux alentours du 15 de chaque mois.

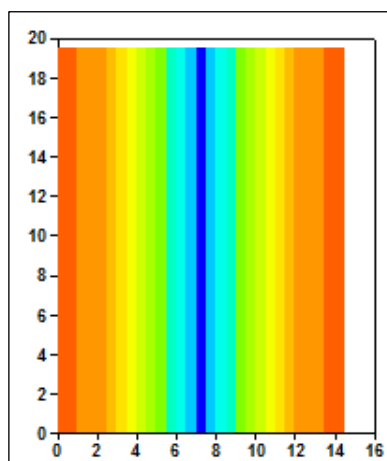


Figure 105 – Géométrie de l'hydrosystème, avec un cours d'eau orienté Nord-Sud au milieu du domaine.

Les caractéristiques du système sont les suivantes :

Géométrie :

- Le domaine est modélisé par un rectangle de 14.5 km dans la direction Ouest-Est sur 19.5 km dans la direction Sud-Nord, soit 282.75 km².

- On choisit un maillage régulier, avec 29 colonnes de 0.5 km de largeur et 39 lignes de 0.5 km de hauteur. L'origine du maillage est située au point de coordonnées (0, 0)
- L'altitude topographique est fixée arbitrairement à +200 m NGF.
- Le substratum est fixé à l'altitude 0 m NGF.

Conditions à la limite :

- Aucune limite à charge imposée.

Paramètres hydrodynamiques :

- Perméabilité de l'aquifère = $4.594 \cdot 10^{-5}$ m/s
- Coefficient d'emmagasinement libre = 1.07 %

Réseau hydrographique : Le réseau hydrographique est constitué d'un seul affluent orienté Nord-Sud, situé au milieu du domaine (donc à l'abscisse 7.25 km). On considère, pour simplifier, que son lit est horizontal, ainsi que l'altitude de la surface libre de l'eau.

- Largeur du cours d'eau = 0.015 km (soit 15 m).
- Longueur des tronçons de cours d'eau = 0.5 km (par maille).
- Altitude de l'altitude du fond du lit = 107 m NGF.
- Altitude de l'eau dans le cours d'eau = 107.62 m NGF.
- Épaisseur du lit et des berges = 0.1 m
- Perméabilité du lit et des berges = 10^{-6} m/s

Paramètres du bilan hydroclimatique :

Dans tout le domaine on fixe les paramètres suivants :

- Capacité du réservoir sol progressif = 103 mm
- Hauteur d'équi-ruisselement = 405 mm
- Temps de $\frac{1}{2}$ percolation = 4.4 mois

21.1. CRÉATION DU MAILLAGE

- Titre du projet : **Didact_Chennetr** ;
- Coin Sud-Ouest : $X = 0$; $Y = 0$; (km)
- Coin Nord-Est : $X = 14.5$; $Y = 19.5$; (km)
- Largeur des colonnes = **0.5** ; Hauteur des lignes = **0.5** ; (km)
- Nombre de couches = **1** ;
- Valeur de perméabilité par défaut = 1 (on définira plus loin la vraie valeur);
- Altitude topographique = **200** (m) ;
- Épaisseur (de chaque couche) = **200** (m).

21.2. DÉFINITION DU PROFIL D'UTILISATION

Comme on va réaliser une simulation en régime transitoire, avec un réseau hydrographique et un bilan hydroclimatique, on définit un « profil d'utilisation » en sélectionnant, c'est-à-dire en donnant la valeur « 1 », aux options suivantes :

- 1 = Régime Transitoire
- 1 = Rivières, Drains, Lacs (1=Rivières et Lacs ; 2=Drains ; 3=tous les 3)
- 1 = Hydroclimatologie, Cultures, Nitrates

Et on sauvegarde ce profil sous le nom « Didact_Chennetr.prfu »

Après avoir sauvegardé le projet on retourne dans WinMarthe *sensu stricto*.

21.3. DÉFINITION DES AUTRES CHAMPS

Étant donné que le domaine est très simple, on définira tous les champs de données maillées par des « modifications initiales » à la fin du fichier des paramètres [.mart].


Définition des « Zones de sol » :

Les « Zones de sol » sont des zones dans lesquelles les paramètres hydrologiques (« réserve utile du sol », « temps de percolation », etc.) sont uniformes. Dans cet exemple simple on utilisera également les « zones de sol » pour y introduire les données de pluie et d'ETP (évapotranspiration potentielle). En fait, on définira un seul numéro de zone égal à 1 sur tout le domaine. Il y aura donc une seule zone de sol.

Définition de l'arbre de branchement des affluents.

Comme il y a uniquement un affluent de cours d'eau, il n'y a pas de branchement. Il n'est donc pas utile de définir de fichier « Arbre de branchement des affluents de rivières ».

Définition des paramètres généraux.

Par l'icône , on accède au menu des « Paramètres non maillés ». On sélectionne alors « Paramètres généraux » et on crée un nouveau fichier.

Paragraphe : Sauvegardes et contrôles :

Flux = Sauvegarde des Historiques de Bilans Hydroclimat. (0=Non)

1 = Écriture des dates sous forme calendaire (0=JMA hh:mm ; 1=JMA ; -1=non)
[Donc écriture des dates calendaires sous la forme jj/mm/aaaa sans hh:mm]

Paragraphe : Contrôle de la Résolution Hydrodynamique :

20 = Nombre Maxi d'itérations par pas de temps calcul suivant le pas n°0
 20 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Init.)
Transit = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe : Unités des données :

1e-6 = Unité de Perméabilité des aquifères en m/s (ou m2)
 = Unité de Hauteur Hydroclimat. (Pluie, ETP, Infilt., Recharge) en mm
Mois = Unité de Durée Hydroclimat. (sec, min, heu, jou, déca, moi, ann)
Jour = Unité de Temps (Pas de temps) (sec, min, heu, jou, déca, moi, ann)
km = Unité de Coordonnée Horizontale des mailles en m
 = Unité de Débit de Rivière (Déf = Unité générale des débit)

Paragraphe : Réseau Hydrographique, Drains, Lacs :

1 = Couplage avec un Réseau Hydrographique [0=Non ; 1=Oui]

Paragraphe : Hydroclimatologie :

2 = Limitation de la Reprise à la Nappe par ETR [0=Non ; 1=Limit. ; 2=Suppr.]
[Important : 2 => Pas de reprise directe à la nappe]
 0 = Type de Bilan Hydroclimat. [0=GARDÉNIA ; 1=Modsur ; 2=Rui,Rech ; 3=GR3/GR4]
[Donc, par défaut, choix du bilan par la méthode Gardénia]
 0 = Type de Zones pour les Pluie, ETP, Rechar., [0=Zones de Sol ; 1=Z. Météo]

Les champs qui sont uniformes, globalement, par zone ou par affluent, vont être définis simplement par le préprocesseur dans le paragraphe « Initialisation avant calcul » :

- Perméabilité de l'aquifère : $4.594 \cdot 10^{-5}$ m/s, soit 45.94 puisqu'on a choisi une unité de perméabilité égale à 10^{-6} m/s.
- Coefficient d'emmagasinement libre : $1.07 \cdot 10^{-2}$ (soit 1.07 %).
- Charge pour initialiser les calculs : 109 m NGF.
- Définition du réseau hydrographique :
 - Affluent n°1, dans la colonne n°15, pour toutes les lignes (noté « * »).
 - Numéro de tronçon = numéro de la ligne, donc raccourcis « -2 », dans la colonne n°15, pour toutes les lignes (notation « * »).

Remarque : on a pu choisir le numéro de la ligne comme numéro de tronçon, puisque ce numéro de ligne est bien croissant de l'amont vers l'aval de l'affluent.
- Longueur de tronçon de rivière = 0.5 km dans tous le domaine. (Ça ne pose pas de problème de définir des longueurs là où il n'y a pas de rivières. Les données en dehors des rivières seront ignorées).
- Largeurs de tronçons de rivières 15 m. Attention, les largeurs de rivières, comme les longueurs de tronçons sont en unité de coordonnées horizontales de mailles, donc ici en km. On donne donc respectivement une largeur égale à 0.015 km et une longueur de 0.5 km.
- Altitude absolue de l'eau dans les tronçons de rivière : 107.62 mètres NGF dans tous les tronçons.
- Altitude absolue du fond de la rivière : 107 m dans tous les tronçons.
- Épaisseur du lit : 0.1 mètre dans tous les tronçons.
- Perméabilité du lit et des berges de rivières : 10^{-6} m/s dans tous les tronçons.

- Numéro de « Zone de sol » : numéro 1 pour les mailles de tout le domaine.
- Paramètres du bilan hydroclimatique GARDÉNIA :
 - Capacité du réservoir sol progressif : 103 mm, dans la zone n°1
 - Hauteur d'équi-ruisselement : 405 mm, dans la zone n°1
 - Temps de ½ percolation : 4.4 mois, dans la zone n°1 (en mois puisque l'unité choisie pour les durées hydroclimatiques est le mois.)

Paragraphe : **Initialisation avant calculs :**

/PERMEAB/GRILLE	N: =45.94			
/EMMAG_LIBR/GRILLE	N: =1.07e-2			
/H_TOPOGR/GRILLE	N: =200			
/H_SUBSTRAT/GRILLE	N: =0			
/CHARGE/GRILLE	N: =109			
/AFFLU_RIVI/MAILLE	C= 15L=	*P=	1V=	1;
/TRONC_RIVI/MAILLE	C= 15L=	*P=	1V=	-2;
/EPAI_LIT_RIV/GRILLE	N: =0.1			
/PERM_LIT_RIVI/GRILLE	N: =1			
/LARG_RIVI/GRILLE	N: =0.015			
/LONG_RIVI/GRILLE	N: =0.5			
/FOND_RIVI/GRILLE	N: =107			
/HAUTEU_RIVI/GRILLE	N: =107.62			
/ZONE_SOL/GRILLE	N: =1			
/CAP_SOL_PROGR/ZONE_SOL	Z=	1V=	103;	
/EQU_RUIS_PERC/ZONE_SOL	Z=	1V=	405;	
/T_DEMI_PERCOL/ZONE_SOL	Z=	1V=	4.4;	

Définition des pas de temps.

Les données climatiques sont disponibles tous les mois pendant les 43 années de la période de janvier 1962 à décembre 2004, soit 516 mois. On va dans un premier temps constituer un fichier texte avec ces données climatiques. Ce fichier aura 2 colonnes : par exemple la première pour les données de pluies mensuelles et la deuxième pour les données d'ETP mensuelles. En pratique, pour faciliter la lisibilité et la mise en forme, on ajoute une 3^{ème} colonne avec la date. Il est conseillé de mettre la date facultative, qui ne sera pas lue, dans la dernière colonne (la plus à droite) pour éviter qu'elle ne perturbe la lecture des colonnes de données. On ajoute également une ligne texte descriptive (commençant par sécurité par un « ! » pour indiquer que cette ligne est un commentaire). En fait la dernière année, l'année 2004, est incomplète. Pour simplifier et avoir un nombre entier d'années, ce qui n'est pas indispensable, on complète l'année 2004 par des valeurs de pluie et d'ETP égales à zéro de mai 2004 à décembre 2004. Le fichier peut être créé très facilement avec un tableur, par exemple avec le tableur Excel® ou un tableur équivalent. Les données doivent être en format texte. Il ne faut donc pas créer un fichier [.xls] ou [.xlsx] mais exporter les données avec par exemple un « format texte, séparateur = tabulation » (Figure 106).

On donne à ce fichier le nom « **Didact_Chennetr_Meteo_1962_2004.prn** ».

! Pluie et ETP_Melun	Date
82.4 14.3285	15/01/1962
34.7 15.474	15/02/1962
79.2 24.9761	15/03/1962
...	...
43.4 49.5	15/03/2004
65.6 75.9	15/04/2004

Figure 106 – Hydrosystème avec bilan hydroclimatique GARDÉNIA :
Fichier temporel de données climatiques (extrait).

Avec le préprocesseur de données non maillées, icône , on crée alors un « nouveau fichier de pas de temps ».

On donne la date du début de la simulation sous forme calendaire : « **15/12/1961** » puisque le premier pas de temps sera le « 15/01/1962 » (Figure 107).

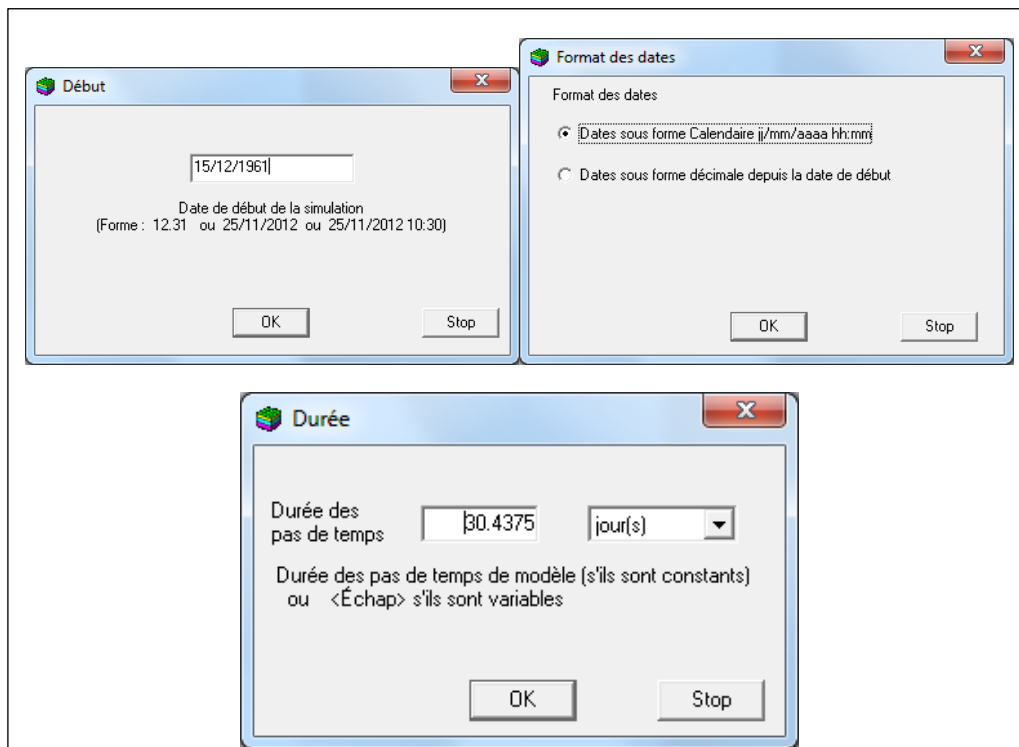


Figure 107 – Hydrosystème avec bilan hydroclimatique GARDÉNIA.
Création d’un nouveau fichier de pas de temps de durée 1 mois.

On choisit alors de donner les dates sous la forme « **Calendaire jj/mm/aaaa hh:mm** » et on choisit de créer automatiquement **516** pas de temps de durée **30.4375** jours, c'est-à-dire 365.25/12, donc un mois moyen (Figure 107).

Au pas de temps n°0, on définit les flux de pluie et les flux d’ETP des 516 pas de temps. On choisit donc :

« Nouvelles Actions » → *Thème* « Bilan hydroclimatique, cultures » → *Objet* « Flux de précipitations » (FLUX_PLUV) → *Modification par* « Zones climatiques » ZONE_CLIM.

On donne alors dans la zone de sol n°1 un flux de pluie moyen de **15** mm/mois au pas de temps n°0, on définit dans la fenêtre du bas le nom du fichier contenant l'évolution des 516 valeurs correspondant aux 516 pas de temps de janvier 1962 à décembre 2004 : « **Didact_Chennetr_Meteo_1962_2004.prn** », et on conserve le numéro **1** proposé pour la colonne du fichier à utiliser pour lire ces données de flux de précipitations. On clique alors sur « OK » (Figure 108).

Pour définir les flux d'ETP, on clique sur « Retour » puis :

Thème « Bilan hydroclimatique, cultures » → *Objet* « Flux d'évapotranspiration potentielle » (FLUX_ETP) → *Modification par* « Zones climatiques » ZONE_CLIM.

On donne alors dans cette zone de sol n°1, un flux d'ETP égal à **0** mm/mois au pas de temps n°0, et on définit dans la fenêtre du bas le nom du fichier contenant l'évolution des 516 valeurs correspondant aux 516 pas de temps de janvier 1962 à décembre 2004 : « **Didact_Chennetr_Meteo_1962_2004.prn** ». On donne le numéro **2** pour la colonne du fichier à utiliser pour lire ces données de flux d'ETP et on clique sur « OK » (Figure 109).

On clique sur « Retour » et on sauvegarde le fichier des pas de temps sous le nom proposé « **Didact_Chennetr.pastp** » et on choisit comme format d'écriture « **Jour : jj/mm/aaaa** » (Figure 110), c'est-à-dire une écriture sous forme calendaire, sans heures et minutes, de façon à avoir un fichier plus lisible (Figure 111).

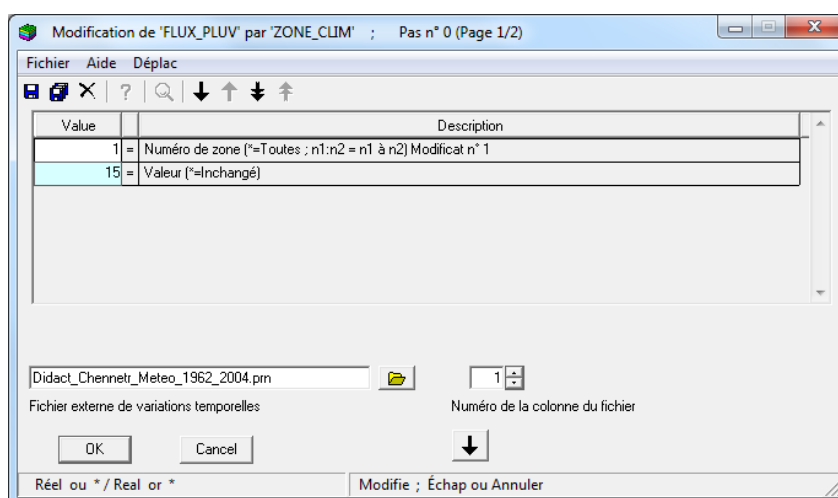


Figure 108 – Au pas de temps n°0 : Définition du flux de pluie avec lecture des données dans la colonne n°1 d'un fichier externe.

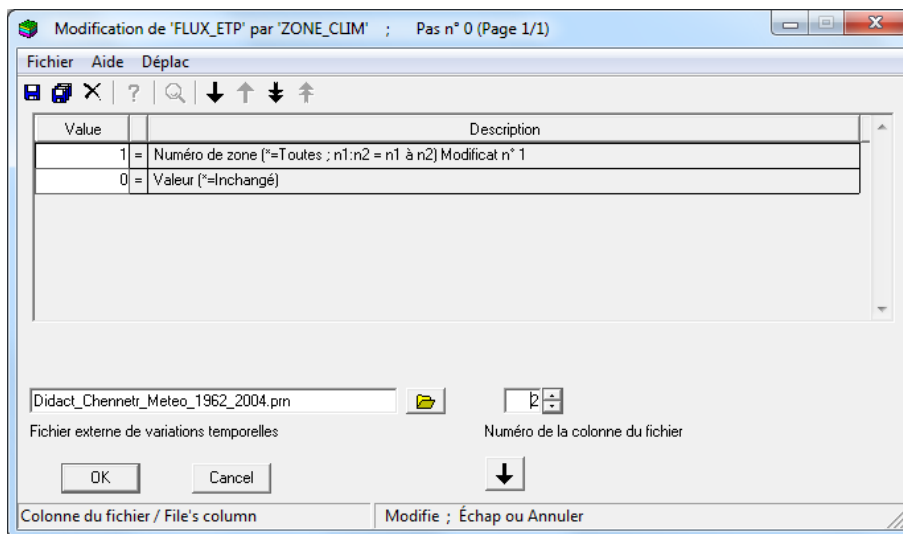


Figure 109 – Au pas de temps n°0 : Définition du flux d'ETP avec lecture des données dans la colonne n°2 d'un fichier externe.

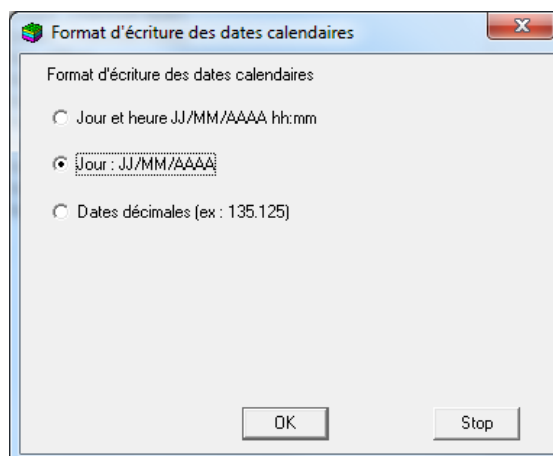


Figure 110 – Définition du format d'écriture des dates dans le fichier des pas de temps résultant.

```

Chennetron - Voulzie 2D : Fichier des pas de temps
#<V7.5># --- Fin du texte libre --- ; Ne pas modifier/retirer cette ligne
*** Début de la simulation à la date : 15/12/1961 ; ***
/FLUX_PLUV/ZONE_CLIM Z= 1V= 15; File= Didact_Chennetr_Meteo_1962_2004.prn
/FLUX_ETP/ZONE_CLIM Z= 1V= 0; File= Didact_Chennetr_Meteo_1962_2004.prn; Col=2
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 1: se termine à la date : 14/01/1962 ; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 2: se termine à la date : 13/02/1962 ; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 3: se termine à la date : 16/03/1962 ; ***
/***** Fin de ce pas
.
.
.
*** Le pas : 515: se termine à la date : 14/11/2004 ; ***
/***** Fin de ce pas
*** Le pas : 516: se termine à la date : 14/12/2004 ; ***
/***** Fin de ce pas
*** : : Fin de la simulation : ; ***

```

Figure 111 – Hydrosystème avec bilan hydroclimatique GARDÉNIA.
Extrait du fichier pas de temps «Didact_Chennetr.pastp» résultant.

Définition des « Mailles à historiques » :

Comme dans les exemples précédents, on crée un fichier de mailles à historiques avec le préprocesseur de données non maillées. On demande :

- Un historique de « Charge » dans la maille de colonne n°27 et ligne n°8, qui correspond au piézomètre St Martin Chennetron dans notre exemple simplifié.
- Un historique de « Débit_Rivière » dans la maille de colonne n°15 et ligne n°29, qui correspond à l'exutoire du bassin.
- Un historique de « Flux de ruissellement », de « Flux d'infiltration » et un historique du « Déficit du réservoir sol progressif ». On demande ces historiques pour une maille située dans la zone de sol n°1, c'est-à-dire n'importe quelle maille du domaine, par exemple dans la maille de colonne n°10 et ligne n°10.

21.4. LANCEMENT DES CALCULS ET EXAMEN DES RÉSULTATS

On lance les calculs et comme il n'y a aucune maille à charge imposée, on obtient un message d'avertissement signalant que le calcul initial en régime permanent pourrait être mal défini. On clique « OK » et les calculs s'effectuent en quelques secondes.

La Figure 112 montre que l'évolution du débit de la rivière à l'exutoire du bassin, et l'évolution du niveau piézométrique au piézomètre, sont bien simulés par le modèle.

La Figure 113 et la Figure 114 montrent respectivement l'évolution des flux de ruissellement et d'infiltration calculés, ainsi que l'évolution du pourcentage de ruissellement calculé.

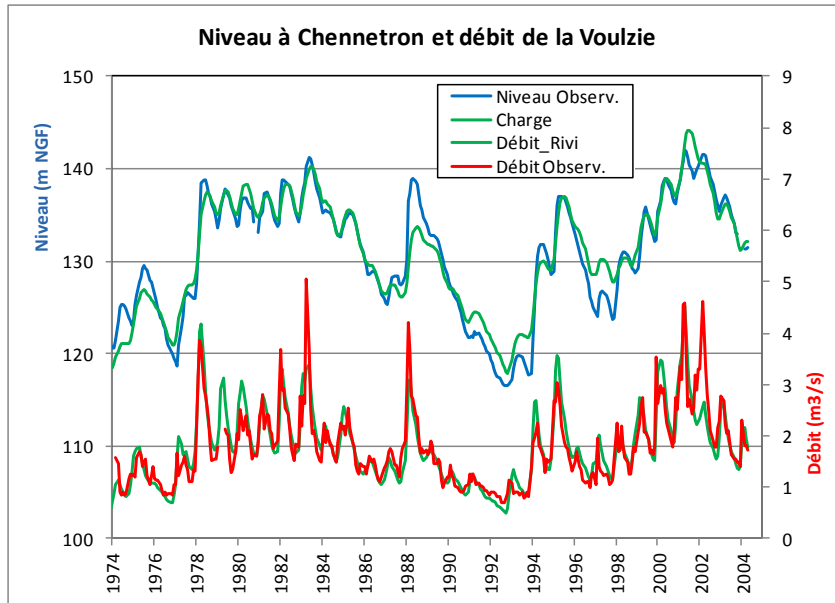


Figure 112 – Simulation avec le code MARTHE du débit de la Voulzie à Jutigny et du niveau du piézomètre Saint Martin Chenetron.

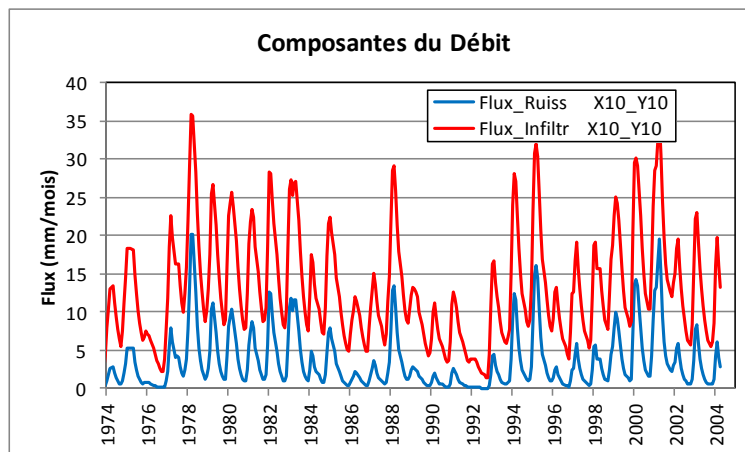


Figure 113 – Flux de ruissellement et flux d'infiltration résultant du bilan hydroclimatique GARDÉNIA couplé.

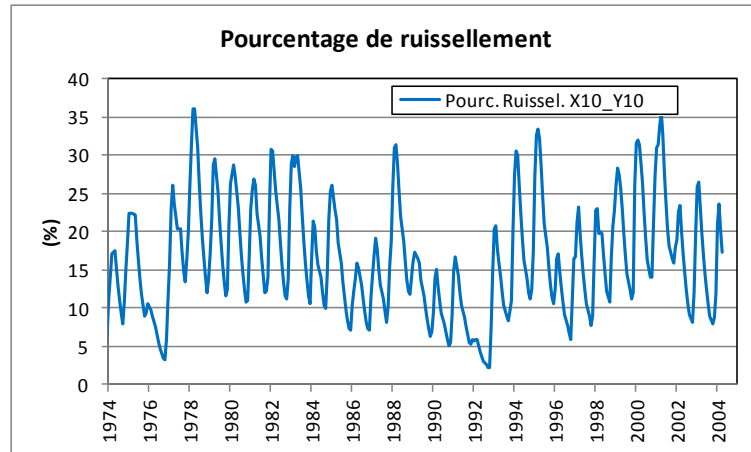


Figure 114 – Pourcentage de flux de ruissellement résultant du bilan hydroclimatique GARDÉNIA couplé.

22. Exemple n°12 : Simulation en radial d'un puits à pénétration partielle

Cet exemple montre comment simuler précisément les écoulements vers un puits pénétrant partiellement dans un aquifère. Il montre comment mettre en œuvre une modélisation en coupe verticale dans un maillage radial. Il illustre également l'utilisation de « Liaisons étanches ».

22.1. DÉFINITION DU SYSTÈME MODÉLISÉ

Les caractéristiques du système sont les suivantes (Figure 115) :

Géométrie :

- Le domaine est constitué d'un aquifère captif homogène de 40 mètres d'épaisseur, de la profondeur -0.25 m à -40.25 m, modélisé en radial jusqu'à une distance de 100 mètres.
- Cet aquifère est traversé par un forage de 10 cm de rayon et de 20 mètres de profondeur.

Paramètres hydrodynamiques :

- Perméabilité de l'aquifère : $K = 1 \cdot 10^{-4}$ m/s
- Porosité : $\omega = 10$ % dans l'aquifère, 100 % dans le forage.
- Débit de pompage = $2 \text{ m}^3/\text{h}$ (soit $5.555 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$)

État initial :

- La nappe est initialement à la charge +0.50 m.

Conditions aux limites :

- On considère que sur la limite externe, sur un rayon de 100 m, la charge est imposée à la charge +0.50 m.

Maillage :

On choisit des unités en centimètres.

On adopte un maillage radial en coupe verticale avec un découpage irrégulier. La distance radiale, de 0 à 10000 cm, est découpée en 24 colonnes, et la direction verticale, de -25 à -4025 cm, est découpée en 21 lignes irrégulières :

Origine : $x_0 = 0$, $y_0 = -4025$ cm.

Colonnes : 3 x 10 cm, 20, 2 x 25, 2 x 50, 100, 200, 6 x 250, 2 x 500, 2 x 750, 1000, 1250, 1500 et 1750 cm => Total = 10000 cm.

Lignes (de haut en bas) : 6 x 250, 2 x 125, 2 x 100, 2 x 50, 2 x 100, 7 x 250 cm => Total = 4000 cm.

Dans le fichier des couches [.layer] on définit :

1 = Maillage Radial [Rayon , Angle] (0=Non ; 1=Oui)
(Pour définir que le maillage est « radial [Rayon , Angle])

Dans le fichier des paramètres [.mart], on définit donc avec le préprocesseur :

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 Init.)
1e-6 = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour convergence
50 = Nombre d'itérations Internes pour le solveur [Déf=10]
Perman = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe : **Unités des données** :

1e-4 = Unité de Perméabilité des aquifères en m/s (ou m2)
m3/h = Unité de Débit en m3/s
cm = Unité de Charge, Altitude, Pression en m
cm = Unité de Coordonnée Horizontale des mailles en m
% = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-]

Paragraphe : **Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs** :

360 = Épaisseur de la Tranche de coupe (Unité de Coord. de Mailles ou degrés)
(donc la tranche verticale est de **360°**)
Vertic = Orientat. maillage : 0=Standard ; 1=Coupe Verti. : pesanteur sur Oy

Paragraphe : **Concentration et Trajectoires** :

Invers = Calcul de Trajectoires (1 = Oui ; 'INVERS' = -1 = Trajec. inverses)
(Pour tracer les trajectoires inverses)

Paragraphe : Initialisation avant calculs :

```

/PERMEAB/GRILLE      N: =1
/PERMEAB/MAILLE      C=      1L=  1:11 P=      1V=  1;
/ANISO_VERTI/MAILLE  C=      1L=  1:11 P=      1V=  1e6;
    (Très forte anisotropie verticale dans les mailles du puits)
/CHARGE/GRILLE       N: =50
/DEBIT/MAILLE        C=      1L=      1P=      1V=  -2;
    (Pompage dans la maille du haut du puits)
/DEBIT/MAILLE        C=      24L=      *P=      1V=  9999;
    (Limite à charge imposée dans la colonne externe : colonne n°24)
/POROSITE/GRILLE     N: =10
/POROSITE/MAILLE     C=      1L=      1P=  1:11 V=  100;
    (Porosité de 100 % dans le puits)
    (La porosité est utilisée uniquement pour les trajectoires ou les vitesses)

```

22.2. SIMULATION EN RÉGIME PERMANENT DU PUIT CRÉPINÉ SUR TOUTE LA PROFONDEUR**Lancement des calculs.**

Le calcul est réalisé en régime permanent. Dans le fichier des pas de temps [.pastp], avec le préprocesseur on demande la sauvegarde : de la « CHARGE », du « DEBIT », de la « VITESSE » et également : du débit du haut et du bas « DEBIT_HAU_BAS », du débit latéral « DEBIT_LATERAL », du débit latéral entrant « DEBIT_LAT_ENT ».

On lance alors les calculs qui s'exécutent en une fraction de seconde, et on vérifie qu'ils ont bien convergé, et que la nappe reste captive.

La Figure 115 montre la charge calculée au voisinage du puits jusqu'à une distance radiale de 3 mètres, avec les isovaleurs de charge. La charge dans le puits varie de 21.84 cm en bas à 21.68 cm en haut soit une différence de 1.6 mm sur 20 m. La charge y est donc quasiment uniforme. La Figure 116 montre la charge calculée au voisinage du puits jusqu'à une distance radiale de 25 mètres, avec les isovaleurs de charge et les trajectoires.

La Figure 117 montre le profil du débit dans le puits. Depuis le fond du puits jusqu'au du puits, le débit provenant de la nappe décroît de 0.144 à 0.095 m³/h par mètre de hauteur de puits.

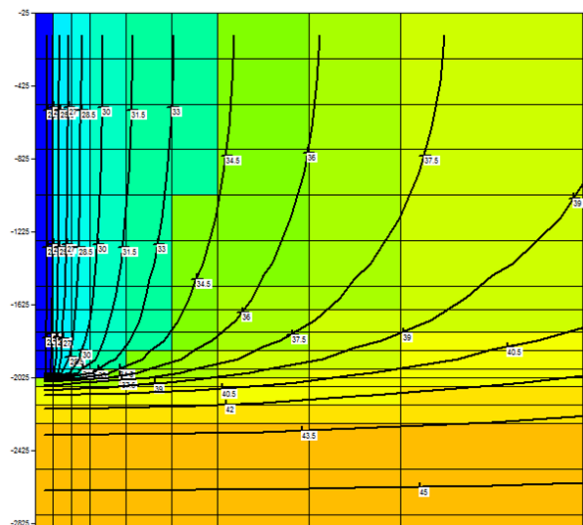


Figure 115 – Puits en coupe verticale : charge hydraulique calculée au voisinage du puits jusqu'à une distance radiale de 3 mètres. Le puits est situé à gauche, en bleu foncé, et l'échelle radiale est dilatée d'un facteur 10. Les courbes sont les isovaleurs de charge hydraulique.

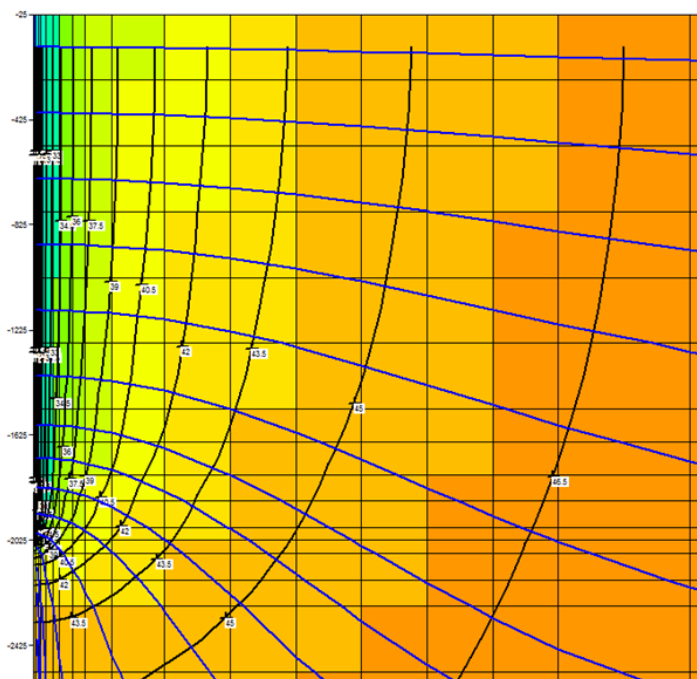


Figure 116 – Charge hydraulique calculée au voisinage du puits jusqu'à une distance radiale de 25 mètres. Isovaleurs de charge hydraulique et trajectoires.

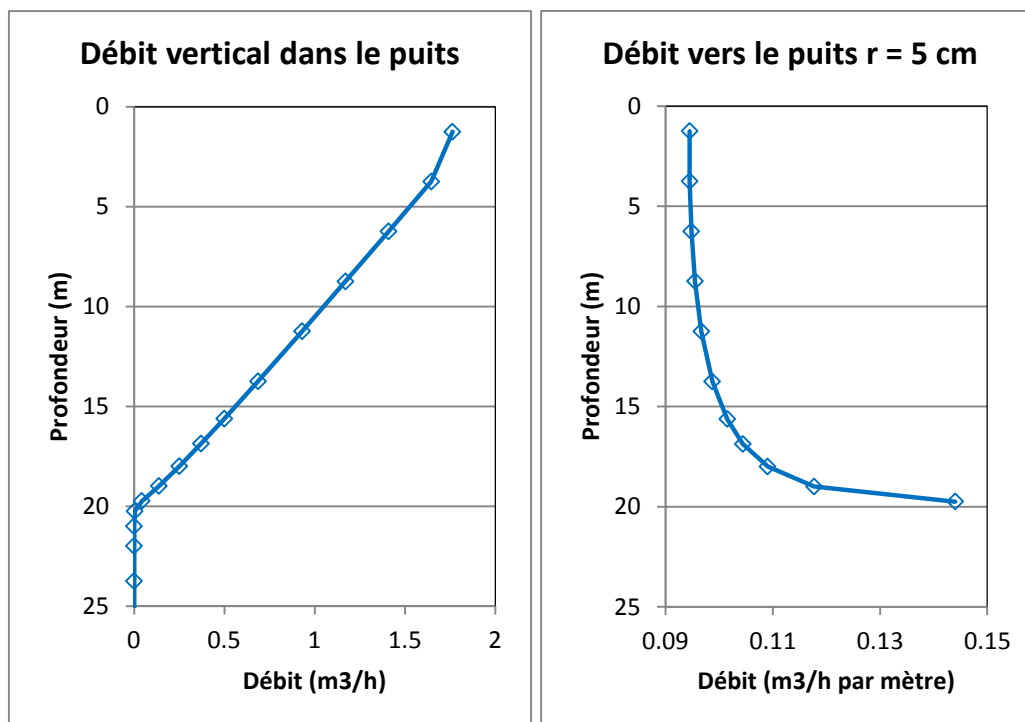



Figure 117 – Profils de débit dans le puits. à gauche : débit vertical dans le puits ; à droite débit venant de la nappe.

22.3. SIMULATION D'UN Puits CRÉPINÉ SUR UNE PARTIE DE LA PROFONDEUR

Pour cette 2^{ème} simulation, on suppose que le puits est crépiné uniquement sur les 10 mètres inférieurs, c'est-à-dire des lignes n°5 à n°11. Pour rendre le puits non crépiné sur les 4 mailles supérieures, on introduit des « liaisons étanches » entre la colonne n°1 et la

colonne n°2 de ces 4 mailles. Pour cela, dans WinMarthe, on utilise l'icône  de la barre d'outils de droite. On sélectionne la première maille, en double-cliquant dessus. On voit alors apparaître la boîte de dialogue de la Figure 118. On clique sur la liaison « Est » puis sur OK. On voit alors apparaître une liaison étanche en gris à l'Est de cette maille. On procède de la même manière pour les 3 autres mailles, lignes n°2 à n°3 du puits (Figure 119). On sauvegarde puis on lance les calculs.

La Figure 120 montre la charge hydraulique obtenue à proximité du puits. La Figure 121 montre le profil de débit dans le puits. Le débit provenant de la nappe varie de 0.187 à 0.256 m³/h par mètre de hauteur de puits.

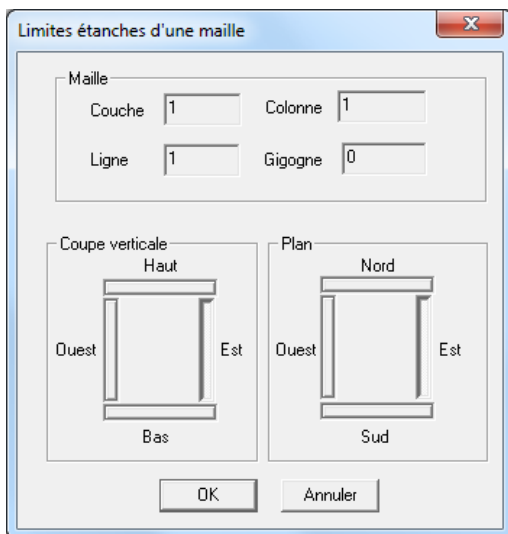


Figure 118 – Introduction d’une liaison étanche à l’Est de la maille supérieure du puits.

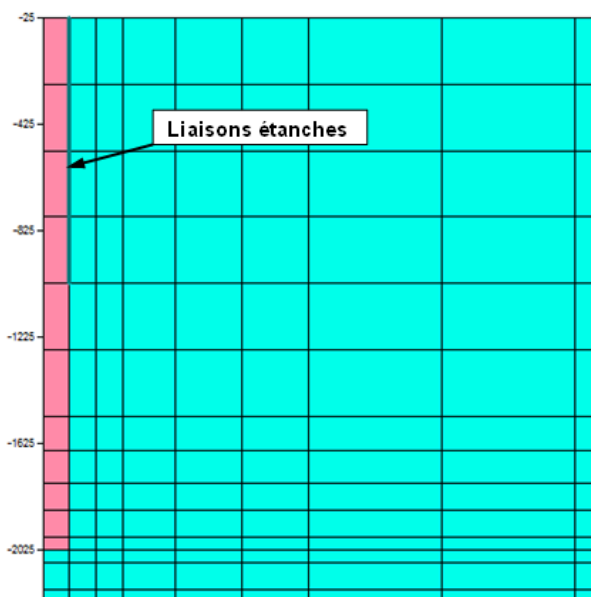


Figure 119 – Puits en coupe verticale, en rose, avec liaisons étanches à l’Est des quatre mailles supérieures.

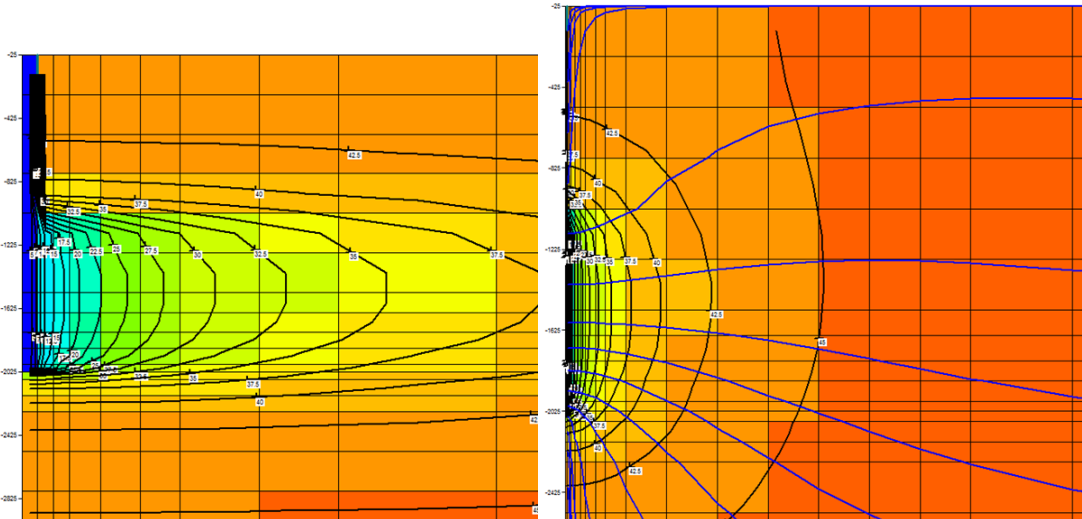


Figure 120 – Charge hydraulique au voisinage du puits.
 Dessin de gauche : jusqu'à une distance radiale de 3 mètres (échelle radiale dilatée).
 Dessin de droite : jusqu'à une distance radiale de 25 mètres avec visualisation des trajectoires.

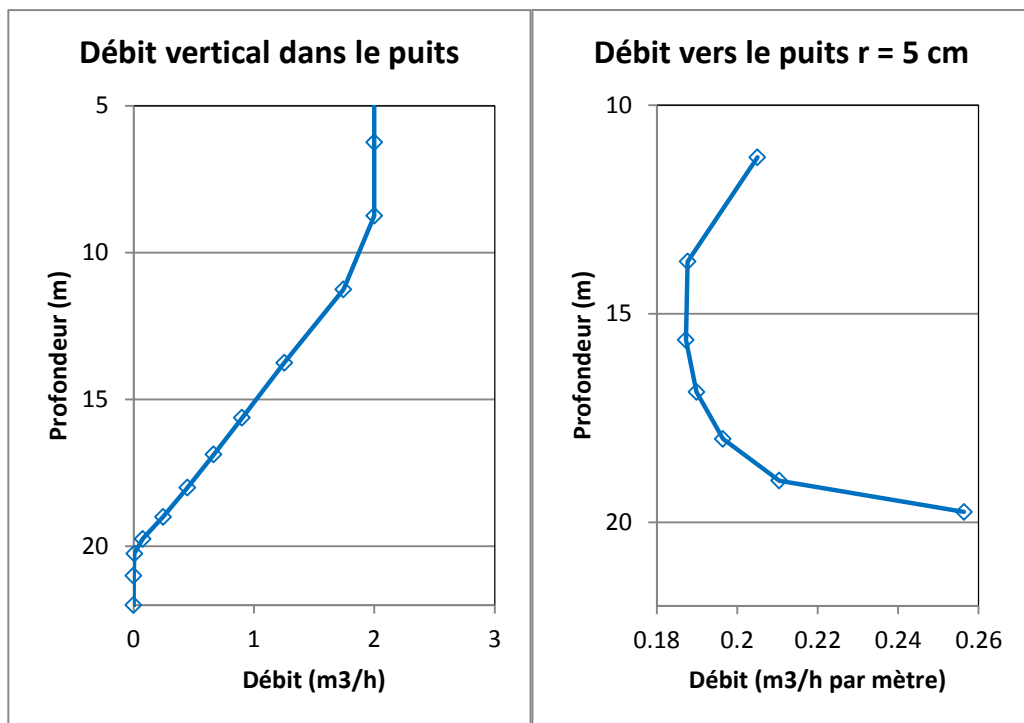


Figure 121 – Profils de débit dans un puits crépiné de 10 m à 20 m de profondeur :
 à gauche : débit vertical dans le puits ; à droite débit venant de la nappe.

23. Exemple n°13 : Simulation d'écoulement de gaz pour réaliser du « venting »

Cet exemple, montre comment simuler des écoulements de gaz, par exemple pour dimensionner un dispositif de « venting ». Dans cet exemple on prend uniquement en compte l'écoulement du gaz, en supposant que les variations de pression étant faibles ont peu d'influence sur la saturation en eau.

Cet exemple montre également comment réaliser un maillage radial plan (rayon , angle).

23.1. DÉFINITION DU SYSTÈME MODÉLISÉ

Les caractéristiques du système sont les suivantes (Figure 122) :

Géométrie :

- Le domaine est constitué d'une épaisseur d'aquifère de 20 mètres d'épaisseur, recouverte par une formation imperméable, ou bien par une bâche isolante. On suppose par exemple que la zone non saturée est située de l'altitude 0 mètre à l'altitude -20 mètres. L'extension de l'aquifère est un carré de 400 m sur 400 m.
- Cet aquifère est traversé en son centre par un pompage qui pompe l'air de la zone non saturée (supposée quasiment saturée en air). L'aquifère est mis en communication avec l'extérieur par trois « puits à l'air » positionnés sur un triangle équilatéral ; ces puits recoupent également toute l'épaisseur de la zone non saturée.

Paramètres hydrodynamiques :

- Perméabilité intrinsèque de l'aquifère : $K = 1. 10^{-12} \text{ m}^2$.
- Porosité : $\omega = 15 \%$ de gaz.
- Masse molaire du gaz = 29 g / mole (ce qui correspond à l'air).
- Débit de pompage = 80 kg/h.
- La température est de 12°C.

État initial :

- Le gaz est à pression atmosphérique.

Maillage :

On réalise la modélisation en monocouche. On adopte un maillage régulier formé de 41 lignes de 41 colonnes de mailles carrées de 10 mètres de côté avec l'origine du maillage au point de coordonnées -5 m , -5 m. Le maillage s'étend donc de -5 m à 405 m dans chaque direction.

Dans le fichier des paramètres [.mart] on définit avec le préprocesseur :

Paragraphe : Contrôle de la Résolution Hydrodynamique :

0 = Nombre Maxi d'itérations par pas de temps calcul suivant le pas n°0
 100 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Init.)
 1e-7 = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour convergence
 Perman = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe : Unités des données :

1e-12 = Unité de Perméabilité des aquifères en m/s (ou **m2**)
 2.78e-4 = Unité de Débit en m3/s (ou **kg/s** si Gaz)
 % = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-] ['%' si en %]
Intrins = Type de Perméab. : (0=Déf=Perméab. à l'eau ; 1=Perméab intrinsèque)
kPa = Unité de Pression de Gaz en m d'eau (Déf = unité de charge)
 (Pression du gaz en kilo-Pascals)

Paragraphe : Température , effets Thermiques :

12 = Température de référence [viscosité, Gaz, Chimie, etc.] [Déf=20°C]

Paragraphe : Eau, Gaz, Huile, Eau Salée :

0 = Calcul de la Phase Eau [0=Non ; 1=Oui]
 1 = Calcul de la Phase Gaz (Air) [0=Non ; 1=Oui ; 2=Toujours Atmosphérique]

Paragraphe : Écoulement de Gaz :

0 = Masse molaire du gaz (grammes) [Déf=air=29g]
 (Donc on prend la masse molaire par défaut de 29 g/mol)
Atmosph = Définition de la Press du Gaz [Déf=0=Pression - P_atmosph. ;
 1=Pression absolue]
 (Donc on définit la pression par rapport à la pression atmosphérique)

Paragraphe : Initialisation avant calculs :

```
/DEBIT_GAZ/MAILLE C= 12L= 16P= 1V= 9999;
/DEBIT_GAZ/MAILLE C= 30L= 16P= 1V= 9999;
/DEBIT_GAZ/MAILLE C= 21L= 31P= 1V= 9999;
(Pression imposée [à la pression atmosphérique] dans les 3 puits à l'air)
/DEBIT_GAZ/MAILLE C= 21L= 21P= 1V= -80;
(Pompage au centre du modèle : 80 kg/heure)
```

23.2. SIMULATION EN RÉGIME PERMANENT

Lancement des calculs.

Le calcul est réalisé en régime permanent. Dans le fichier des pas de temps [.pastp], avec le préprocesseur, on demande la sauvegarde de : la pression du gaz « PRESS_GAZ », le débit de gaz « DEBIT_GAZ », la masse volumique du gaz « MASSE_VOL_GAZ »

l'amplitude de la vitesse « VITESS_AMPLIT » et de la « VITESSE ». En fait la vitesse et l'amplitude de la vitesse correspondent en réalité au débit massique divisé par la section et par la porosité. Ils sont donnés pour visualiser les écoulements.

On lance alors les calculs qui s'exécutent en une fraction de seconde, et on vérifie qu'ils ont bien convergé. La Figure 122 montre le champ de pression de gaz calculée, la Figure 123 montre la masse volumique du gaz qui est de l'ordre de 1 à 1.2 kg/m³, et la Figure 124 montre l'amplitude relative de la vitesse.

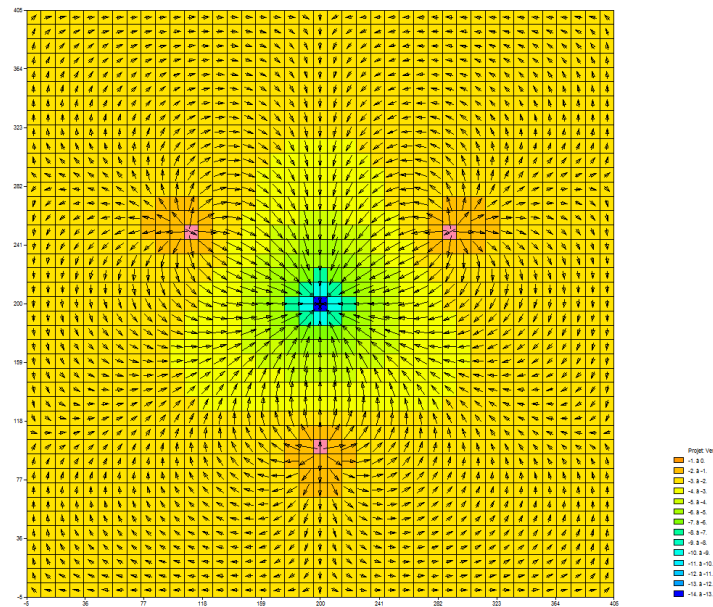


Figure 122 – Venting en régime permanent : pression du gaz calculée en kPa.

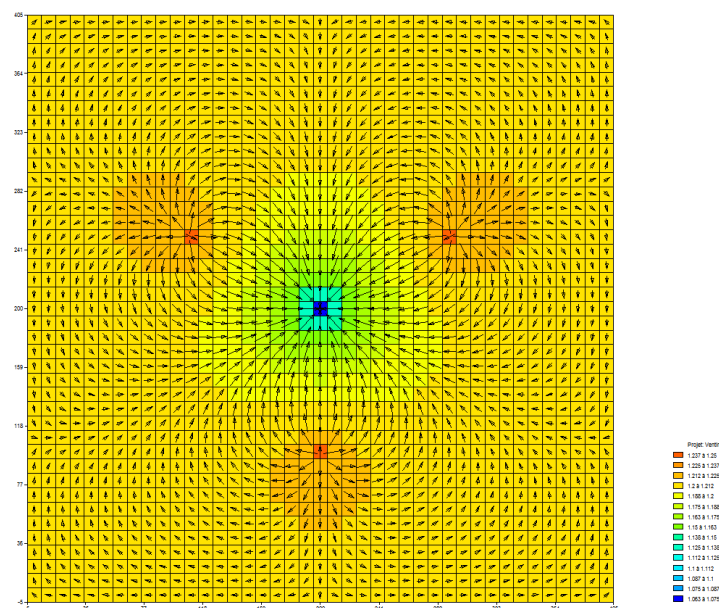


Figure 123 – Venting : masse volumique du gaz calculée en kg/m³.

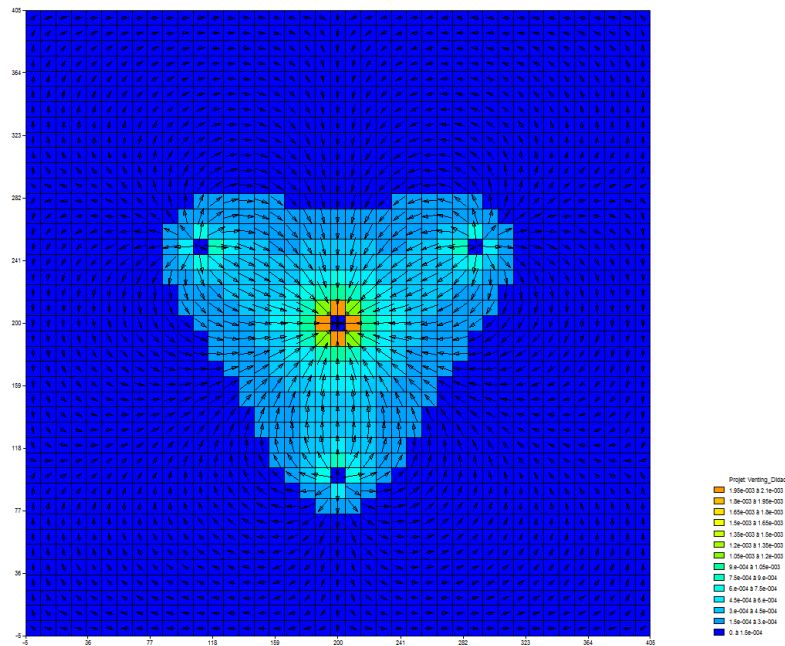


Figure 124 – Venting : amplitude relative de la vitesse du gaz.

23.3. MODÉLISATION FINE AVEC UN MAILLAGE RADIAL PLAN (RAYON , ANGLE)

Pour étudier plus finement les écoulements au voisinage du puits on va réaliser un maillage radial (rayon , angle), très raffiné au voisinage du puits. Compte tenu de la symétrie, on a modélisé uniquement le domaine compris dans un angle de 120°. En fait il aurait suffi de modéliser un secteur d'angle de 60°. On a modélisé les écoulements compris le secteur d'angle qui s'étend de -30° à +90° (dans le sens trigonométrique). En effet les deux rayons à -30° et à +90° correspondent à des lignes de courant donc à des limites étanches.

Maillage :

Le domaine à modéliser est formé de 37 arcs de cercles de 120°, centrés sur le puits, et de 23 rayons découpant les 120°

On crée donc un nouveau maillage irrégulier formé de 37 colonnes et 23 lignes.

- Les 37 colonnes correspondent à 37 couronnes de largeurs croissantes de 0.1 m à 10 m, couvrant au total une extension de 250 mètres.
- Les 23 lignes correspondent à 23 secteurs d'angles allant de -30° à +90°. En fait, pour plus de lisibilité on a gradué ces secteurs de 0° à 120° Le puits à l'air est situé à 100 m de distance, à un angle de 60°, ce qui correspond à la maille de colonne n°22, ligne n°12.

Les largeurs, en mètres, des 37 colonnes sont précisées dans le Tableau 7.

0.1	0.14	0.2	0.3	0.38	0.55	0.73	1	1.4	2	3.2	4	5	8	10
10	10	10	10	10	8	10	10	10	10	10	10	10	10	10
10	10	10	10	10	10	10								

Tableau 7 – Largeurs en mètres des 37 colonnes du maillage radial.

Les largeurs des 23 lignes sont toutes de 6°, sauf les lignes n°10 et n°14 qui ont une largeur de 3° et les lignes n°11 à n°13 qui ont une largeur de 2°. Ce découpage irrégulier a été choisi pour bien simuler le puits à l'air, situé en ligne n°12.

Puits :

Compte tenu de ce maillage : Le puits de pompage correspond à toutes les mailles de la colonne n°1. On a réparti le débit proportionnellement aux largeurs des lignes :

- -1.33333 : dans toutes les lignes de 6° de cette colonne
- -0.66667 : dans les deux lignes de 3° (lignes n°10 et n°14)
- -0.44444 : dans les trois lignes de 2° (lignes n°11 à n°13)

Soit au un débit total de -26.6666 kg/h, qui est le 1/3 du débit de -80 kg/h, puisqu'on ne modélise que le 1/3 du domaine.

Les seules modifications à apporter sont :

Dans le fichier des paramètres [.mart] :

Paragraphe : Initialisation avant calculs :

```

/DEBIT_GAZ/MAILLE      C=  22L=   12P=   1V=   9999;
  (Pression imposée [à la pression atmosphérique] dans le puits à l'air)
/DEBIT_GAZ/MAILLE      C=   1L=   *P=   1V= -1.333333;
/DEBIT_GAZ/MAILLE      C=   1L=   10P=   1V= -0.666667;
/DEBIT_GAZ/MAILLE      C=   1L=  11:13 P=   1V= -0.444444;
/DEBIT_GAZ/MAILLE      C=   1L=   14P=   1V= -0.666667;
  (Puits de Pompage : débit -26.666 kg/h réparti selon la largeur des mailles)

```

Dans le fichier des couches [.layer] on définit :

```

1 = Maillage Radial [Rayon , Angle] (0=Non ; 1=Oui)
  (Pour définir que le maillage est « radial [Rayon , Angle] )

```

On lance alors les calculs qui s'exécutent en une fraction de seconde.

La Figure 125 montre le champ de pression calculé dans ce schéma radial. Sur cette figure les abscisses sont les distances radiales et les ordonnées sont les angles, de 0° à 120°. Le calcul est réellement réalisé en coordonnées radiales, et seule la représentation des champs simulés est donnée sous forme de coordonnées cartésiennes (rayon , angle).

La Figure 126 montre deux profils de pression jusqu'au voisinage du puits de pompage, qui a un rayon de 0.1 mètre, donc un centre de maille à la distance radiale 0.05 mètre. Le profil

bleu passe par un « puits à l'air », tandis que le profil rouge correspond à la ligne n°1, en limite du maillage, c'est-à-dire à mi-distance entre deux « puits à l'air » (correspondant à l'angle de 120°). Il apparaît qu'au puits de pompage la pression décroît de plus de 15 kPa entre la distance de 10 m, correspondant au maillage cartésien, et la distance de 0.1 m du maillage radial. Ce dernier apporte donc une précision nettement accrue.

Pour réaliser la Figure 126, on a importé sous Excel® le fichier « chasim.out » contenant le champ de pression calculée. Ce fichier est facilement importable sous Excel, ou in tableur équivalent. Il suffit alors de réaliser un graphique de la ligne n°1 et de la ligne n°12.

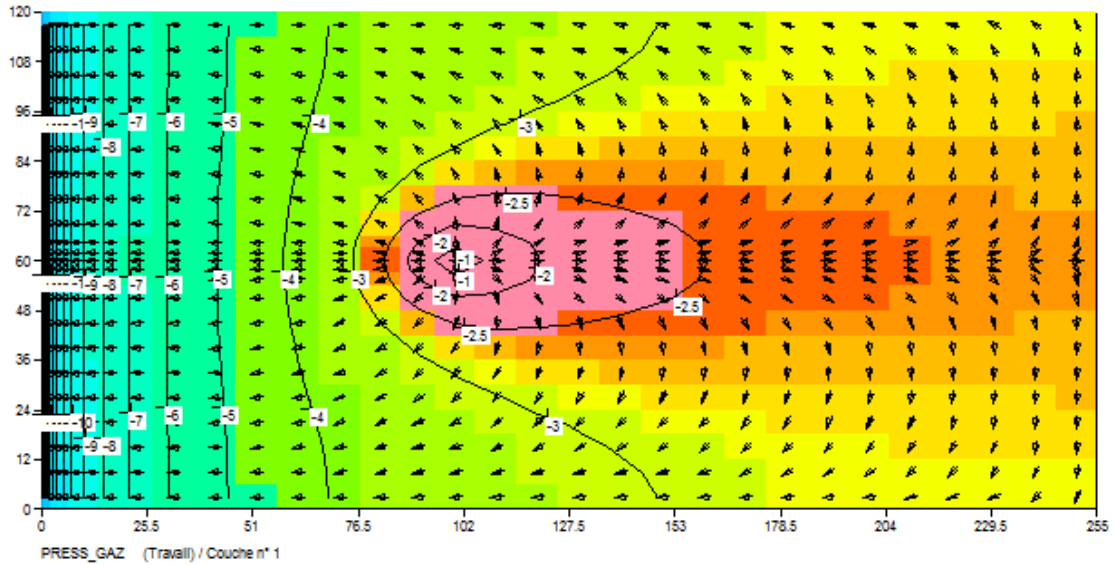


Figure 125 – Venting avec un maillage radial : pression du gaz calculée en kPa. (Distances radiales en abscisses et angles, de 0° à 120° en ordonnées).

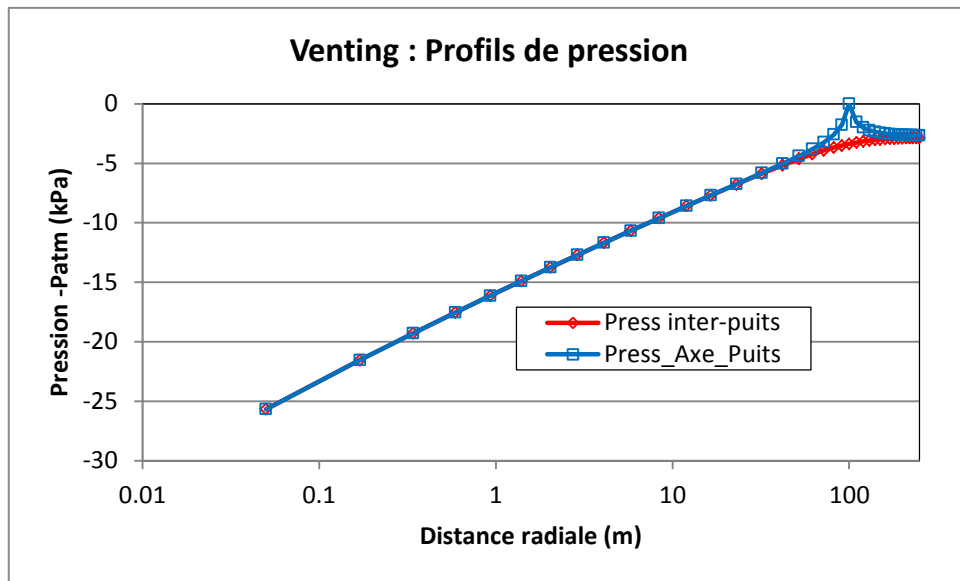


Figure 126 – Venting avec un maillage radial : profils de pression du gaz jusqu'au voisinage du puits.

24. Exemple n°14 : Transport avec adsorptions de Langmuir et de Freundlich

Cet exemple, montre comment simuler des transferts de masse en schématisant les interactions avec la matrice poreuse selon l'isotherme de Langmuir ou l'isotherme de Freundlich.

L'exemple présenté, décrit par Grove et Stollenwerk (1984), est cité par Zheng et Wang (1998). Il s'agit d'un écoulement à travers une colonne avec un échelon de concentration.

24.1. DÉFINITION DU SYSTÈME MODÉLISÉ

Les caractéristiques du système sont les suivantes :

Géométrie :

Le domaine est constitué d'une colonne horizontale de grande dimension, de section 1 m^2 , dans laquelle circule un écoulement avec une vitesse réelle de 0.1 cm/s .

La colonne choisie a pour dimensions :

- Longueur = 50 cm
- Largeur = 1 m
- Épaisseur = 1 m
- Soit une section de 10^{+4} cm^2 .

On choisit comme unités :

- Longueur = cm
- (Charge = m)
- Débit = cm^3/s
- Temps = secondes
- Concentration = $\mu\text{g}/\text{cm}^3$

Conditions aux limites :

On introduit un débit sur la limite amont, située à gauche, et on impose la charge hydraulique à 0 m sur la limite aval, située à droite. Pour avoir un écoulement en charge, et donc une vitesse uniforme : on fixe le toit à l'altitude -1 m, et le substratum à l'altitude -2 m.

Le débit rentre par la limite amont avec une « Concentration extérieure » égale à $50 \mu\text{g}/\text{cm}^3$ pendant 160 secondes, puis à la concentration 0 à partir de cette date.

On calcule l'évolution au cours du temps de la concentration à une distance de 8 cm en aval du point d'injection.

Maillage :

On adopte un maillage régulier formé d'une ligne de 200 mailles de 0.25 cm, soit 50 cm de long.

Paramètres hydrodynamiques et de transport :

- Perméabilité : $K = 1. 10^{-3} \text{ m/s}$
(Cette perméabilité n'a aucune influence sur le transport. Elle sert uniquement à avoir une charge hydraulique raisonnable).
- Porosité : $\omega = 37 \%$
- Soit un débit dans la colonne n°1 : $Q_{\text{amont}} = 0.1 \text{ cm/s} \times 37\% \times 10^4 \text{ cm}^2 = 370 \text{ cm}^3/\text{s}$.
- Dispersivité = 0.01 m
- Diffusion moléculaire = 0.

Le nombre de Péclet est égal à « Dispersivité / Longueur des mailles », d'où $Pe = 0.25$

Dans le fichier des paramètres [.mart] on définit avec le préprocesseur :

Paragraphe : Contrôle de la Résolution Hydrodynamique :

```

0 = Nombre Maxi d'itérations par pas de temps calcul suivant le pas n°0
1 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Init.)
1e-6 = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour convergence
Perman = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]
    
```

Paragraphe : Unités des données :

```

cm3/s = Unité de Débit                en m3/s (ou kg/s si Gaz)
Sec = Unité de Temps (des Pas de modèle) (sec, min, heu, jou, etc.)
cm = Unité de Coordonnée Horizontale des mailles en m
mug/L = Unité de Concentration en kg/m3
      (mug est l'abréviation utilisée pour « microgramme par litre »)
% = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-] ['%' si en %]
    
```

Paragraphe : Initialisation avant calculs :

```

/POROSITE/GRILLE      N: =37
/H_TOPOGR/GRILLE     N: =-1
/H_SUBSTRAT/GRILLE   N: =-2
/DEBIT/MAILLE        C=   1L=   1P=   1V=   370;
/CONCEN_EXT/MAILLE   C=   1L=   1P=   1V=   50;
/DEBIT/MAILLE        C=  200L=   1P=   1V=  9999;
    
```

Pour obtenir l'évolution de la concentration à 8 cm de distance, on demande l'historique de la concentration dans la colonne n°32, donc à une distance sensiblement égale à 8 cm du point d'injection. Dans ce but on crée un fichier historique avec la ligne suivante :

```

/Concentr /HISTO/ = /MAIL:C= 32L= 1P= 1;
    
```

Transport de masse :

Pour modéliser le transport de masse on adopte le schéma TVD et un pas de temps régulier de 10 secondes. Comme les mailles ont une largeur de 0.25 cm, pour une vitesse

de 0.1 cm/s, le pas de temps de calcul ne doit pas dépasser 2.5 secondes pour garantir un nombre de Courant qui ne dépasse pas 1. Tous les pas de temps seront donc automatiquement découpés en 4 sous-pas de temps.

24.2. CALCUL AVEC L'ISOTHERME DE LANGMUIR

Paramètres d'adsorption selon l'isotherme de Langmuir :

- Densité sèche du milieu poreux : $Rho_S = 1587 \text{ kg/m}^3$
- Constante d'équilibre de Langmuir : $K_L = 100 \text{ L/mg}$
- Capacité d'adsorption de Langmuir : $S_{MAX} = 3 \cdot 10^{-3} \text{ } \mu\text{g/g}$

Dans MARTHE on n'introduit pas directement la densité sèche. Les deux paramètres de Langmuir sont introduits sous la forme :

- $Conc_{REF} = 1 / K_L$: en unité utilisateur de concentration.
- $Conc_{MAX} = Rho_S \times S_{MAX}$: en unité utilisateur de concentration.

Compte tenu de ces définitions on a :

- $Conc_{REF} = 1 / K_L = 0.01 \text{ mg/L}$
 $= \underline{10 \text{ } \mu\text{g/cm}^3}$
- $Conc_{MAX} = Rho_S \times S_{MAX} = 1587 \text{ kg/m}^3 \times 3 \cdot 10^{-3} \text{ } \mu\text{g/g}$
 $= 1587 \text{ g/cm}^3 \times 3 \cdot 10^{-3} \text{ } \mu\text{g/g}$
 $= \underline{4.761 \text{ } \mu\text{g/cm}^3}$

On introduit donc dans le fichier des paramètres [.mart]

Paragraphe : **Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité** :

TVD = Schéma de Transport
0 = Diffusion moléculaire (m2/s) [* = Spatialisée]
0.01 = Dispersivité Longitudinale (m) [* = Spatialisée]
2 = Nombre max d'itérations pour une sorption de schéma Langmuir (déf=20)

Paragraphe : **Concentration et Trajectoires** :

1 = Calcul de la Concentration
1e-5 = Variation moyenne de Concentration entre 2 itérat. pour convergence
Transit = Régime du Transport de Concentration [0=Transitoire ; 1=Permanent]
Langm = Type de Sorption [0=Non = Linéaire ; 1= <u>Langmuir</u> ; 2=Freundlich]
10 = Paramètre de Sorption n°1 [<u>Concent Refer Langmuir</u> ; Kfv_Freundlich]
4.761 = Paramètre de Sorption n°2 [<u>Site Total Langmuir</u> ; Expos_Freundlich]

On réalise les calculs pendant une période de 500 secondes.

Résultats :

On lance les calculs qui se terminent après quelques secondes. L'historique de concentration calculée de la colonne n°32 est dans le fichier « historiq.prn » : La Figure 127 présente l'évolution de la concentration, comparée aux calculs de Zheng et Wang (1998).

24.3. CALCUL AVEC L'ISOTHERME DE FREUNDLICH

Paramètres d'adsorption selon l'isotherme de Freundlich :

- Densité sèche du milieu poreux : $\text{Rho}_S = 1587 \text{ kg/m}^3$
- Constante d'équilibre de Freundlich : $K_F = 0.3 (\mu\text{g/g}) \cdot (\text{L/mg})^B$
- Exposant de l'adsorption de Freundlich : $B = 0.7$ (adimensionnel)

On remarque que la constante d'équilibre de Freundlich K_F a une unité complexe.

Dans MARTHE on n'introduit pas directement la densité sèche. Le premier paramètre de Freundlich est introduit sous la forme de la constante d'équilibre volumique K_{FV} exprimée en « unité utilisateur de concentration » à la puissance $(1 - B)$:

$$K_{FV} = (\text{Rho}_S \times K_F) \text{ exprimé en (unité utilisateur de concentration)}^{(1-B)}$$

$$K_{FV} = 1587 \text{ g/L} \times 0.3 (\mu\text{g/g}) \cdot (\text{L/mg})^{0.7} \text{ qu'il faut exprimer en } (\mu\text{g/L})^{0.3}$$

$$K_{FV} = 476.1 \mu\text{g/L} \times (\text{L/mg})^{0.7} = 476.1 \mu\text{g/L} \times (\text{L}/1000 \mu\text{g})^{0.7} = 476.1 \times 1000^{-0.7} (\mu\text{g/L})^{0.3}$$

$$\text{Soit : } \underline{K_{FV} = 3.7818 (\mu\text{g/L})^{0.3}}$$

Le deuxième paramètre est l'exposant : $\underline{B = 0.7}$

On introduit donc dans le fichier des paramètres [.mart] :

Paragraphe : **Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité** :

```

TVD = Schéma de Transport
    0 = Diffusion moléculaire (m2/s) [* = Spatialisée]
    0.01 = Dispersivité Longitudinale (m) [* = Spatialisée]
    8 = Nombre max d'itérations pour une sorption de schéma Langmuir (déf=20)
    (On augmente ce nombre d'itérations car les interactions sont plus fortes)
  
```

Paragraphe : **Concentration et Trajectoires** :

```

    1 = Calcul de la Concentration
    1e-5 = Variation moyenne de Concentration entre 2 itérat. pour convergence
Transit = Régime du Transport de Concentration [0=Transitoire ; 1=Permanent]
Freund = Type de Sorption [0=Non = Linéaire ; 1=Langmuir ; 2=Freundlich]
    3.7818 = Paramètre de Sorption n°1 [Concent_Refer_Langmuir ; Kfv_Freundlich]
    0.7 = Paramètre de Sorption n°2 [Site_Total_Langmuir ; Expos Freundlich]
  
```

On réalise les calculs pendant une période de 1500 secondes.

Résultats :

On lance les calculs qui se terminent après quelques secondes. L'historique de la concentration calculée de la colonne n°32 est dans le fichier « historiq.prn » : La Figure 128 présente l'évolution de la concentration, comparée aux calculs de Zheng et Wang (1998).

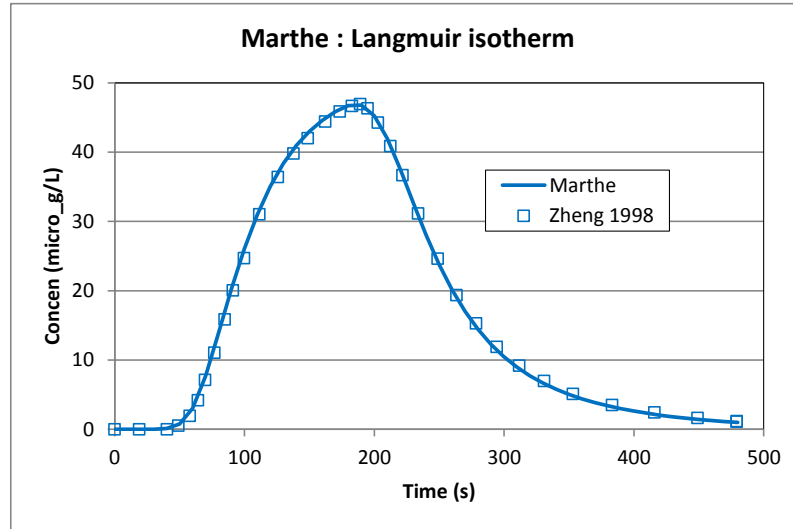


Figure 127 – Transport avec adsorption selon l'isotherme de Langmuir.

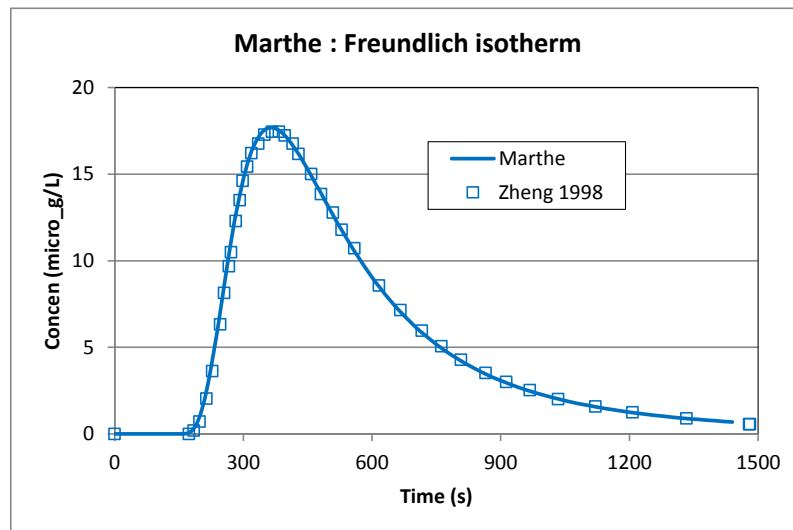


Figure 128 – Transport avec adsorption selon l'isotherme de Freundlich.

25. Exemple n°15 : Transport multicomposant avec dégradation en chaîne

Cet exemple, montre comment simuler des transferts de masse multicomposant avec dégradation en chaîne. Le cas le plus classique est un schéma en « série » avec composant n°1 → composant n°2 → composant n°3, etc.

Trois exemples sont présentés. Ils sont tous relatifs à des écoulements en 1D à travers une colonne infinie ou semi-infinie :

- Nitrification : $\text{NH}_4^+ \rightarrow \text{NO}_2^- \rightarrow \text{NO}_3^-$
Cet exemple est décrit par Cho (1971) et van Genuchten (1985) qui en donne une solution analytique et un logiciel pour la calculer.
- Dégradation en chaîne de 4 éléments : solution de Bauer et al. (2001).
- Dégradation en chaîne d'éléments radioactifs : $^{234}\text{U} \rightarrow ^{230}\text{Th} \rightarrow ^{226}\text{Ra}$
Cet exemple est décrit par van Genuchten (1985) qui donne une méthode de calcul de la solution analytique.

25.1. EXEMPLE DE LA NITRIFICATION

Les caractéristiques du système sont les suivantes :

- Milieu semi-infini
- Vitesse réelle de filtration : 1 cm/h
- Diffusion moléculaire : $5 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$
- Coefficients de retard (NH_4 ; NO_2 ; NO_3) = (2 ; 1 ; 1)
- Temps de ½ dégradation (NH_4 ; NO_2 ; NO_3) = (138.63 h, 6.93 h, infini)
équivalent à des constantes de dégradation = (0.005 h^{-1} , 0.1 h^{-1} , 0 h^{-1})
- Date de fin de calcul : 200 heures.

La code de calcul MARTHE utilise comme paramètre de dégradation le temps de ½ dégradation ou « demi-vie » t_d , qui est le temps après lequel une concentration est divisée par 2 sous l'effet du processus de dégradation exponentielle. Le paramètre contrôlant la dégradation est parfois donné sous forme de constante de dégradation λ exprimée en inverse de temps. La relation entre ces deux paramètres est :

$$t_d = \text{Ln}(2) / \lambda \quad [\text{où } \text{Ln}(2) = \text{Logarithme népérien de } 2 = 0.6931]$$

Par exemple :

$\lambda = 1.389 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ correspond à $t_d = 4.9906 \cdot 10^5$ secondes (soit 138.63 heures).

$\lambda = 0.005 \text{ h}^{-1}$ correspond à $t_d = 138.63 \text{ h}$.

Géométrie :

Le domaine semi infini est constitué d'une colonne horizontale de grande dimension, de section 1 m^2 , soumise à un écoulement de vitesse réelle égale à 1 cm/h. Compte tenu de

cette vitesse, de la durée de 200 heures et de la faible diffusion moléculaire, on choisit une colonne de 250 cm de long.

La colonne choisie a pour dimensions :

- Longueur = 250 cm
- Largeur = 100 cm
- Épaisseur = 100 cm
- Soit une section de 10^4 cm^2 .

On choisit comme unités :

- Longueur = cm
- (Charge = cm)
- Débit = cm^3/h
- Temps = heures
- Concentration = sans importance

Conditions aux limites :

On introduit un débit sur la limite amont, située à gauche, et on impose la charge hydraulique à 0 m sur la limite aval, située à droite. Pour avoir un écoulement en charge, donc à vitesse uniforme : on fixe le toit à l'altitude -100 cm, et le substratum à l'altitude -200 cm.

Maillage :

On adopte un maillage régulier formé d'une ligne de 625 mailles de 0.4 cm, soit au total 250 cm de long.

Paramètres hydrodynamiques et de transport :

- Perméabilité : $K = 1 \text{ cm/h}$
(La valeur de cette perméabilité n'a aucune influence sur le transport. Elle sert uniquement à avoir une charge hydraulique raisonnable).
- Porosité : $\omega = 10 \%$
- Soit un débit dans la colonne n°1 : $Q_{\text{amont}} = 1 \text{ cm/h} \times 10\% \times 10^4 \text{ cm}^2 = 1000 \text{ cm}^3/\text{h}$.
- Dispersivité = 0 m
- Diffusion moléculaire = $5 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$

Le nombre de Péclet numérique est égal à 2.2

Transport de masse :

Le débit rentre par la limite amont avec une « Concentration extérieure » en NH_4^+ égale à 1. On calcule le profil de concentration des 3 composants après 200 heures.

Pour modéliser le transport de masse on adopte le schéma TVD. On crée 5 pas de temps de modèle de 40 heures, chacun subdivisé en 10 sous-pas de temps, soit 50 pas de temps de 4 heures ce qui correspond à nombre de Courant numérique égal à 10. Avec le schéma de transport TVD le nombre de Courant ne doit pas dépasser 1. Chaque pas de temps sera donc automatiquement découpé en 10 sous-pas de temps.

Il est aussi possible de réaliser le transport par la méthode des différences finies. En revanche le transport par la méthode MOC n'est pas opérationnel dans cette version.

25.1.1. Mise en œuvre de la modélisation

Création du maillage :

On crée un nouveau projet WinMarthe. Le maillage est défini par l'origine : $X0 = -0.2$ cm ; $Y0 = -50$ cm, 1 ligne de 625 colonnes, 1 couche, largeur des colonnes = 0.4 cm, largeur de la ligne = 100 cm, altitude topographique = -100 cm, épaisseur = 100 cm.

Profil d'utilisation :

Avec le préprocesseur, on crée un profil d'utilisation avec les options suivantes :

- Régime transitoire
- Transport de masse
- Multicomposant : dégradation en chaîne
- Utilisation avancée

```
1 = Régime Transitoire
1 = Transport de masse Classique
1 = Couplage Géochim ou Multicomp. (1=SCS, Chaîne ; 2=PHREEQC ; 3=TREACT)
1 = Utilisation Avancée
```

Transport de masse : champs multicomposants :

En transport de masse multicomposant un certain nombre de champs de données sont multicomposants :

- La concentration : « CONCENTR »,
- La concentration extérieure : « CONCEN_EXT »,
- La concentration de la recharge : « CONCEN_RECH »,
- Le débit massique : « QMASS_CONC »,
- Le Dirac de masse injecté « MASS_CONCEN ».

Les noms des fichiers contenant (éventuellement) ces champs ne sont pas donnés dans le fichier projet puisqu'il y a un seul fichier, donc un seul nom de fichier, par composant.

On peut introduire un tel champ multicomposant à la fin du fichier des paramètres, dans le paragraphe « Initialisation avant calculs », ou dans le « fichier des pas de temps », au pas de temps n°0. On peut, par exemple, introduire un champ de concentration sous forme de « Modification » par « GRILLE ». Comme on a choisi un profil d'utilisation avec dégradation en chaîne, donc multicomposant, le préprocesseur demande le numéro du composant auquel on affecte la concentration (ou le débit massique). De la même manière le numéro du composant doit être précisé lors des modifications par « MAILLE », par « COUCHE » ou par « ZONE ».

Fichier des paramètres :

Dans le fichier des paramètres [.mart] on définit avec le préprocesseur :

Paragraphe : Pas de Temps et sous-pas de temps :

10 = Nombre de sous-pas de temps de modèle	[Défaut=1]
--	------------

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)
5e-8 = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour convergence
Perman = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe : Unités des données :

cm/h = Unité de Perméabilité des aquifères en m/s
cm3/h = Unité de Débit en m3/s (ou kg/s si Gaz)
cm = Unité de Charge, Altitude, Pression en m
Heure = Unité de Temps (des Pas de modèle) (sec, min, heu, jou, etc.)
cm = Unité de Coordonnée Horizontale des mailles en m
% = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-] ['%' si en %]

Paragraphe : Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité :

TVD = Schéma de Transport
5e-9 = Diffusion moléculaire (m2/s) [* = Spatialisée]
0 = Dispersivité Longitudinale (m) [* = Spatialisée]

Paragraphe : 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]
2 = Nombre d'éléments de Filiation en chaîne de la Dégradation [déf=0] [C'est ici qu'on définit qu'il y a 2 fils, donc 3 composants chimiques]

Paragraphe : Initialisation avant calculs :

/POROSITE/GRILLE	N: =10
/H_TOPOGR/GRILLE	N: ==-100
/H_SUBSTRAT/GRILLE	N: ==-200
/DEBIT/MAILLE	C= 1L= 1P= 1V= 1000;
/DEBIT/MAILLE	C= 625L= 1P= 1V= 9999;
/CONCEN_EXT/MAILLE/TOT=	1; C= 1L= 1P= 1V= 100;N:
/CONCEN_EXT/MAILLE/TOT=	*; C= 625L= 1P= 1V= 9999;N:

On remarque qu'on doit définir le composant auquel on affecte la concentration extérieure « CONCEN_EXT ». Ici on définit la concentration extérieure du composant dissout « TOT » (pour « Total ») n°1 et on la fixe à **100** (Figure 129).

De même on impose (par défaut à 0) la concentration de tous les composants de la limite aval, colonne n°625, (TOT = *). (Un numéro de composant « * » signifie « Tous les composants »). Cette imposition n'est pas vraiment nécessaire mais est présentée ici à titre de démonstration.

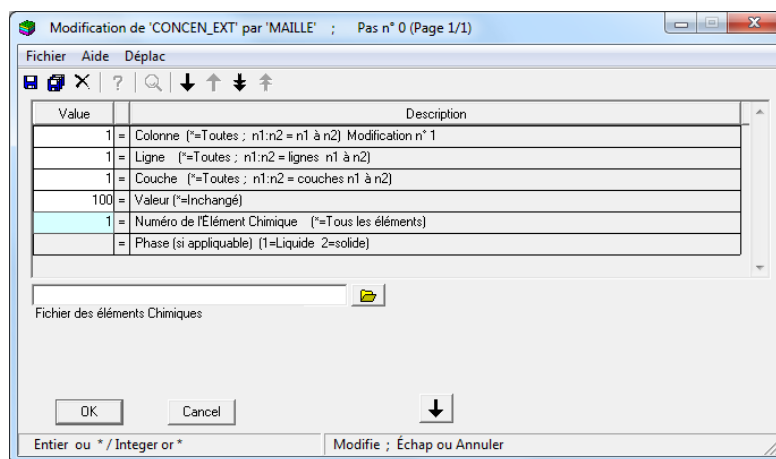


Figure 129 – Définition d'une concentration ou d'une concentration extérieure en précisant le composant.

De la même manière il est possible de demander, en certaines mailles, des historiques de concentration d'un composant donné.

Définition des temps de $\frac{1}{2}$ dégradation (demi-vie) multicomposants et des facteurs de retard multicomposants :

Le fichier des « temps de $\frac{1}{2}$ dégradation », d'extension [.tdchn], se constitue facilement avec un éditeur de texte. Il a la forme suivante :

```
Temps de 1/2 dégradation en heures NH4 -> NO2 -> NO3 [Titre descriptif]
NH4+      : 138.63
NO2-      : 6.9314718
NO3-      : 0.
```

Les temps de $\frac{1}{2}$ dégradation (ou « temps de demie vie ») sont donnés en unité utilisateur de temps, donc ici en heures.

La définition de coefficients de coefficients de partage volumiques « rho x kd » multicomposants n'est pas opérationnelle dans cette version.

De la même manière, le fichier des « facteurs de retard », d'extension [.retch] a la forme suivante :


```
Facteurs de Retard : NH4 -> NO2 -> NO3 [Titre]
NH4+      : 2.
NO2-      : 0.
NO3-      : 0.
```

On peut également définir un fichier de « noms des composants chimiques », d'extension [.nomch]. Ces noms apparaîtront alors dans les fichiers de résultats.

Ce fichier de noms (qui est facultatif) a la forme suivante :

```
Noms des composants : Dégradation en chaine : NH4 -> NO2 -> NO3 [Titre]
<< Composants Dissouts >> [2ème titre quelconque, mais obligatoire]
Nom Composant n°1      : NH4+
Nom Composant n°2      : NO2-
Nom Composant n°3      : NO3-
```

Pour introduire ces 3 fichiers dans le fichier projet : à partir de WinMarthe :

On clique sur l'icône  pour faire apparaître le menu général des « Paramètres non maillés ». On double-clique sur « Fichiers du projet », presque tout en bas. On peut alors introduire les noms de ces fichiers (Figure 130).

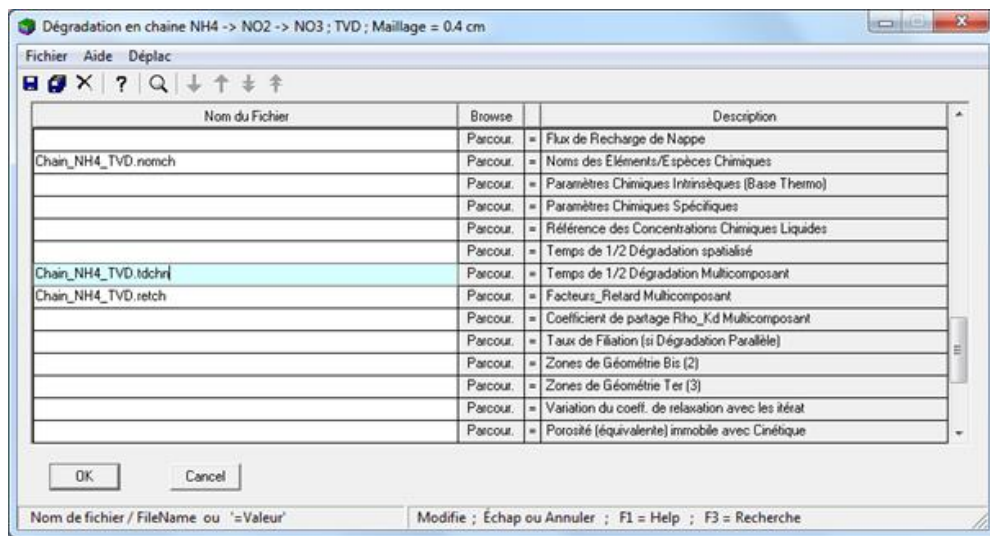


Figure 130 – Introduction de fichiers de données non maillées : fichier de temps de 1/2 dégradation multicomposant, de temps de retard multicomposant, de noms des composants.

Fichier des pas de temps :

On crée automatiquement 5 pas de temps égaux de 40 heures. Au dernier pas de temps on demande la sauvegarde du champ de concentration des 3 composants.

```

*** Le pas :      5: se termine à la date :      200; ***
/CONCENTR/EDITION/TOT=  *;      I= 1;V= 0;R= 0;
  [« * » signifie « tous » les composants]
/***** /***** Fin de ce pas

```

25.1.2. Résultats de la modélisation

On lance les calculs qui se terminent après quelques secondes.

Il convient de remarquer que les bilans de masses donnés dans le fichier de bilan « bilandeb.txt » ou « histomas.prn » se rapportent uniquement au composant n°1.

Les profils de concentration calculée de NH_4^+ , NO_2^- et NO_3^- sont comparés avec la solution analytique. La Figure 131, réalisée à partir du fichier « chasimsq.prn » généré par le modèle, montre que les concentrations simulées de NH_4^+ , NO_2^- et NO_3^- sont identiques à celles de la solution analytique de Cho (1971) et van Genuchten (1985).

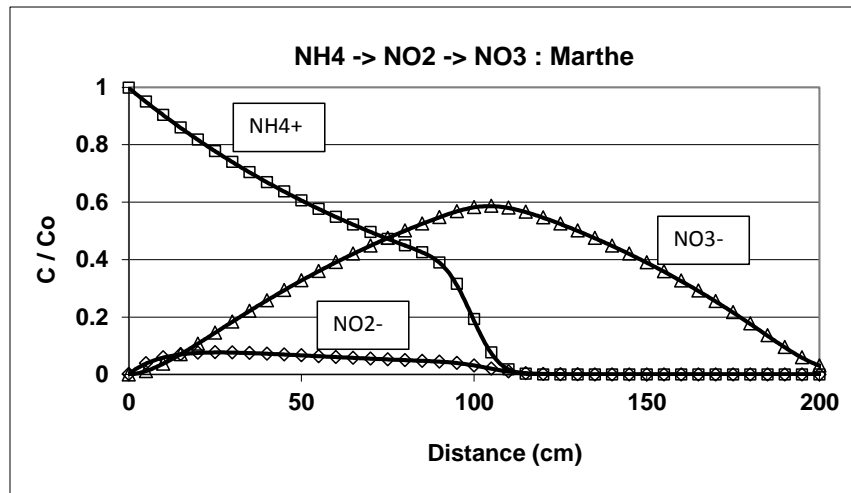


Figure 131 – Nitrification : Concentrations simulées par MARTHE (trait continu) comparées à la solution analytique (symboles).

25.2. INJECTION INSTANTANÉE DE MASSE DANS UN MILIEU 1D D'EXTENSION INFINIE

Les caractéristiques du système à 4 composants sont les suivantes :

- Milieu infini
- Vitesse réelle de filtration : 1 m/j
- Dispersivité longitudinale : 10 m
- Coefficients de retard (C1 à C4) = (5.3, 1.9, 1.2, 1.3)
- Temps de $\frac{1}{2}$ dégradation (C1 à C4) = (990.2, 1386.3, 1540.3, 1824.1) jours
- Date de fin de calcul : 3000 jours

Géométrie :

Le domaine infini est constitué d'une colonne de grande dimension, de section 1 m^2 , soumise à un écoulement de vitesse réelle 1 m/j. Compte tenu de cette vitesse, de la durée de 3000 jours choisit une colonne de 3500 m de long. Comme le milieu est infini, et par symétrie on choisit en fait une colonne, sur l'axe des ordonnées, dont les ordonnées s'étendent de -3495 m à +3495 m.

La colonne choisie a pour dimensions :

- Longueur = 3500 m environ dans la partie des ordonnées positives.
- Largeur = 1 m
- Épaisseur = 1 m
- Soit une section de 1 m^2 .

On choisit comme unités :

- Longueur = m
- (Charge = m)
- Débit = m^3/j
- Temps = jours
- Concentration = sans importance

Conditions aux limites :

On introduit un débit dans la maille amont, située en bas (ligne n°699), et on impose la charge à 0 m sur la limite aval, située en haut (ligne n°1). Pour avoir un écoulement en charge, donc une vitesse uniforme : on fixe le toit à l'altitude -1 m, et le substratum à l'altitude -2 m.

Maillage :

On adopte un maillage régulier formé d'une colonne de 699 mailles de 10 m de largeur à partir de l'ordonnée -3495 mètres, soit 6990 m de long au total.

Paramètres hydrodynamiques et de transport :

- Perméabilité : $K = 1 \text{ m/j}$

(La valeur de cette perméabilité n'a aucune influence sur le transport. Elle sert uniquement à avoir une charge hydraulique raisonnable).

- Porosité : $\omega = 10 \%$

- Soit un débit dans la ligne n°699 : $Q_{\text{amont}} = 1 \text{ m/j} \times 10\% \times 1 \text{ m}^2 = 0.1 \text{ m}^3/\text{j}$.
- Dispersivité = 10 m
- Diffusion moléculaire = 0

Le nombre de Péclet numérique est égal à 1

Transport de masse :

On introduit instantanément une masse du composant n°1 au milieu de la colonne et on calcule le profil de concentration des 4 composants après 3000 jours.

Pour modéliser le transport de masse on adopte le schéma TVD. On crée 300 pas de temps de modèle de 10 jours correspond à nombre de Courant numérique égal à 1.

25.2.1. Mise en œuvre de la modélisation

Création du maillage :

On crée un nouveau projet WinMarthe. Le maillage est défini par l'origine : $X0 = -0.5 \text{ m}$; $Y0 = -3495 \text{ m}$, 1 colonne de 699 lignes, 1 couche, largeur de la colonne = 1 m, largeur des lignes = 10 m, altitude topographique = -1 m, épaisseur = 1 m.

Profil d'utilisation :

Avec le préprocesseur, on crée un profil d'utilisation identique à l'exemple précédent.

Fichier des paramètres :

Dans le fichier des paramètres [.mart] on définit avec le préprocesseur :

Paragraphe : Contrôle de la Résolution Hydrodynamique :

```
0 = Nombre Maxi d'itérations par pas de temps calcul suivant le pas n°0
3 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Init.)
5e-8 = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour convergence
Perman = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]
```

Paragraphe : Unités des données :

```
m/J = Unité de Perméabilité des aquifères en m/s
m3/J = Unité de Débit en m3/s (ou kg/s si Gaz)
Jour = Unité de Temps (des Pas de modèle) (sec, min, heu, jou, etc.)
% = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-] ['%' si en %]
```

Paragraphe : Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité :

```
TVD = Schéma de Transport
10 = Dispersivité Longitudinale (m) [* = Spatialisée]
```

Paragraphe : Concentration et Trajectoires :

```

1 = Calcul de la Concentration
Transit = Régime du Transport de Concentration [0=Transitoire ; 1=Permanent]
3 = Nombre d'éléments de Filiation en chaîne de la Dégradation [déf=0]
[C'est ici qu'on définit qu'il y a 3 fils, donc 4 composants chimiques]
    
```

Paragraphe : Initialisation avant calculs :

```

/POROSITE/GRILLE      N: =10
/H_TOPOGR/GRILLE     N: =-1
/H_SUBSTRAT/GRILLE   N: =-2
/DEBIT/MAILLE        C=  1L=  699P=  1V=  0.1;
/DEBIT/MAILLE        C=  1L=  1P=  1V=  9999;
    
```

Définition des temps de ½ dégradation (demi-vie) multicomposants et des facteurs de retard multicomposants :

Le fichier des « temps de ½ dégradation », d'extension [.tdchn], a la forme suivante :

```

Temps de 1/2 dégradation : Bauer et al. 2001 [Titre descriptif]
Élém 1      : 990.2102
Élém 2      : 1386.294
Élém 3      : 1540.3271
Élém 4      : 1824.07153
    
```

Les temps de ½ dégradation (ou demie-vie) sont donnée en unité de temps utilisateur, donc ici en jours.

Le fichier des « facteurs de retard », d'extension [.retch], a la forme suivante :

```

Coefficients de Retard ===== Bauer et al. 2001
Élém 1      : 5.3
Élém 2      : 1.9
Élém 3      : 1.2
Élém 4      : 1.3
    
```

On peut éventuellement définir un fichier de « noms des composants chimiques », d'extension [.nomch].

Pour introduire ces 2 fichiers dans le fichier projet on procède comme dans l'exemple précédent.

Fichier des pas de temps :

On crée automatiquement 300 pas de temps égaux de 10 jours. Au premier pas de temps on introduit dans la phase liquide de la maille centrale (ligne n°350) une masse égale à $10^6 / 5.3$, soit $1.8867 \cdot 10^4$ unités utilisateur de masse. Au dernier pas de temps on demande la sauvegarde du champ de concentration des 4 composants.


```

*** Le pas : 1: se termine à la date : 10; ***
/MASS_CONCEN/MAILLE/TOT= 1; C= 1L= 350P= 1V= 18867;N:
/*****/*****/ Fin de ce pas

... ..

*** Le pas : 300: se termine à la date : 3000; ***
/CONCENTR/EDITION/TOT= *; I= 1;V= 0;R= 0;
/*****/*****/ Fin de ce pas

```

25.2.2. Résultats de la modélisation

On lance les calculs qui se terminent après quelques secondes. Les profils de concentration calculée des 4 composants sont comparés avec ceux de la solution analytique. La Figure 131, réalisée à partir du fichier « chasimsq.prn » généré par le modèle, montre que les concentrations simulées des 4 composants C1 à C4 (de gauche à droite) sont quasiment identiques à celles de la solution analytique de Bauer et al. (2001).

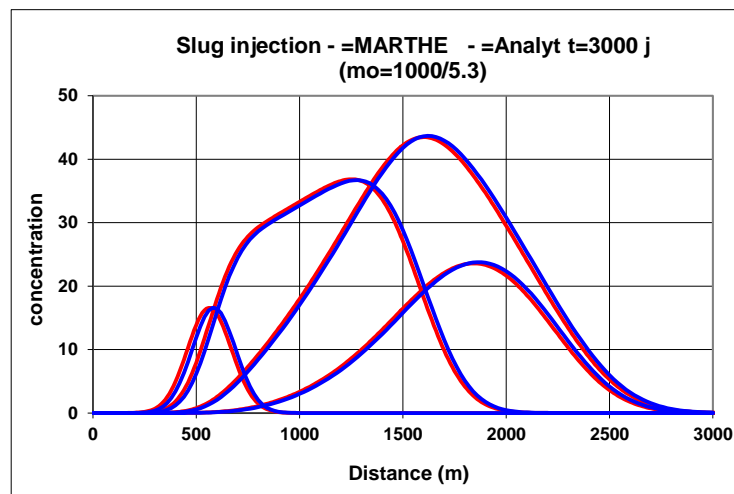


Figure 132 – Injection instantanée d'une masse en milieu infini :
dégradation en chaîne à 4 composants.
Comparaison des concentrations simulées (en rouge) avec la solution analytique (en bleu).

25.3. DÉGRADATION EN CHAÎNE DE PRODUITS RADIOACTIFS : URANIUM, THORIUM, RADIUM

Les caractéristiques du système à 3 composants sont les suivantes :

- Milieu semi infini
- Concentration imposée en un point
- Vitesse réelle de filtration : 100 m/an
- Dispersivité longitudinale : 10 m
- Coefficients de retard (234U, 230Th, 226Ra) = (14300, 50000, 500)
- Temps de $\frac{1}{2}$ vie (234U, 230Th, 226Ra) = (2.4493 10^5 , 7.7016 10^4 , 1.6 10^5) années
- Date de fin de calcul : 10000 ans

Géométrie :

Le domaine semi infini est constitué d'une colonne horizontale de grande dimension, de section 1 m², soumise à un écoulement de vitesse réelle 100 m/an. On choisit une colonne de 750 m de long de l'abscisse -1.25 m à 748.75 m.

La colonne choisie a pour dimensions :

- Longueur = 750 m
- Largeur = 1 m
- Épaisseur = 1 m
- Soit une section de 1 m²

On choisit comme unités :

- Débit = m³/an
- Temps = année
- Concentration = sans importance

Conditions aux limites :

On introduit un débit sur la limite amont, située à gauche, et on impose la charge à 0 m sur la limite aval, située à droite. Pour avoir un écoulement en charge, donc à vitesse uniforme : on fixe le toit à l'altitude -1 m, et le substratum à l'altitude -2 m.

Maillage :

On adopte un maillage régulier formé d'une ligne de 300 mailles de 2.5 m soit au total 750 m de long.

Paramètres hydrodynamiques et de transport :

- Perméabilité : $K = 1$ m/an
(La valeur de cette perméabilité n'a aucune influence sur le transport. Elle sert uniquement à avoir une charge hydraulique raisonnable).
- Porosité : $\omega = 10\%$
- Soit un débit dans la ligne n°699 : $Q_{\text{amont}} = 100 \text{ m/an} \times 10\% \times 1 \text{ m}^2 = 10 \text{ m}^3/\text{an}$.
- Dispersivité = 10 m
- Diffusion moléculaire = 0

Le nombre de Péclet numérique est égal à 0.25

Transport de masse :

Dans la maille amont, la maille n°1, on impose la concentration d'Uranium à 1 et la concentration du Thorium et du Radium à 0, et on calcule le profil de concentration des 3 composants après 10000 jours.

Pour modéliser le transport de masse on adopte le schéma TVD. On crée 200 pas de temps de modèle de 50 ans. Compte tenu de cette durée de pas de temps le nombre de Courant numérique serait égal à 2000 si ignorait les facteurs de retard, mais le nombre de Courant est en fait beaucoup plus petit compte tenu des grands facteurs de retard.

25.3.1. Mise en œuvre de la modélisation

Création du maillage :

On crée un nouveau projet WinMarthe. Le maillage est défini par l'origine : $X0 = -1.25$ m ; $Y0 = -0.5$ m, 1 ligne de 300 colonnes, 1 couche, largeur des colonnes = 2.5 m, largeur de la ligne = 1 m, altitude topographique = -1 m, épaisseur = 1 m.

Profil d'utilisation :

Avec le préprocesseur, on crée un profil d'utilisation identique à celui de l'exemple précédent.

Fichier des paramètres :

Dans le fichier des paramètres [.mart] on définit avec le préprocesseur :

Paragraphe : Contrôle de la Résolution Hydrodynamique :

```
0 = Nombre Maxi d'itérations par pas de temps calcul suivant le pas n°0
3 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)
Perman = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]
```

Paragraphe : Unités des données :

```
m/an = Unité de Perméabilité des aquifères en m/s
m3/an = Unité de Débit en m3/s (ou kg/s si Gaz)
Année = Unité de Temps (des Pas de modèle) (sec, min, heu, jou, etc.)
% = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-] ['%' si en %]
```

Paragraphe : Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité :

```
TVD = Schéma de Transport
10 = Dispersivité Longitudinale (m) [* = Spatialisée]
```

Paragraphe : Concentration et Trajectoires :

```

1 = Calcul de la Concentration
Transit = Régime du Transport de Concentration [0=Transitoire ; 1=Permanent]
2 = Nombre d'éléments de Filiation en chaîne de la Dégradation [déf=0]
[C'est ici qu'on définit qu'il y a 2 fils, donc 3 composants chimiques]

```

Paragraphe : Initialisation avant calculs :

```

/POROSITE/GRILLE      N: =10
/H_TOPOGR/GRILLE     N: =-1
/H_SUBSTRAT/GRILLE   N: =-2
/DEBIT/MAILLE        C=   1L=   1P=   1V=   10;
/DEBIT/MAILLE        C=  300L=   1P=   1V=  9999;

```

Définition des temps de ½ dégradation (demi-vie) multicomposants et des facteurs de retard multicomposants :

Le fichier des « temps de ½ dégradation », c'est-à-dire le « temps de demi-vie » ou « période », d'extension [.tdchn], a la forme suivante :

```

Temps de 1/2 de dégradation (en années) [Titre descriptif]
Uranium-234 : 2.4493E5
Thorium-240 : 7.7016E4
Radium-226  : 1.6E5

```

Les temps de ½ dégradation (ou demie vie) sont donnée en unité utilisateur de temps, donc ici en années.

Le fichier des « facteurs de retard », d'extension [.retch], a la forme suivante :

```

Coefficients de Retard ===== [Titre descriptif]
Uranium-234 : 1.43E4
Thorium-240 : 5.0E4
Radium-226  : 500

```

Le fichier de noms des composants a la forme suivante :

```

Dégradation en chaîne : Uranium => Thorium => Radium [Titre]
<< Composants Dissouts >> [2ème titre quelconque, mais obligatoire]
Élém 1   : Uranium-234
Élém 2   : Thorium-240
Élém 3   : Radium-226

```

Pour introduire ces 3 fichiers dans le fichier projet, on procède comme dans les exemples précédents.

Fichier des pas de temps :

On crée automatiquement 200 pas de temps égaux de 50 ans. Au pas de temps n°0, on fixe dans la première maille une concentration égale à 1 pour l'Uranium et à 0 pour le Thorium et le Radium. Au dernier pas de temps on demande la sauvegarde du champ de concentration des 3 composants.

```

*** Début de la simulation      à la date :      0; ***
/CONCENTR/MAILLE/TOT=  1;    C=  1L=  1P=  1V=    1;
/CONCENTR/MAILLE/TOT=  2;    C=  1L=  1P=  1V=    0;
/CONCENTR/MAILLE/TOT=  3;    C=  1L=  1P=  1V=    0;
/CONCEN_EXT/MAILLE/TOT= *;    C=  1L=  1P=  1V=  9999;N:
/*****/*****/ Fin de ce pas

... ..

*** Le pas : 200: se termine à la date :    10000; ***
/CONCENTR/EDITION/TOT= *;      I=  1;V=  0;R=  0;
/*****/*****/ Fin de ce pas

```

25.3.2. Résultats de la modélisation

On lance les calculs qui se terminent après quelques secondes. Les profils de concentration calculée des 3 composants sont comparés avec ceux de la solution analytique calculée avec le logiciel de van Genuchten (1985). La Figure 133, réalisée à partir du fichier « chasimsq.prn » généré par le modèle, montre que les concentrations en l'Uranium, en Thorium et en Radium simulées par le code MARTHE sont quasiment identiques à celles de la solution analytique. Ceci est vérifié pour une amplitude de variation de concentration de 10 puissances de 10.

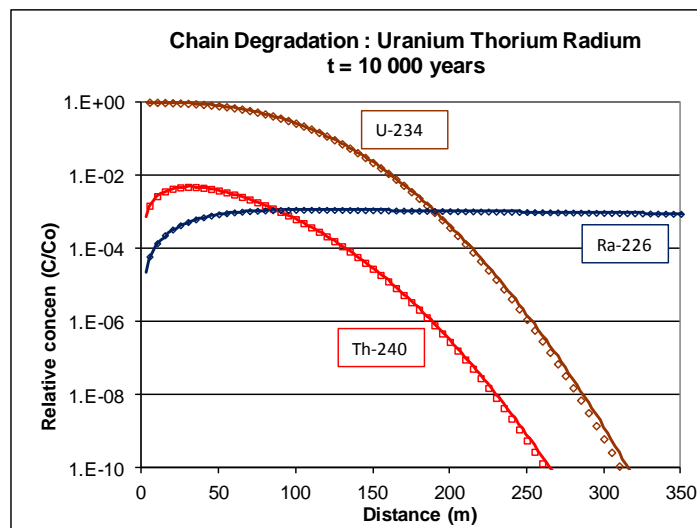


Figure 133 – Réaction en chaîne Uranium ->Thorium-> Radium en milieu semi infini
Concentration simulées par MARTHE (trait continu) comparées à la solution analytique (symboles).

26. Exemple n°16 : Écoulement et transport dans un aquifère parcouru par un drain-conduit pouvant être en charge

Cet exemple montre comment simuler les écoulements et les transferts de masse dans un aquifère contenant un drain-conduit qui peut être à « surface libre » ou « en charge » selon la charge hydraulique. Il montre comment définir les paramètres pour calculer l'hydraulique et le transport de masse à la fois dans l'aquifère et dans le drain-conduit.

26.1. DÉFINITION DU SYSTÈME MODÉLISÉ

Les caractéristiques du système sont les suivantes (Figure 134) :

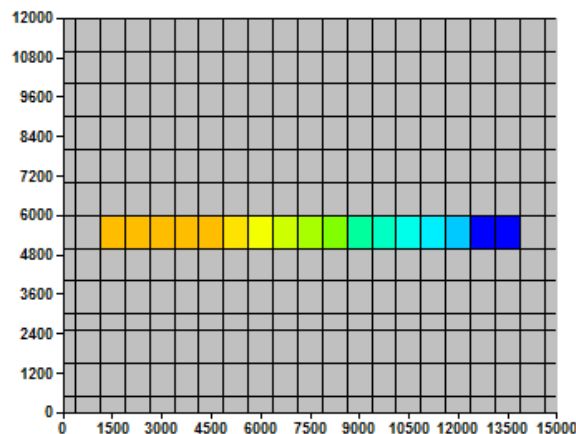


Figure 134 – Aquifère parcouru par un Drain-Conduit : Maillage (en couleur la position du drain).

Géométrie :

- Le domaine est constitué d'un aquifère captif homogène de 100 mètres d'épaisseur, et d'extension rectangulaire de longueur 15000 m (Ouest-Est) sur 12000 m (Nord-Sud).
- Le toit de la nappe est à l'altitude -100 m et son substratum à l'altitude -200 m.
- Cet aquifère est traversé par un drain (ou galerie) de longueur 12000 m (de l'abscisse 1500 m à l'abscisse 13500 m). Ce drain est situé à mi-hauteur de l'aquifère, donc à 50 m de profondeur par rapport au toit. Le drain a une section carrée de 5 m de côté.
- Le drain, situé dans la ligne n°7, est discrétisé par un affluent de 17 tronçons. Chaque tronçon a une longueur de 750 m sauf les tronçons des 2 extrémités qui ont une longueur de 375 m.
- Largeur du drain = 5 m
- Hauteur verticale du drain = 5 m
- Altitude du fond du drain = -150 m

Paramètres hydrodynamiques :

Aquifère :

- Perméabilité de l'aquifère : $K = 10^{-7}$ m/s
- Coefficient d'emmagasinement captif spécifique : $S_s = 10^{-7}$ m⁻¹
- Porosité : $\omega = 0.5$ % dans l'aquifère (*pour le transport de masse*).

Drain-conduit :

- Perméabilité (conductivité) du drain : $K_{dra} = 25.11$ m/s [*champ : CONDUC_DRAIN*].
- Coefficient d'échange = Coef_Ech = 1 (sans dimension) [*champ : PERM_ECH_DRAI*].

Maillage :

Aquifère :

L'aquifère est discrétisé par un maillage de 13 lignes de 23 colonnes, soit 299 mailles.

Les colonnes ont toutes des largeurs de 750 m sauf les 2 colonnes de chaque extrémité qui ont pour largeur respectivement 370 m et 5 m.

Les lignes ont toutes pour largeur 1000 m sauf les lignes n°10 et n°13 (en partant du haut) qui ont une largeur de 500 m.

Drain-conduit :

Le drain est discrétisé par un affluent unique de 17 tronçons de 750 m de longueur chacun, sauf les tronçons des 2 extrémités qui ont une longueur de 375 m. Il est situé dans la ligne n°7 du maillage (de l'aquifère), de la colonne n°4 à la colonne n°20.

Comme il y a un seul drain (un seul « affluent de drain », l'affluent n°1), il n'est pas nécessaire de définir un « Arbre de branchement des affluents ».

L'affluent de drain étant orienté selon une ligne du maillage, il n'est pas nécessaire de numéroter ses tronçons : on donne à chaque tronçon le numéro code « -1 ». (On utilise ainsi la convention : « Numéro de tronçon = -1 => Numéro de la colonne, « Numéro de tronçon = -2 => Numéro de la ligne).

Unités :

On choisit comme unités :

- Perméabilité = en 10^{-7} m/s
- Débit = L/s
- Temps = jour
- Porosité = %
- Concentration : *sans importance*.

Profil d'utilisation :

Avec le préprocesseur, on crée un profil d'utilisation avec les options suivantes :

- Régime transitoire

- Transport de masse classique
- Drains

1 = Régime Transitoire
 1 = Transport de masse Classique
 2 = Rivières, Drains, Lacs (1=Rivières et/ou Lacs ; 2=Drains ; 3=tous les 3)

26.2. CALCUL EN RÉGIME PERMANENT DE LA CHARGE HYDRAULIQUE ET DU DÉBIT DANS L'AQUIFÈRE ET DANS LE DRAIN

Conditions aux limites :

Aquifère :

- Limite amont (à l'ouest) : Charge hydraulique imposée $H = 600$ m
- Limite aval (à l'est) : Charge hydraulique imposée $H = 0$ m

Drain-conduit :

- Limite amont (à l'ouest) : Charge hydraulique imposée $H = 0.1$ m
- Limite aval (à l'est) : Charge hydraulique imposée $H = 0.0$ m

État initial :

- La nappe a initialement une charge hydraulique égale à 600 m (sauf la limite Est : 0 m). Le drain a initialement une charge hydraulique égale à 0 m (sauf la limite Ouest : 0.1 m).

Dans le fichier des paramètres [.mart] on définit donc avec le préprocesseur :

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)
 1e-6 = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour convergence
 Perman = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe : **Unités des données :**

1e-7 = Unité de Perméabilité des aquifères en m/s (ou m2)
 L/s = Unité de Débit en m3/s
 Jou = Unité de Temps (des Pas de temps de modèle) (*pour le régime transitoire*)
 Specif = Emmagasinement Captif (0=Hydrogéologues ; 1=Spécifique ; 2=Compressibil.)
 % = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-] (*pour le régime transitoire*)

Paragraphe : **Réseau Hydrographique, Drains, Lacs :**

2 = Couplage avec un système de Drains [0=Non ; 1=Drains ; 2=Conduits]

Paragraphe : Initialisation avant calculs :

<i>[Champs pour l'aquifère]</i>					
/PERMEAB/GRILLE	N:	=1			
/H_TOPOGR/GRILLE	N:	=-100			
/H_SUBSTRAT/GRILLE	N:	=-200			
/CHARGE/GRILLE	N:	=0			
/CHARGE/MAILLE	C=	1L=	*P=	1V=	600;
/CHARGE/MAILLE	C=	23L=	*P=	1V=	0;
/DEBIT/MAILLE	C=	1L=	*P=	1V=	9999;
/DEBIT/MAILLE	C=	23L=	*P=	1V=	9999;
<i>[Champs pour le Drain]</i>					
/AFFLU_DRAIN/MAILLE	C=	4:20	L=	7P=	1V= 1;
/TRONC_DRAIN/MAILLE	C=	4:20	L=	7P=	1V= -1;
<i>[Cette valeur de tronçon « -1 » affecte automatiquement le n° de colonne comme numéro de tronçon]</i>					
/ALTIT_DRAIN/GRILLE	N:	=-150	<i>[c'est l'altitude du fond du drain]</i>		
/LONG_DRAIN/GRILLE	N:	=750			
/LONG_DRAIN/MAILLE	C=	4L=	7P=	1V=	375;
/LONG_DRAIN/MAILLE	C=	20L=	7P=	1V=	375;
/LARG_DRAIN/GRILLE	N:	=5			
/H_VERT_DRAIN/GRILLE	N:	=5			
/CONduc_DRAIN/GRILLE	N:	=25.11e7	<i>[Conductivité du drain en 10⁻⁷ => 25.11 m/s]</i>		
/PERM_ECH_DRAI/GRILLE	N:	=1	<i>[Coeff de perméabilité d'échange des drains]</i>		
/CHARGE_DRAIN/GRILLE	N:	=0			
/CHARGE_DRAIN/MAILLE	C=	4L=	7P=	1V=	0.1;
/CHARGE_DRAIN/MAILLE	C=	20L=	7P=	1V=	0;
/Q_EXT_DRAIN/MAILLE	C=	4L=	7P=	1V=	9999;
/Q_EXT_DRAIN/MAILLE	C=	20L=	7P=	1V=	9999;

Comme le calcul est réalisé en régime permanent : dans le fichier des pas de temps [.pastp], on définit uniquement le pas de temps n°0. Avec le préprocesseur, on demande à ce pas de temps n°0 la sauvegarde :

- Du champ de la charge hydraulique de la nappe « CHARGE / EDITION »
- Du champ de la charge hydraulique du drain « CHARGE_DRAIN / EDITION »
- Du champ du débit dans la nappe « DEBIT / EDITION »
- Du champ du débit : à l'aval des tronçons de drain, au milieu des tronçons de drain « DEBIT_DRAIN / EDITION »
- Du champ du débit d'échange Drain->Nappe « QECH_DRAI_NAP / EDITION »

Lancement des calculs.

Les calculs s'exécutent en une fraction de seconde, et on vérifie qu'ils ont parfaitement convergé en 1 seule itération. La Figure 135 montre le champ des charges obtenu dans l'aquifère. On voit qu'il très fortement influencé par le drain. La Figure 136 montre que le profil de charge hydraulique dans le drain n'est pas linéaire car il est fortement influencée par l'aquifère. La Figure 137 montre le profil du débit d'échange Drain-Nappe (« QECH_DRAI_NAP »). Il est négatif puisque le débit va de la nappe vers le drain. La Figure 138 montre le profil de débit dans le drain (« FLOW_MED_DRA »).

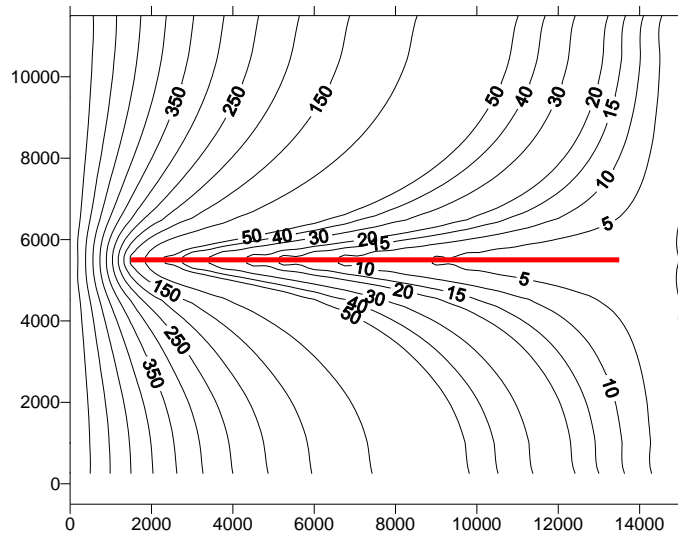


Figure 135 – Aquifère parcouru par un Drain-Conduit : Charge hydraulique en régime permanent.

Remarque : Les profils sont obtenus par WinMarthe par la commande « Outils » → « Autre » → « Extraction 1D de champs multiples d'un fichier résultats ». On extrait alors tous les champs de « toutes les colonnes » de la ligne n°7.

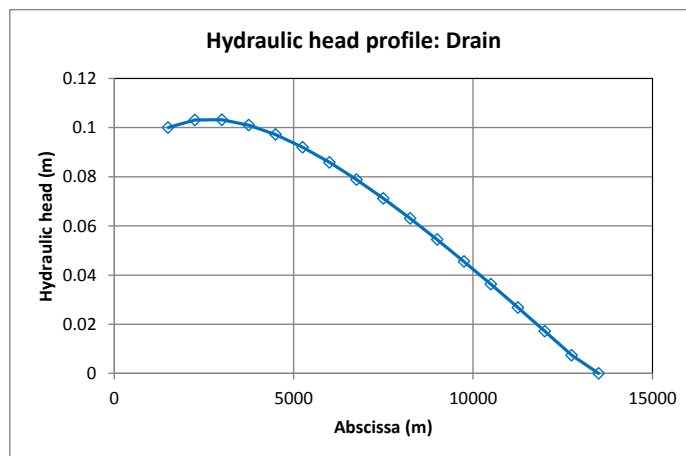


Figure 136 – Aquifère parcouru par un Drain-Conduit : Profil de charge hydraulique dans le drain.

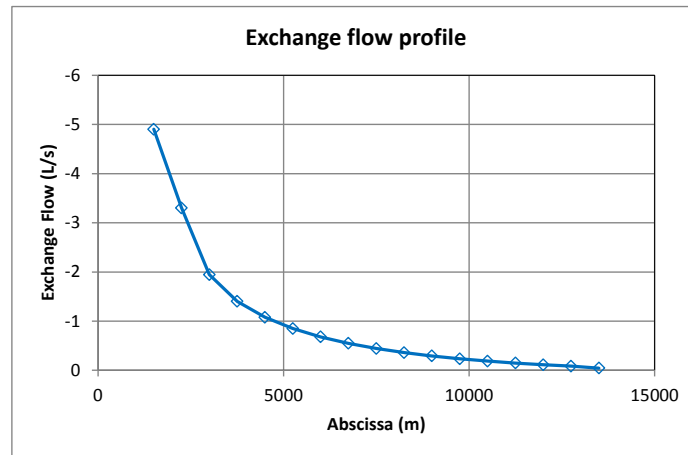


Figure 137 – Aquifère parcouru par un Drain-Conduit : Profil de débit d’échange (débit négatif => De la nappe vers le drain).

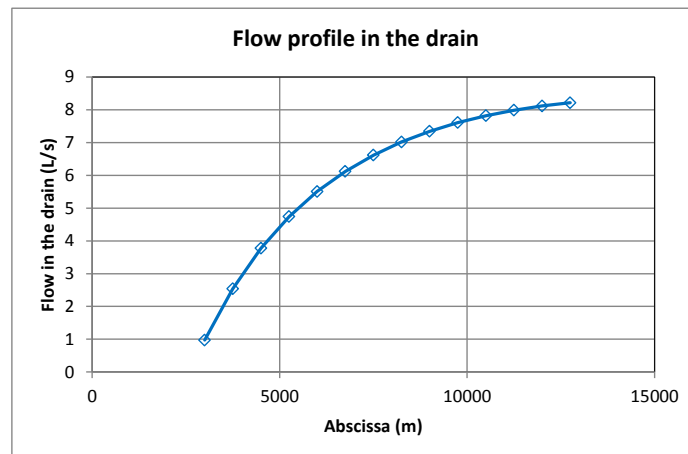


Figure 138 – Aquifère parcouru par un Drain-Conduit : Profil de débit dans le drain.

26.3. CALCUL EN RÉGIME TRANSITOIRE DU TRANSPORT DE MASSE DANS L’AQUIFÈRE ET DANS LE DRAIN

Pour cette simulation en régime transitoire on modifie légèrement les conditions aux limites et les conditions initiales. On considère que la nappe et le drain ont initialement une charge hydraulique égale à 600 m. La charge hydraulique est imposée uniquement sur la limite ouest de la nappe. Au début du premier pas de temps, on introduit un pompage égal à 7 L/s à l’extrémité Est du drain (dans la colonne n°20).

Paramètres hydrodispersifs :

Aquifère :

- Dispersivité longitudinale : 1000 m
- Dispersivité transversale : 200 m

Drain-conduit :

- Diffusion : 0.1 m²/s.

État initial :

- Charge hydraulique égale à 600 m dans la nappe et dans le drain.

Conditions aux limites :**Aquifère :**

- Limite amont (à l'ouest) : Charge hydraulique imposée : H = 600 m.
- Limite amont (à l'ouest) : Concentration extérieure = 100 (unités de concentration).

Drain-conduit :

- Limite amont (à l'ouest) : Pas de condition à la limite
- Limite aval (à l'est) : Pompage 7 L/s [champ : Q_EXT_DRAIN]
: (à partir du 1^{er} pas de temps)

Régime transitoire :

Calcul pendant 30 000 jours. Il y a 2 pas de temps de modèle : le pas de temps n°1, jusqu'à 10 000 jours, découpé en 10 sous-pas de temps de 1000 jours et le pas de temps n°2, jusqu'à 30 000 jours, découpé en 10 sous-pas de temps de 2000 jours.

Dans le fichier des paramètres [.mart] on définit donc avec le préprocesseur :

Paragraphe : Pas de Temps et sous-pas de temps :

<code>10</code> = Nombre de sous-pas de temps de modèle	[Déf=0 => Aucun]
---	------------------

Paragraphe : Contrôle de la Résolution Hydrodynamique :

<code>2</code> = Nombre Maxi d'itérations par pas de temps calcul suivant le pas n°0
<code>10</code> = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)
<code>1e-6</code> = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour convergence
Transit = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe : Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité :

<code>=</code> Méthode de Transport [0=Diff_Finies ; 1=Random_Walk ; 2=Carac.=MOC ; 3=TVD]
<code>1000</code> = Dispersivité Longitudinale (m) [* = Spatialisée]
<code>200</code> = Dispersivité Transversale (m) [* = Spatialisée]

Paragraphe : Calcul de la Concentration :

<code>1</code> = Calcul de la Concentration
<code>1e-5</code> = Variation moyenne de Concentration entre 2 itérations pour convergence
Transit = Régime du Transport de Concentration [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe : Réseau Hydrographique, Drains, Lacs :

2 = Couplage avec un système de Drains [0=Non ; 1=Drains ; 2=Conduits]
 0 = Nombre maximal de tronçons de Drains [Déf=0 => 1500]
 0.1 = Coefficient de Diffusion pour le transport dans les Drains-Conduits (m²/s)

Paragraphe : Initialisation avant calculs :

```
[Champs pour l'aquifère]
/PERMEAB/GRILLE      N: =1
/H_TOPOGR/GRILLE    N: =-100
/H_SUBSTRAT/GRILLE  N: =-200
/EMMAG_CAPT/GRILLE  N: =1e-7
/POROSITE/GRILLE    N: =0.5
/CHARGE/GRILLE      N: =600
/DEBIT/MAILLE       C=      1L=      *P=      1V=      9999;
/CONCEN_EXT/MAILLE  C=      1L=      *P=      1V=      100;

[Champs pour le Drain]
/AFFLU_DRAIN/MAILLE C=  4:20 L=      7P=      1V=      1;
/TRONC_DRAIN/MAILLE C=  4:20 L=      7P=      1V=     -1;
/ALTIT_DRAIN/GRILLE N: =-150 [c'est l'altitude du fond du drain]
/LONG_DRAIN/GRILLE  N: =750
/LONG_DRAIN/MAILLE  C=      4L=      7P=      1V=     375;
/LONG_DRAIN/MAILLE  C=     20L=      7P=      1V=     375;
/LARG_DRAIN/GRILLE  N: =5 [Largeur du drain]
/H_VERT_DRAIN/GRILLE N: =5 [Hauteur verticale du drain]
/CONDUC_DRAIN/GRILLE N: =25.11e7 [Conductivité du drain en 10-7 => 25.11 m/s]
/PERM_ECH_DRAI/GRILLE N: =1
/CHARGE_DRAIN/GRILLE N: =600
```

Fichier des pas de temps [.pastp] :

```

Aquifère avec Drain-Conduit Transitoire + Transport
#<V7.5># --- Fin du texte libre --- ; Ne pas modifier/retirer cette ligne
*** Début de la simulation à la date : 0; ***
/*****/***** Fin de ce pas

*** Le pas : 1: se termine à la date : 10000; ***
/Q_EXT_DRAIN/MAILLE C= 20L= 7P= 1V= -7;
/DEBIT/EDITION *= 1;V= 0;L= 0;S= 0;Z= 0;
/CHARGE/EDITION I= 1;
/DEBIT_DRAIN/EDITION I= 1;L= 1;F= 0;B= 0;A= 0;M= 1;U= 0;
/QECH_DRAI_NAP/EDITION I= 1;
/CHARGE_DRAIN/EDITION I= 1;P= 0;S= 0;
/Q_EXT_DRAIN/EDITION I= 1;
/CONCENTR/EDITION I= 1;V= 0;R= 0;
/CONCEN_DRAIN/EDITION I= 1;
/*****/***** Fin de ce pas

*** Le pas : 2: se termine à la date : 30000; ***
/DEBIT/EDITION *= 1;V= 0;L= 0;S= 0;Z= 0;
/CHARGE/EDITION I= 1;
/DEBIT_DRAIN/EDITION I= 1;L= 1;F= 0;B= 0;A= 0;M= 1;U= 0;
/QECH_DRAI_NAP/EDITION I= 1;
/CHARGE_DRAIN/EDITION I= 1;P= 0;S= 0;
/Q_EXT_DRAIN/EDITION I= 1;
/CONCENTR/EDITION I= 1;V= 0;R= 0;
/CONCEN_DRAIN/EDITION I= 1;
/*****/***** Fin de ce pas
*** : : Fin de la simulation : ; ***

```

Lancement des calculs.

Les calculs s'exécutent en une fraction de seconde, et on vérifie qu'ils ont parfaitement convergé. La Figure 139 montre l'évolution de la concentration en 4 points du drain. La Figure 140 montre le profil de débit dans le drain et le profil de débit d'échange après 30000 jours. La Figure 141 présente le champ de concentration dans la nappe et dans le drain après 30000 jours. Il apparaît nettement que la concentration s'est nettement plus déplacée dans le drain.

Remarque : Les profils sont obtenus par WinMarthe par la commande « Outils » → « Autre » → « Extraction 1D de champs multiples d'un fichier résultats ». On extrait alors tous les champs de « toutes les colonnes » de la ligne n°7.

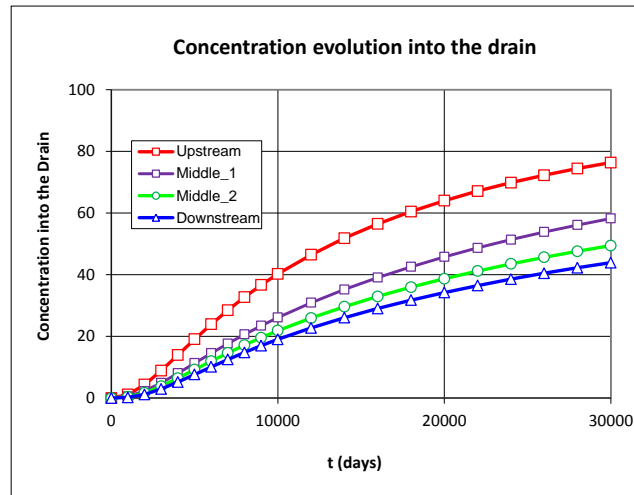


Figure 139 – Aquifère parcouru par un Drain-Conduit : évolution de la concentration dans le drain.

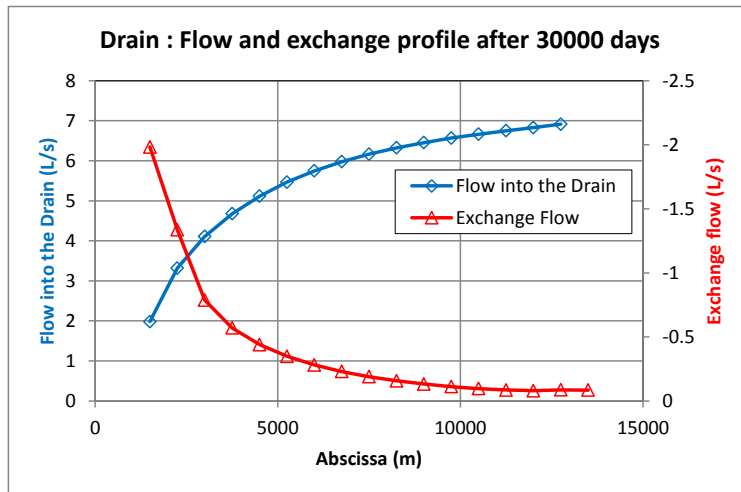


Figure 140 – Aquifère parcouru par un Drain-Conduit : Profil de débit et de débit d'échange dans le drain.

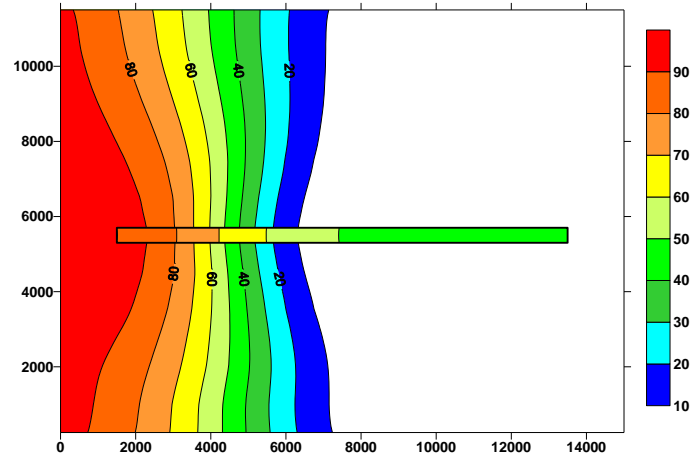


Figure 141 – Aquifère parcouru par un Drain-Conduit
Champ de concentration dans la nappe et dans le drain après 30000 jours.
(Le drain a été élargi pour une meilleure visibilité).

27. Exemple n°17 : Effet de la densité dans les transferts thermiques : 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 qui génère des cellules de convection.

27.1. 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 142).

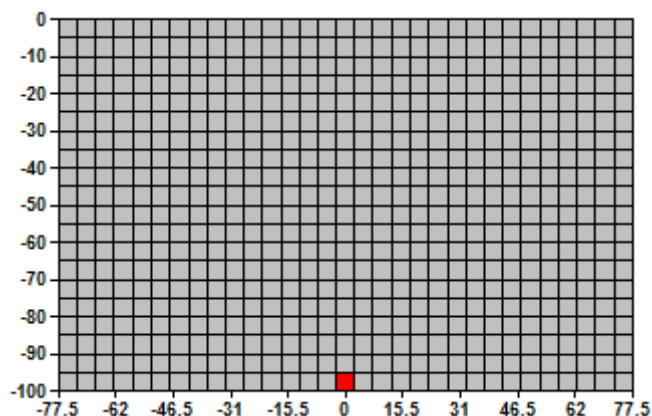


Figure 142 – Maillage avec indication du point d'injection de chaleur (en rouge).

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.

Remarque : 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 : $\omega = 35 \%$
- Dispersivité thermique longitudinale = 0.02 m
- Dispersivité 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 cm)
Température imposée (à la valeur de 11°C indiquée en état initial).
- 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 gradient de $2 \cdot 10^{-4}$ cm de différence de charge d'Ouest en Est (150 cm), soit un débit total de $1.333 \cdot 10^{-8}$ m³/s.
- Température uniforme = 11°C.

Découpage du temps :

Le calcul se rapporte à 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 au total.

Pour ce calcul :

- On néglige l'influence des variations de la température sur la viscosité de l'eau 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.

Fichier des « Paramètres Généraux »

Dans le fichier des paramètres [.mart], 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 viscosité/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]

27.2. RÉSULTATS DE LA SIMULATION

Les calculs se terminent en quelques dizaines de secondes. La Figure 143 montre le champ de température calculé après 90 mn et après 200 mn. La Figure 144 montre le champ de la masse volumique. La Figure 145 montre le champ de charge réelle et les vitesses après 90 mn.

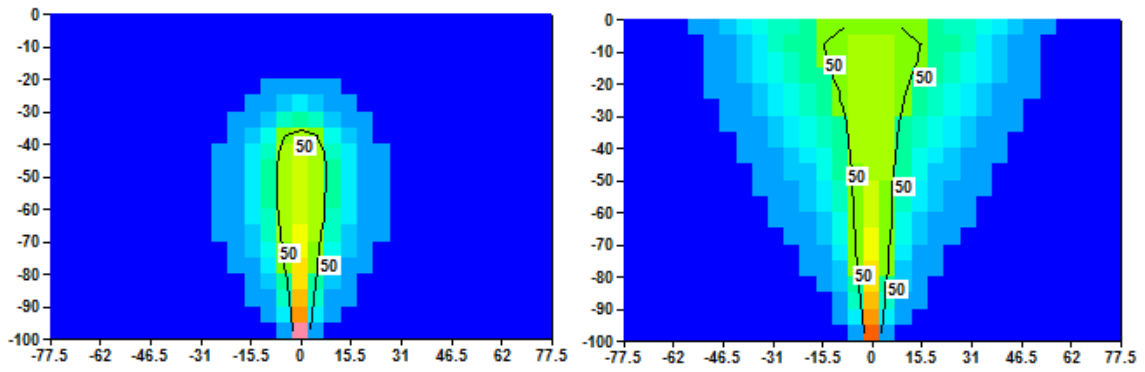


Figure 143 – Température (°C). À gauche : après 90 mn, à droite : après 200 mn.

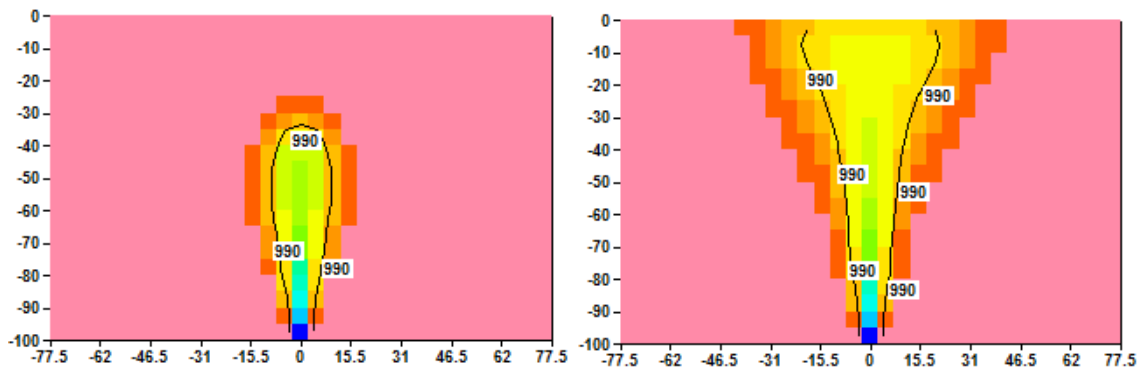


Figure 144 – Masse volumique de l'eau (kg/m³). À gauche : après 90 mn, à droite : après 200 mn.

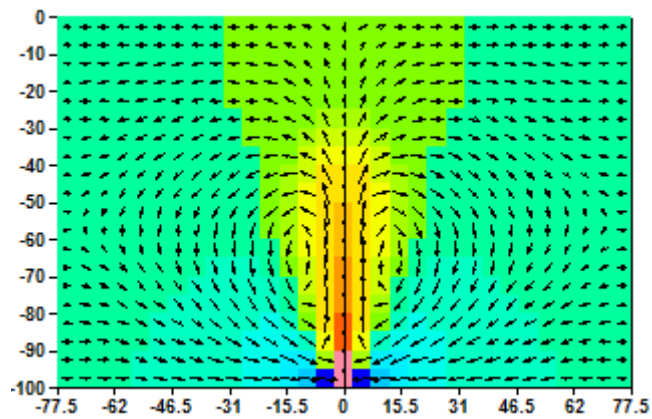


Figure 145 – Charge hydraulique et vitesses après 90 mn.

28. Exemple n°18 : Effet de la viscosité dans les transferts thermiques : Écoulement dans une colonne horizontale

Cet exemple montre comment prendre en compte l'influence de la température de l'eau sur sa viscosité et donc sur sa perméabilité effective. 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.

28.1. 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, sa viscosité diminue, donc la perméabilité du milieu augmente. La différence de charge entre l'amont et l'aval diminue alors fortement.

Comme la viscosité diminue d'environ un facteur 6 entre 0°C et 100 °C, 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/jour (à 0.01 °C)
- Régime hydraulique : permanent.
- Porosité : $\omega = 10$ %
- Dispersivités thermiques 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 $1 \text{ m}^3/\text{jour}$
 - 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 se rapporte à 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 de l'eau.
- On considère que le coefficient d'emmagasinement captif étant négligeable, 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.

Fichier des « Paramètres Généraux »

Dans le fichier des paramètres [.mart], les paramètres à définir sont les suivants :

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)
5e-6 = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour Convergence
Perman = Régime Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe : « Unités des données » :

m/J = Unité de Perméabilité des aquifères en m/s (ou m2)
m3/J = Unité de Débit en m3/s
m = Unité de Charge, Altitude, Pression en m
Jour = Unité de Temps (des Pas de temps de modèle) (sec, min, heu, jou, moi, ann)
m = Unité de Coordonnées Horizontales en m
% = Unité de Porosité = Teneur en eau en [-] ['%' si en %]

Paragraphe : « Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs » :

1 = 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 » :

5 = Nombre maxi. d'itérat. pour *Couplage* Densité/Pression ou **viscos/Températ.**
0 = 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
Expon	=	Loi de Viscosité de l'eau = $F(\text{Température})$ (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	1L=	1P=	1V= 9999;
/DEBIT/MAILLE	C=	1	1L=	1P=	1V= 1;
/TEMPER_EXT/MAILLE	C=	1	1L=	1P=	1V= 9999;
/TEMPERAT/MAILLE	C=	1	1L=	1P=	1V= 100;

Fichier des « Pas de temps »

Dans le fichier des pas de temps [.pastp] on définit avec le préprocesseur :

- Les dates de fin de pas de temps :
 - de t = 0 à 20 jours : tous les 2 jours.
 - de t = 20 à 30 jours : tous les 5 jours.
 - de t = 30 à 100 jours : tous les 10 jours.
- À chaque pas de temps : la sauvegarde des champs (profils) :
 - de Température « TEMPERAT »
 - de Charge hydraulique « CHARGE ».

28.2. RÉSULTATS DE LA SIMULATION

Les calculs se terminent en une fraction de seconde. Le fichier « chasimsq.prn » contient les sauvegardes des profils demandés. Il permet de visualiser immédiatement les résultats.

La Figure 146 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 147 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 147 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.

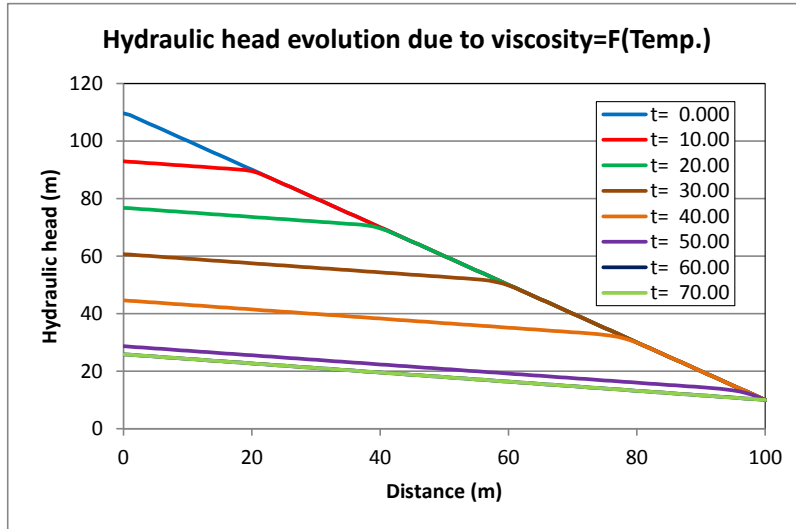


Figure 146 – Évolution du profil de charge hydraulique dans la colonne au cours du temps.

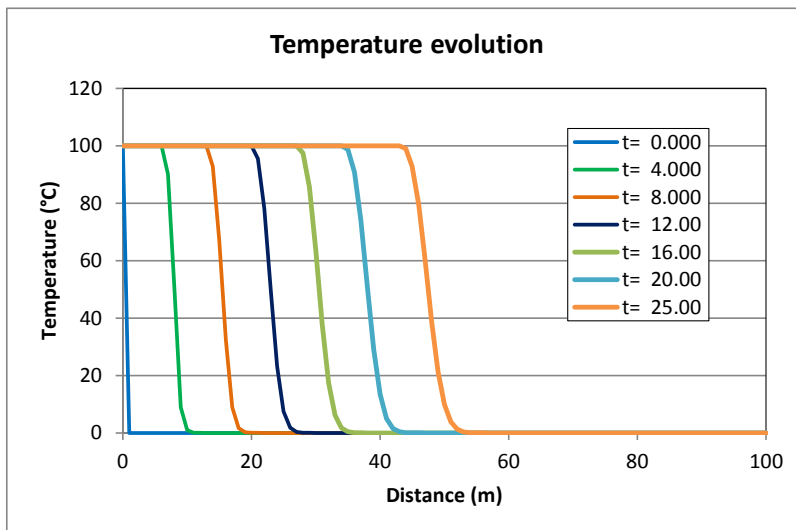


Figure 147 – Évolution du profil de température dans la colonne au cours du temps.

29. Exemple n°19 : Écoulement et transport en Zone Non saturée dans une colonne verticale contenant un macropore

Cet exemple montre comment simuler les écoulements et les transferts de masse dans un milieu non saturé contenant un macropore. Il décrit l'écoulement dans une colonne verticale. Le macropore est simulé par un « drain-conduit » simulé en Zone Non Saturée.

29.1. DÉFINITION DU SYSTÈME MODÉLISÉ

Les caractéristiques du système sont les suivantes :

Géométrie :

- Colonne :
 - Hauteur verticale = 200 cm.
 - Largeur = 100 cm ; épaisseur = 100 cm, soit une section de 1 m².
- Macropore (Drain-conduit)
 - Section carrée de 10 cm de côté. (soit une section de 0.01 m² égale à 1 % de celle de la matrice poreuse)

Discrétisation :

- Matrice poreuse (Colonne) :

La colonne est modélisée en coupe verticale comme une colonne de 201 mailles de 1 cm de hauteur : de $y = -200.5$ cm à $y = 0$ cm.

- Macropore (Drain-conduit)

Chaque maille contient un tronçon de drain vertical de 1 cm de long qui représente le macropore. Chaque tronçon de drain appartient à l'« Affluent de Drain » n°1.

Comme il y a un seul drain (un seul « affluent de drain »), il n'est pas nécessaire de définir un « Arbre de branchement des affluents ».

On définira par un paramètre que tous les tronçons de drains sont verticaux.

L'affluent de drain étant orienté selon la verticale, il n'est pas nécessaire de numéroter ses tronçons : par défaut, numéro de tronçon = 0, ils auront comme numéro de tronçon le numéro de la couche (ici le numéro de la ligne, puisque la pesanteur est dirigée selon l'axe Oy).

Paramètres hydrodynamiques :

- Matrice poreuse (Colonne) :
 - Perméabilité à saturation de la matrice poreuse : 50 cm/j

- Teneur en eau à saturation : 43 %
- Teneur en eau résiduelle : 8 %
- Loi de rétention et loi de perméabilité relative : Lois de Van Genuchten
- Succion à ½ saturation : 25 cm ($\alpha = 0.04 \text{ cm}^{-1}$)
- Exposant de la loi de rétention : 0.625 ($n = 1.6$)
- Macropore (Drain-conduit)
 - Perméabilité à saturation du macropore : 250 cm/j [*champ* : CONDUC_DRAIN]. (Soit 5 fois plus perméable.)
 - Teneur en eau à saturation : 100 % (par défaut)
 - Teneur en eau à résiduelle : 0 % (par défaut)
 - Loi de rétention : Loi de Van Genuchten
 - Loi de perméabilité relative : Loi Puissance
 - Succion à ½ saturation (loi de rétention) : 10 cm ($\alpha = 0.1 \text{ cm}^{-1}$)
 - Exposant de la loi de rétention : 0.625 ($n = 1.6$)
 - Exposant de la loi de perméabilité relative : 1
 - Coefficient d'échange = 1 (sans dimension) [*champ* : PERM_ECH_DRAIN].

Paramètres hydrodispersifs :

- Matrice poreuse (Colonne) :
 - Dispersivité longitudinale : 0.01 m
 - (Dispersivité transversale : 0 m)
- Macropore (Drain-conduit)
 - Diffusion : 0 m²/s.

Conditions aux limites :

- Pression imposée = 0 en bas de la colonne.
Dans la matrice poreuse et le macropore (État de saturation).
- Débit injecté en surface = 45 L/jour : dans la matrice poreuse.
- Débit injecté en surface = 5 L/jour : dans le macropore.
On remarque que pour être plus démonstratif on injecte 1/10 du débit total dans le macropore, alors que sa section représente uniquement 1 % de la section totale.

Pulse de concentration pendant 1 jour :

- Concentration égale à 100 (mg/L) dans l'eau injectée : de 0 à 1 jour dans la matrice poreuse et dans le macropore.
- Concentration égale à 0 dans l'eau injectée : après 1 jour.

État initial :

- Teneur en eau initiale = 36.85 % dans la matrice poreuse (sauf dans la maille du bas, dans laquelle la pression est imposée).
- Teneur en eau initiale = 48 % dans le macropore (sauf dans la maille du bas dans laquelle la pression est imposée).
- Concentration = 0 (matrice poreuse et macropore).

Régime d'écoulement :

- Hydraulique : Régime permanent.
- Transport : régime transitoire pendant 45 jours.

Paramètres numériques :

- Nombre d'itérations externes de calcul pour l'hydraulique = 100
- Coefficient de sous-relaxation pour le calcul de l'hydraulique = 0.2

Unités pour la modélisation :

On choisit comme unités :

- Perméabilité = cm/jour
- Maillage = cm
- Hauteurs, charges = cm
- Débit = L/jour
- Temps = jour
- Porosité = %
- Concentration = mg/L

29.2. FICHIERS DE DONNÉES**Fichier « Profil d'utilisation » :**

Avec le préprocesseur de données non maillées, on crée un profil d'utilisation avec les options suivantes :

- Régime transitoire
- Transport de masse classique
- Zone Non Saturée
- Drains

```
1 = Régime Transitoire
1 = Transport de masse Classique
1 = Zone Non Saturée
2 = Rivières, Drains, Lacs (1=Rivières et/ou Lacs ; 2=Drains ; 3=tous les 3)
```

Fichier des « Paramètres Généraux »

Dans le fichier des paramètres [.mart] on définit avec le préprocesseur :

Paragraphe : Contrôle de la Résolution Hydrodynamique :

0 = Nombre Maxi d'itérations par pas de temps calcul suivant le pas n°0
 100 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)
 1e-7 = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour convergence
 0.2 = Coefficient de sous-relaxation des calculs
Perman = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe : Unités des données :

cm/J = Unité de Perméabilité des aquifères en m/s (ou m2)
L/J = Unité de Débit en m3/s
cm = Unité de Charge, Altitude, Pression en m
Jour = Unité de Temps (des Pas de temps de modèle)
cm = Unité de Coordonnées Horizontales
mg/L = Unité de Concentration en kg/m3
% = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-] (*pour le régime transitoire*)

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 » :

200 = Nombre maxi d'itérat *Transport* Salinité/Chaleur/Concentr. [Déf=20]
DF = Schéma de Transport [0=D_Finies ; 1=Random_W ; 2=Caract=MOC ; 3=TVD]
 1e-2 = Dispersivité Longitudinale (m)

Paragraphe : Concentration et Trajectoires :

1 = Calcul de la Concentration
 1e-6 = Variation moyenne de Concentration entre 2 itérations pour convergence
Transit = Régime du Transport de Concentration [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe : Zone Non-Saturée et Multiphasique :

1 = Calcul en Zone Non Saturée [0=Non ; 1=Oui]
 0 = Succion maximale <=> Assèchement maximal (en unité de charge)
 1e-7 = Perméabilité minimale (pour sécurité numérique)
Van_Gen = Loi Rétention Drain_Conduit [1=Homograph. ; 2=Puissance ; etc.]
Puiss = Loi de Perméabilité des Drain_Conduit [2=Puiss(Saturat.) etc.]
 10 = Succion à 1/2 saturation pour les Drains_Conduits en ZNS
 0.625 = Exposant de la loi de Rétention des Drains_Conduits en ZNS
 1 = Exposant de la loi de Perméab. des Drains_Conduits (sauf si loi V.Genuch.)

Paragraphe : Réseau Hydrographique, Drains, Lacs :

2 = Couplage avec un système de Drains [0=Non ; 1=Drains ; **2=Conduits**]
 0 = Nombre maximal de tronçons de Drains [Déf=0 => 1500]
 1 = Tous les drains conduits sont verticaux [0=Non ; 1=Oui : **Tous verticaux**]

Paragraphe : Initialisation avant calculs :

```

[Champs pour la matrice poreuse]
 /ZONE_GEOM/GRILLE      N: =1 [On définit Zone n°1 = Toutes les mailles]
 /PERMEAB/ZONE_GEO     Z= 1V= 50;
 /POROSITE/ZONE_GEO    Z= 1V= 43;
 /SATUR_RESI/ZONE_GEO  Z= 1V= 8;

[Champs de Non Saturé relatifs à la Zone n°1]
 /PARA_NON_SATU/ZONE_GEO Zon= 1; Loi_Retent=Van_Gen; Succ_Reten= 25;
                                     Expos_Reten= 0.625;
 /PARA_NON_SATU/ZONE_GEO          Loi_Perméa=Van_Gen; Expos_Perm= 0;
                                     Succ_Perméa= 0;
 /SATURAT/GRILLE            N: =36.85538

[Champs pour le macropore (Drain-Conduit)]
 /AFFLU_DRAIN/MAILLE     C= 1L= *P= 1V= 1;
 /LARG_DRAIN/TRONCON     A= 1T= *V= 10;
 /ALTIT_DRAIN/TRONCON    A= 1T= *V= 9999; [Valeur par défaut]
 /PERM_ECH_DRAI/TRONCON  A= 1T= *V= 1;
 /CONDUC_DRAIN/TRONCON   A= 1T= *V= 250;
 /SATUR_DRAIN/GRILLE     N: =48
 /PRESSION/MAILLE        C= 1L= 201P= 1V= 0;
 /PRESS_DRAIN/MAILLE     C= 1L= 201P= 1V= 0;

[Impose le potentiel (ici la pression) en bas de la matrice poreuse et du Macropore]
 /DEBIT/MAILLE           C= 1L= 201P= 1V= 9999;
 /Q_EXT_DRAIN/MAILLE     C= 1L= 201P= 1V= 9999;

```

Fichier des « Pas de temps »

Dans le fichier des pas de temps [.pastp] on définit avec le préprocesseur :

Les dates de fin de pas de temps :

- 0, 0.01, 0.05, 0.1 jour
 - 0.2 jour à 1 jour : par pas de temps de 0.2 jour.
 - 1.01 jour
 - 1.2 jour à 5 jours : par pas de temps de 0.2 jour.
 - 5 jours à 45 jours : par pas de temps de 1 jour.
- Au pas de temps n°0 : On définit les débits d'injection (45 L/j et 5 L/j dans la maille de ligne n°1, respectivement pour la matrice poreuse et le macropore) :

```

 /DEBIT/MAILLE           C= 1L= 1P= 1V= 45;
 /Q_EXT_DRAIN/MAILLE     C= 1L= 1P= 1V= 5;

```

(Pour le calcul de l'hydraulique en régime permanent).

- Au premier pas de temps, qui se termine à la date 0.01 jour : On définit la concentration extérieure égale à 100 mg/L. C'est la concentration dans le débit injecté, dans la matrice et dans le macropore :

```
/CONCEN_EXT/MAILLE      C= 1L= 1P= 1V= 100;
/CONC_EXT_DRAI/MAILLE   C= 1L= 1P= 1V= 100;
```

- Au pas de temps, qui se termine à la date 1.01 jour (et qui débute à la date 1 jour) : On définit la concentration extérieure égale à 0 mg/L. C'est la concentration dans le débit injecté, dans la matrice et dans le macropore à partir de 1 jour :

```
/CONCEN_EXT/MAILLE      C= 1L= 1P= 1V= 0;
/CONC_EXT_DRAI/MAILLE   C= 1L= 1P= 1V= 0;
```

Sauvegardes des valeurs calculées :

Au pas de temps n°0 : Dans le fichier des « pas de temps », on demande la sauvegarde des champs d'hydraulique calculés en régime permanent :

- « CHARGE », « PRESSION », « SATURAT » : dans la matrice poreuse
- « DEBIT_DRAIN », « QECH_DRAI_NAP », « SATUR_DRAIN », « PRESS_DRAIN » : dans le macropore

Aux pas de temps suivants : On demande la sauvegarde de la concentration calculée dans la matrice poreuse : « CONCENTR » et dans le macropore « CONCEN_DRAIN »

Fichier des « Mailles à historiques »

Avec le préprocesseur des données non maillées, on crée un fichier de « mailles à historiques », d'extension de fichier [.histo]

On demande la sauvegarde des historiques de :

- Concentration dans la matrice « Concentr » : mailles de ligne n°50, 100, 150 et 201
- Concentration dans le macropore « Concen_Drain » : mailles de ligne n°50, 100, 150 et 201
- Également du « débit » de la ligne n°201 et le « Débit_Drain » de la ligne n°200 : pour calculs de concentrations pondérées.

29.3. RÉSULTATS DE LA SIMULATION EN RÉGIME TRANSITOIRE

Lancement des calculs.

Les calculs s'exécutent en une fraction de seconde, et on vérifie qu'ils ont parfaitement convergé. Le fichier « chasimsq.prn » contient les sauvegardes des profils. Le fichier « historiq.prn » contient les historiques d'évolution demandés. Ces fichiers permettent de visualiser immédiatement les résultats.

La Figure 148 montre le profil de pression et le profil de teneur en eau dans la matrice poreuse et le macropore. Elle montre également le profil de débit dans le macropore. Comme le

macropore est généralement à une pression inférieure à celle de la matrice, il draine le milieu poreux et son débit augmente de 5 L/j à 10 L/j.

La Figure 149 montre l'évolution du profil de concentration dans le macropore (le « pulse » passe très vite), et dans la matrice poreuse (le pulse est beaucoup plus lent).

La Figure 150 montre que le pic de concentration arrive en bas de la colonne après environ 2 jours dans le macropore et après 18 jours dans la matrice poreuse. La Figure 151 montre la concentration dans le flux de recharge en bas de la colonne. C'est la moyenne des concentrations des deux domaines, pondérées par leurs débits respectifs.

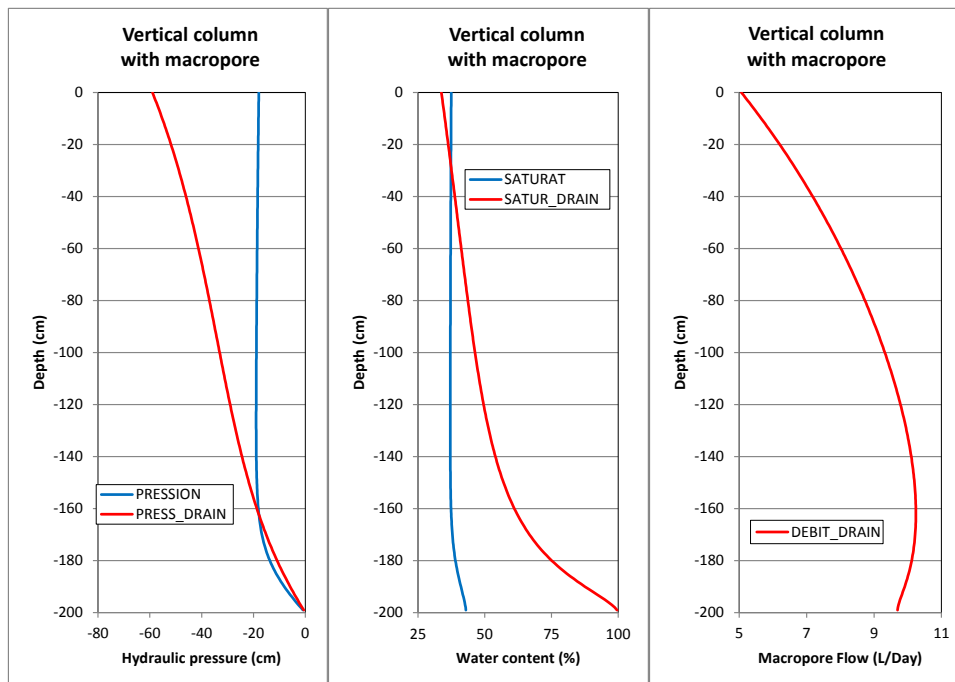


Figure 148 – Profil de pression et de teneur en eau dans la matrice poreuse et dans le macropore (à gauche et au centre). À droite : Profil de débit dans le macropore.

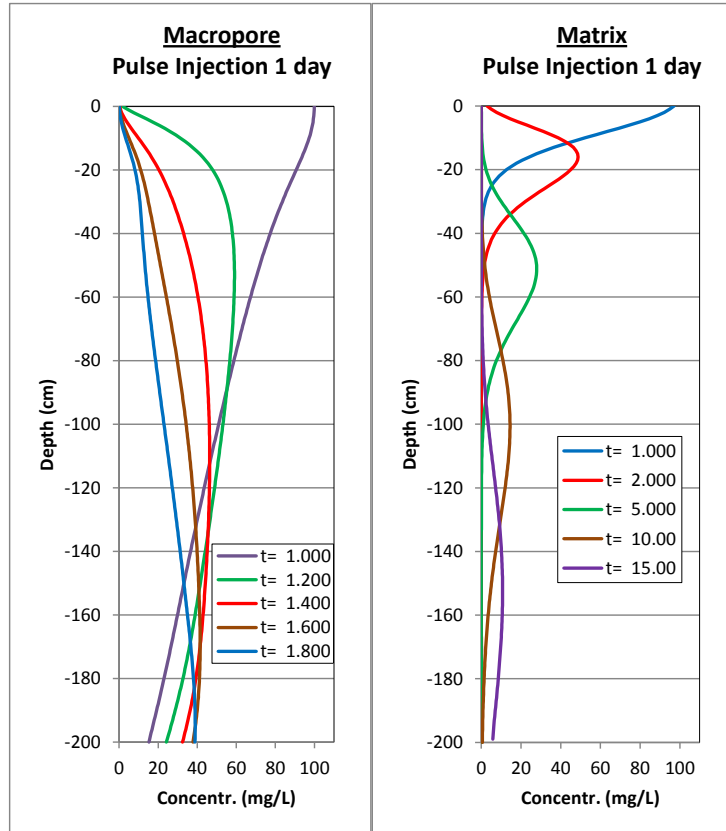


Figure 149 – Profil de concentration.
 À gauche : dans le macropore de 1 à 1.8 jour). À droite : dans la matrice de 1 à 15 jours.

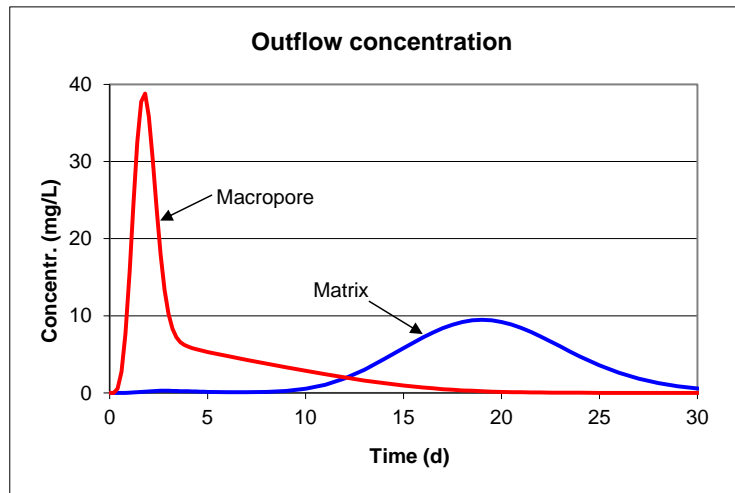


Figure 150 – Évolution de la concentration à la base de la colonne : dans le macropore et dans la matrice poreuse.

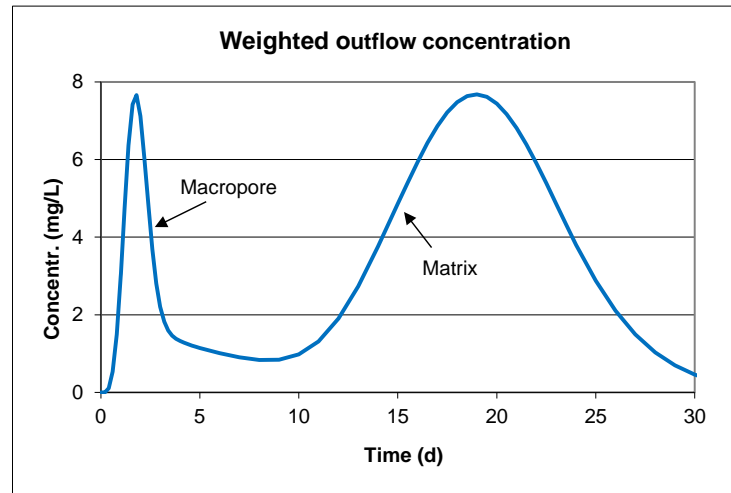


Figure 151 – Concentration pondérée dans le flux à la base de la colonne.

30. Exemple n°20 : Écoulement multiphasique. Infiltration de tétrachloréthylène dans un milieu sableux stratifié initialement saturé en eau

Cet exemple montre comment simuler les écoulements multiphasiques.

L'exemple est décrit et modélisé par Kueper & Frind (1991). Il s'agit de l'infiltration de tétrachloréthylène (TCE) (ou perchloréthylène) dans un milieu sableux stratifié initialement saturé en eau. Le domaine est une tranche verticale de 6 cm d'épaisseur formée de 4 zones de sables différents (Figure 152). Le milieu est initialement saturé en eau, et on injecte du TCE sur une partie de sa limite supérieure. On calcule alors la progression du TCE, qui est un fluide non mouillant, donc non miscible avec l'eau. En réalité le milieu sableux est compris entre 2 plaques de verre, ce qui permet de suivre visuellement la progression du TCE et de vérifier les résultats de la modélisation.

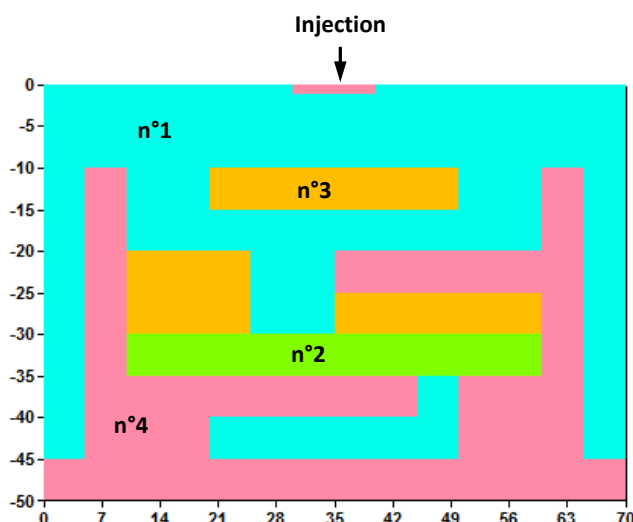


Figure 152 – Écoulement diphasique dans un massif hétérogène.
Géométrie du domaine (dimensions en cm) et numéros des zones de sable.

30.1. DÉFINITION DU SYSTÈME MODÉLISÉ

Les caractéristiques du système sont les suivantes :

Géométrie :

Il y a 4 zones de sable, n°1 à n°4 : Figure 152. On définit une 5^{ème} zone qui correspond à la zone d'injection du fluide non mouillant. Cette zone est en fait une partie de la zone n°1. Elle a donc les mêmes propriétés que la zone n°1

Modélisation en coupe verticale :

- Largeur = 70 cm.
- Hauteur = 50 cm.
- Épaisseur de la tranche de coupe = 6 cm.

Discrétisation :

Le domaine est découpé en mailles carrées de 1.25 cm de côté. Il y a donc :

- 40 lignes : de 0 à -50 cm
- 56 colonnes : de 0 à 70 cm.

Paramètres hydrodynamiques :

Les paramètres hydrodynamiques des 4 zones sont rassemblés dans le Tableau 8.

On remarque que les perméabilités à saturation des zones n°2 à n°4 sont respectivement : 2.5 fois, 10 fois et 61 fois plus faibles que celle de la zone n°1.

La loi de rétention et la loi de perméabilité relative des 4 zones sont des lois de Brooks & Corey.

Paramètre	Zone 1	Zone 2	Zone 3	Zone 4
Perméabilité intrinsèque (10^{-11} m^2)	50.4	20.5	5.26	0.819
Porosité (%)	40	39	39	41
Saturation résiduelle	0.078	0.069	0.098	0.189
Succion à $\frac{1}{2}$ saturation (cm)	3.77	4.43	13.5	33.1
Exposant λ Brooks & Corey	3.86	3.51	2.49	3.30
Pour MARTHE :				
Teneur en eau résiduelle (%)	3.12	2.691	3.822	7.749
Succion à $\frac{1}{2}$ saturation (cm)	3.77	4.43	13.5	33.1
Exposant Brooks & Corey MARTHE	0.2591	0.2849	0.4016	0.303

Tableau 8 – Paramètres hydrodynamiques des 4 sables (des 4 zones).

Propriétés du fluide non mouillant (TCE) :

- Densité par rapport à l'eau = 1.63 (soit 1630 kg/m^3).
- Viscosité dynamique = $0.9 \cdot 10^{-3} \text{ Pa.s}$

Conditions aux limites :

- Limites supérieure et inférieure = Étanches.
- Limites latérales : Saturées en eau, charge hydraulique = 0.

Zone d'injection :

- 10 cm de large au centre de la limite supérieure
- Charge hydraulique imposée du TCE = 4 cm.
- Teneur en eau = 24.8 %

État initial :

- Teneur en eau initiale = porosité (donc saturé en eau).
- Charge hydraulique de l'eau = 0

Régime d'écoulement :

- Régime transitoire calculé pendant 220 secondes.

Paramètres numériques :

- Nombre d'itérations externes de calcul pour l'hydraulique = 40
- Coefficient de sous-relaxation pour le calcul de l'hydraulique = 0.2
- Et pour les calculs diphasiques :**
- Durée minimale du pas de temps de calcul interne = 3 secondes
- Durée maximale du pas de temps de calcul interne = 4.5 secondes
- Variation maximale de teneur en eau pendant le pas de temps de calcul = 10 unités de teneur en eau = 10 %
- Erreur maximale de bilan acceptée = 2 % de bilan
- Perméabilité minimale (pour sécurité numérique) = 10^{-4} (unités de perméabilité)
- Variation de saturation pour convergence si diphasique (en teneur en fluide) = 10^{-3} %
- Saturation minimale des phases en multiphasique = 10^{-15} %
- Schéma multiphasique : Valeur par défaut => « **Pression_Eau , Saturation** »

Unités pour la modélisation :

On choisit comme unités :

- Perméabilité : en 10^{-11} m² (perméabilité intrinsèque)
- Maillage : en cm
- Hauteurs, charges : en cm
- Débit : (sans objet)
- Temps : en seconde
- Porosité : en %

30.2. FICHIERS DE DONNÉES**Fichier « Profil d'utilisation » :**

Avec le préprocesseur, on crée un profil d'utilisation avec les options suivantes :

- Régime transitoire
- Multiphasique

1 = Régime Transitoire
1 = Multiphasique

Fichier des « Paramètres Généraux »

Dans le fichier des paramètres [.mart] on définit avec le préprocesseur :

Paragraphe : Contrôle de la Résolution Hydrodynamique :

40 = Nombre Maxi d'itérations par pas de temps calcul suivant le pas n°0
0 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)
1e-7 = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour convergence
0.2 = Coefficient de sous-relaxation des calculs
Transit = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe : Unités des données :

1e-11 = Unité de Perméabilité des aquifères en m/s (ou **m2**)
cm = Unité de Charge, Altitude, Pression en m
Second = Unité de Temps (des Pas de temps de modèle)
cm = Unité de Coordonnées Horizontales
% = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-] (pour le régime transitoire)
1 = Type de Perméabilité : (Déf=0 => Perméa. à l'eau ; **1=Perméa intrinsèque**)
 [Facultatif car on n'impose pas de débits :]
cm3/s = Unité de Débit en m3/s
cm3 = Unité de Volume d'eau (ou de stock) en m3

Paragraphe : « Options de Géométrie, États de Référence, Processeurs » :

6 = 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
1e-3 = Viscosité (dynamique) de l'Eau si utilise Perméa. Intrins [Déf=0 => 1.002e-3]

Paragraphe : Zone Non-Saturée et Multiphasique :

3 = Durée minimale du pas de temps de calcul interne
4.5 = Durée maximale du pas de temps de calcul interne
10 = Variation maximale de teneur en eau pendant le pas de temps de calcul
3 = Erreur maximale de bilan acceptée [**en %** ou en volume d'eau]
2 = Type erreur de bilan [0=% CVG_Interne ; 1=Bil Glo volume ; 2=Bil Glo en %]
1e-4 = Perméabilité minimale (pour sécurité numérique) [*soit $10^{-15} m^2$*]
1e-3 = Var. de saturat pour CVG si diphasique en teneur en eau [Déf=0 => 1e-4 %]
1e-15 = Saturation minimale des phases (%) en Multiphasique [Déf=0 => 0.01 %]

Paragraphe : Eau, Gaz, Huile, Eau Salée :

1 = Calcul de la Phase Eau [0=Non ; **1=Oui**]
0 = Calcul de la Phase Gaz (Air) [0=Non ; 1=Oui ; 2=Toujours Atmosphérique]
1 = Calcul de la Phase Huile, Eau Salée (NAQ) [0=Non ; **1=Oui** ; 2=Eau Salée]
0 = Schéma multiphasique
 [**1=Press_Aqu,Satur** ; **2=Press_Aqu,Press_Naq** ; **3=Press_Naq,Satur** ; **0=Automatique**]

Paragraphe : Écoulement d'Huile, Eau Salée, NAQ :

1.63 = Densité de l'Huile, Eau Salée, NAQ [Déf=0 => 1.0]
9e-4 = Viscosité de l'Huile, Eau Salée, NAQ [Déf=0 => 1.002e-3 Pa.s]

Paragraphe : Initialisation avant calculs :

```

[Champs définis par zone (la zone n°5 est identique à la zone n°1)]
[Perméabilité, Porosité, Teneur en eau résiduelle]
/PERMEAB/ZONE_GEO      Z= 5V=  50.4;
/PERMEAB/ZONE_GEO      Z= 1V=  50.4;
/PERMEAB/ZONE_GEO      Z= 2V=  20.5;
/PERMEAB/ZONE_GEO      Z= 3V=  5.26;
/PERMEAB/ZONE_GEO      Z= 4V=  0.819;

/POROSITE/ZONE_GEO     Z= 5V=   40;
/POROSITE/ZONE_GEO     Z= 1V=   40;
/POROSITE/ZONE_GEO     Z= 2V=   39;
/POROSITE/ZONE_GEO     Z= 3V=   39;
/POROSITE/ZONE_GEO     Z= 4V=   41;

/SATUR_RESI/ZONE_GEO   Z= 5V=   3.12;
/SATUR_RESI/ZONE_GEO   Z= 1V=   3.12;
/SATUR_RESI/ZONE_GEO   Z= 2V=  2.691;
/SATUR_RESI/ZONE_GEO   Z= 3V=  3.822;
/SATUR_RESI/ZONE_GEO   Z= 4V=  7.749;

[Lois caractéristiques (Loi de rétention et de perméabilité relative) des 5 zones]
/PARA_NON_SATU/ZONE_GEO  Zon= 5; Loi_Retent= Brooks; Succ_Reten=  3.77;
                               Expos_Reten= 0.2591;
/PARA_NON_SATU/ZONE_GEO                               Loi_Perméa= Brooks; Expos_Perm=  0;
/PARA_NON_SATU/ZONE_GEO  Zon= 1; Loi_Retent= Brooks; Succ_Reten=  3.77;
                               Expos_Reten= 0.2591;
/PARA_NON_SATU/ZONE_GEO                               Loi_Perméa= Brooks; Expos_Perm=  0;
/PARA_NON_SATU/ZONE_GEO  Zon= 2; Loi_Retent= Brooks; Succ_Reten=  4.43;
                               Expos_Reten= 0.2849;
/PARA_NON_SATU/ZONE_GEO                               Loi_Perméa= Brooks; Expos_Perm=  0;
/PARA_NON_SATU/ZONE_GEO  Zon= 3; Loi_Retent= Brooks; Succ_Reten= 13.5;
                               Expos_Reten= 0.4016;
/PARA_NON_SATU/ZONE_GEO                               Loi_Perméa= Brooks; Expos_Perm=  0;
/PARA_NON_SATU/ZONE_GEO  Zon= 4; Loi_Retent= Brooks; Succ_Reten= 33.1;
                               Expos_Reten= 0.303;
/PARA_NON_SATU/ZONE_GEO                               Loi_Perméa= Brooks; Expos_Perm=  0;

[Initialisation de la charge Huile à 0, puis de la charge eau à 0]
/CHARGE_HUILE/GRILLE/FIX=AQU;      N:=0
/CHARGE/GRILLE/FIX=NAQ;             N:=0

[Initialisation de la teneur en eau (« SATURAT ») égale à la porosité]
[Mais en conservant la charge de l'eau (Fix = Aqu)]
/SATURAT/ZONE_GEO/FIX=AQU;          Z= 5V=  40;
/SATURAT/ZONE_GEO/FIX=AQU;          Z= 1V=  40;
/SATURAT/ZONE_GEO/FIX=AQU;          Z= 2V=  39;
/SATURAT/ZONE_GEO/FIX=AQU;          Z= 3V=  39;
/SATURAT/ZONE_GEO/FIX=AQU;          Z= 4V=  41;

[Condition à la limite dans la zone d'injection en surface (zone n°5)]
[On impose une charge d'huile = 4 cm]
[On impose une Teneur en eau = 24.8 % (en conservant la charge de l'huile)]
[ (ce qui impose la charge de l'eau)]
/CHARGE_HUILE/ZONE_GEO/FIX=AQU;     Z= 5V=   4;
/SATURAT/ZONE_GEO/FIX=NAQ;          Z= 5V= 24.8;
/DEBIT/ZONE_GEO                     Z= 5V= 9999;
/DEBIT_HUILE/ZONE_GEO               Z= 5V= 9999;

[Limite latérale : colonne n°1 et n°56 => On impose les charge d'eau et d'Huile]
/DEBIT/MAILLE                       C= 1L= *P= 1V= 9999;
/DEBIT/MAILLE                       C= 56L= *P= 1V= 9999;
/DEBIT_HUILE/MAILLE                 C= 1L= *P= 1V= 9999;
/DEBIT_HUILE/MAILLE                 C= 56L= *P= 1V= 9999;

```

Fichier des « Pas de temps »

Dans le fichier des pas de temps [.pastp] on définit avec le préprocesseur :

Les dates de fin de pas de temps :

- 0, 0.5, 2, 10 secondes
- 10 secondes à 100 secondes : par pas de temps de 10 secondes.
- 130, 180 et 220 secondes.

En fait, ces dates servent surtout pour la sauvegarde de résultats de calcul puisque les pas de temps de calcul sont calculés automatiquement pour rester compris entre la valeur minimale et la valeur maximale spécifiée dans le fichier des paramètres : c'est-à-dire 3 et 4.5 secondes.

Sauvegardes des valeurs calculées :

Aux dates 0, 0.5, 2, 10, 30, 130, 180, 220 secondes, on demande la sauvegarde des champs :

- De charge hydraulique des 2 phases : « CHARGE » et « CHARGE_HUILE ».
- De la teneur en phase Non-Aqueuse (NAQ) donc du TCE : « SATUR_NAQ ».
On peut également demander (2^{ème} indice) le ratio de TCE par rapport à la saturation en fluide (en %), donc par rapport à la porosité : Le champ obtenu s'appellera « SATUR_NAQ_% »
C'est ce champ « SATUR_NAQ_% » qu'il sera intéressant de cartographier.
- Des débits des 2 phases : « DEBIT » et « DEBIT_HUILE ».

30.3. RÉSULTATS DE LA SIMULATION

Lancement des calculs.

Les calculs s'exécutent en une vingtaine de secondes (ordinateur de bureau de 2015), et on vérifie qu'ils ont bien convergé. Le cumul des écarts de volume de TCE est inférieur à 0.1 %.

Le fichier « chasim.out » contient les sauvegardes des champs demandés. Il permet de visualiser les résultats dans WinMarthe.

La Figure 153 montre que la simulation avec le code MARTHE est très proche des observations de l'expérience de Kueper & Frind (1991).

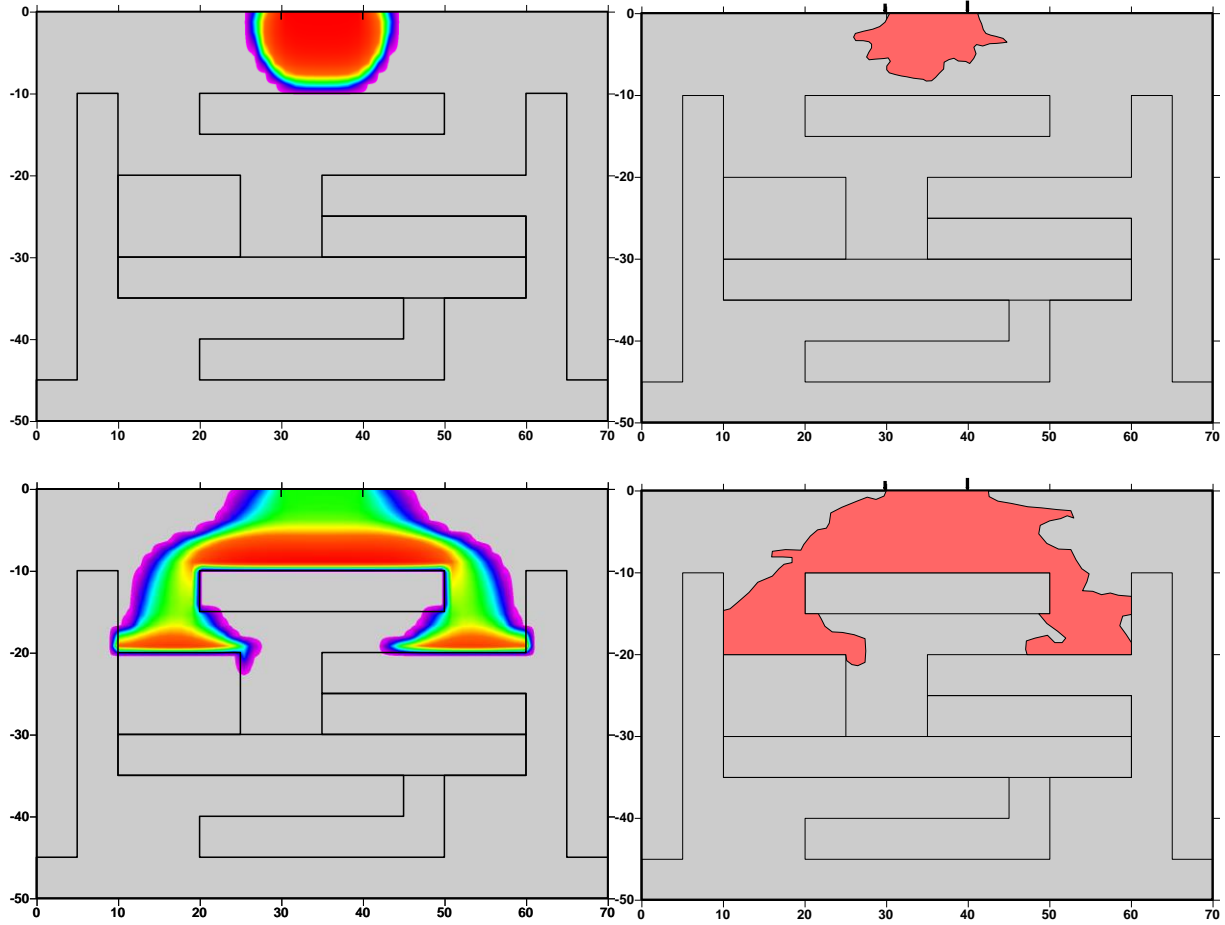


Figure 153 – Écoulement diphasique dans un massif hétérogène.

À gauche : modélisation MARTHE ; à droite observation (expérience de Kueper & Frind)
 En haut après 30 secondes (simulé) et 34 s. (observé). En bas après 180 s. (simulé) et 184 s (observé).

31. Exemple n°21 : Écoulement dans un aquifère contenant un lac

Cet exemple montre comment simuler les écoulements dans un système contenant un lac et en relation avec les forçages climatiques : la pluie et l'évapotranspiration. Il utilise la fonctionnalité de « Lacs » de MARTHE.

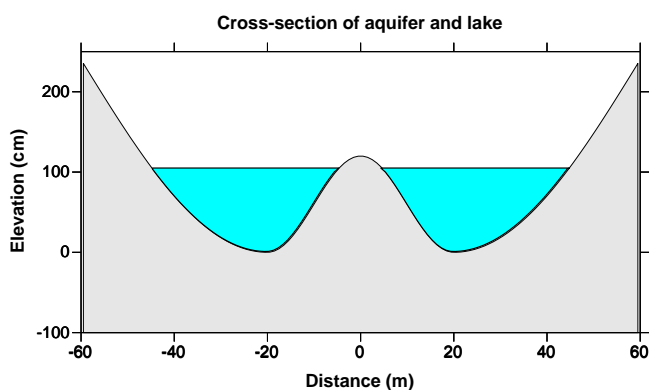


Figure 154 – Système aquifère contenant un lac. Vue en coupe verticale.

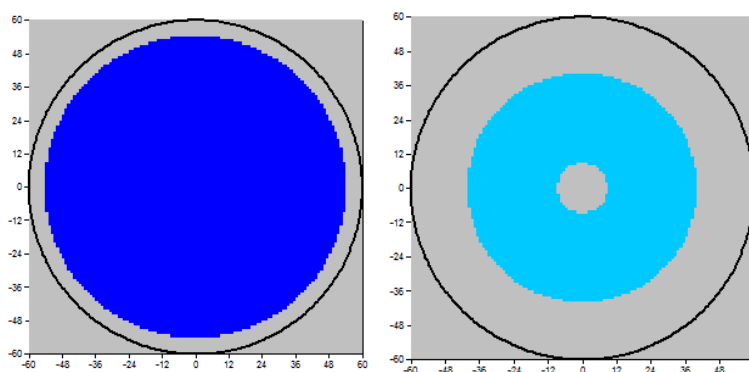


Figure 155 – Système aquifère contenant un lac. Vue du dessus.

31.1. DÉFINITION DU SYSTÈME MODÉLISÉ

Les caractéristiques du système sont les suivantes :

Géométrie :

L'aquifère a une épaisseur d'environ une quinzaine de mètres. La topographie présente un creux qui peut être rempli par un lac (Figure 154). Ce creux comporte une remontée qui peut faire apparaître une île quand le lac n'est pas très rempli (Figure 155).

Le système a été modélisé en monocouche. Compte tenu de la symétrie radiale, pour simplifier la définition de la géométrie on a utilisé une discrétisation en radial jusqu'à un rayon de 60 mètres.

Discrétisation :

Le domaine est formé d'une ligne de 60 colonnes de largeur égale à 1 mètre. Ces 60 colonnes correspondent à 60 couronnes de 360 degrés d'angle.

Le substratum est à l'altitude -11 mètres.

Avec WinMarthe, on crée donc un nouveau projet et on choisit un maillage régulier de :

- Origine des x = 0
- Origine des y = 0
- 60 colonnes, de largeurs = 1 mètre
- 1 ligne, de hauteur = 360 (degrés, car c'est un maillage en radial)
- 1 couche, d'épaisseur = 1100 cm (car on choisira une unité de charge en cm)

Altitude de la topographie :

L'altitude de la topographie, qui est le fond du lac, est donnée par la relation suivante :

- Rayons jusqu'à 20 mètres : Altitude en cm : $z = 60 \cdot \left[1 + \cos \left(2\pi \cdot \frac{R}{40} \right) \right]$
- Rayons de 20 mètres à 60 mètres : Altitude en cm : $z = 240 \cdot \left[1 - \cos \left(2\pi \cdot \frac{R-20}{160} \right) \right]$

Les valeurs sont reportées dans le Tableau 9 pour faciliter la définition de champ de topographie avec le préprocesseur WinMarthe. L'altitude varie de 0.04 cm à 235 cm ($4 \cdot 10^{-4}$ m à 2.35 m)

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
119.8	118.3	115.4	111.2	105.6	99	91.3	83	74	64.7	55.3	46	37	28.7	21
16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
14.4	8.84	4.57	1.66	0.18	0.046	0.42	1.16	2.26	3.74	5.58	7.78	10.3	13.2	16.5
31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45
20.1	24.1	28.3	32.9	37.9	43.1	48.6	54.5	60.6	67	73.7	80.6	87.7	95.1	102.8
46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60
110.6	118.6	126.9	135.3	143.8	152.5	161.4	170.3	179.4	188.6	197.8	207.1	216.5	225.9	235.3

Tableau 9 – Altitude de la topographie (en cm) dans les 60 colonnes (couronnes) du modèle.

Paramètres hydrodynamiques :

Les paramètres hydrodynamiques du système sont les suivants :

Aquifère :

- Perméabilité de l'aquifère : $K = 10^{-5}$ m/s
- Coefficient d'emmagasinement libre = 10 %
- Coefficient d'emmagasinement captif = 10^{-3} (sans unité)
- Porosité : $\omega = 10$ % (inutilisé)

Lac :

- Épaisseur du lit : 5 cm
- Perméabilité du lit: $K_{Lit} = 10^{-8}$ m/s.

Conditions aux limites :

- Charge imposée sur la limite extérieure (colonne n°60, à la distance radiale 59.5 m).

État initial :

- Charge hydraulique uniforme dans l'aquifère = -100 cm (-1 m).
- Niveau d'eau (absolu) initial dans le Lac = -20 cm (-0.2 m), c'est-à-dire complètement sec.

Régime d'écoulement :

- Régime transitoire calculé pendant une période de 360 jours.

Découpage du temps :

La période de calcul de 360 jours découpés en 364 pas de temps : 3 pas de temps de durée 0.1 jour, 1 pas de temps de 0.2 jour, 1 pas de temps de 0.5 jour et 359 pas de temps de 1 jour.

La simulation comprend 2 périodes :

- De : 0 à 60 jours : Pluie = 40 mm/j sur toute la zone ; ETP = 0
- De : 60 à 360 jours : Pluie = 0 et ETP = 10 mm/j

Au cours de la 1^{ère} période, on aura donc une remontée du lac (et de la nappe) sous l'influence de la pluie qui arrive sur toute la superficie du lac (mais ne recharge pas directement à l'aquifère).

Au cours de la 2^{ème} période, l'évaporation s'applique à la superficie du lac qui est en eau et le lac se vidangera rapidement au début, puis d'autant moins vite que la surface du lac diminuera.

Unités pour la modélisation :

On choisit comme unités :

- Perméabilité : en 10^{-6} m/s
- Débit : en 10^{-5} m³/s
- Maillage : en m
- Hauteurs, charges : en cm
- Emmagasinement libre : en %
- Temps : en jours
- Pluie, recharge : en mm/jour
- Porosité : %

31.2. FICHIERS DE DONNÉES

Fichier « Profil d'utilisation » :

Avec le préprocesseur de données non maillées, on crée un profil d'utilisation avec les options suivantes :

- Régime transitoire
- Rivières et Lacs

1 = Régime Transitoire
 1 = Rivières, Drains, Lacs (1=Rivières et/ou Lacs ; 2=Drains ; 3=tous les 3)

Fichier « Couches aquifères et Gigognes » :

Avec le préprocesseur de données non maillées, on adapte le fichier des couches pour choisir un « maillage radial » :

*** Sous-maillages Gigognes, Coupe, Radial ***
 1 = Maillage Radial [Rayon , Angle] (0=Non ; 1=Oui)

Fichier des « Paramètres Généraux »

Dans le fichier des paramètres [.mart] on définit avec le préprocesseur :

Paragraphe : Contrôle de la Résolution Hydrodynamique :

50 = Nombre Maxi d'itérations par pas de temps calcul suivant le pas n°0
 30 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)
 1e-6 = Variation moyenne de Charge entre 2 itérations pour convergence
 0 = Coefficient de sous-relaxation des calculs (valeur par défaut)
Transit = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]

Paragraphe : Unités des données :

1e-6 = Unité de Perméabilité des aquifères en m/s
 1e-5 = Unité de Débit en m3/s
 cm = Unité de Charge, Altitude, Pression en m
 % = Unité de coefficient d'Emmagasinement Libre en [-]
Jour = Unité de Durée Hydroclimatique (seconde, minute, heure, jour, etc.)
Jour = Unité de Temps (des Pas de temps de modèle)
 % = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-] (*pour le régime transitoire*)

Paragraphe : « Réseau Hydrographique, Drains, Lacs » :

0 = Couplage avec un Réseau Hydrographique [0=Non ; 1=Oui]
 1 = Couplage avec un ensemble de Lacs [0=Non ; 1=Oui]
 50 = Nombre maximal d'itérations pour le calcul des Lacs
 900 = Profondeur maximale possible pour les Lacs (sécurité)

Paragraphe : Initialisation avant calculs :

/PERMEAB/GRILLE	N: =10
/H_SUBSTRAT/GRILLE	N: =-1100 [c'est-à-dire -11 m exprimé en cm]
/DEBIT/MAILLE	C= 60L= 1P= 1V= 9999; [Limite externe Charge imposée]
/NUM_LAC/MAILLE	C= 1:60 L= 1P= 1V= 1001; [Définit le lac n°1001 partout]
/EPAI_LIT_LAC/TRONCON	A= 1001T= *V= 5;
/PERM_LIT_LAC/TRONCON	A= 1001T= *V= 1e-2;
/NIVEAU_LAC/TRONCON	A= 1001T= *V= -20;
/EMMAG_LIBR/GRILLE	N: =10
/EMMAG_CAPT/GRILLE	N: =1e-3
/POROSITE/GRILLE	N: =10
/CHARGE/GRILLE	N: =-100
/ZONE_SOL/GRILLE	N: =1 [Tout le domaine : Zone de sol n°1 : pour la Pluie]

Remarque : Un lac est défini par un « Numéro de Lac », qui correspond à un « Numéro d'affluent » pour les rivières. En revanche, il n'a pas de « Numéro de tronçon » puisque les mailles d'un lac ne sont pas ordonnées. Il n'est donc pas possible de définir des champs en utilisant le numéro de lac dans une modification « Par Tronçon ». Cependant il est possible d'introduire une modification « Par Lac » si on désigne toutes ses mailles comme ci-dessus. En résumé : « PERM_LIT_LAC/TRONCON A= 1001 T= * V= 1e-2 » est permis, mais : « PERM_LIT_LAC/TRONCON A= 1001 T= 5 V= 1e-2 » n'est pas pris en compte.

Fichier des « Pas de temps »

Dans le fichier des pas de temps [.pastp] on définit avec le préprocesseur :

Les dates de fin de pas de temps selon des durées croissantes :

- 0.1 jour pour les 3 premiers pas de temps
- 0.2 jour et 0.5 jours pour les pas de temps n°4 et n°5.
- 1 jour pour les pas de temps n°6 à 364.

Pour faire cette opération : le plus simple est de générer automatiquement 359 pas de temps de durée 1 jour, puis d'ajouter ultérieurement en début 5 pas de temps plus petits avec le préprocesseur.

Dans le fichier des pas de temps, on définit les valeurs du flux de pluie et du flux d'ETP :

- de : 0 à 60 jours : Pluie = 40 mm/j sur toute la zone ; ETP = 0 mm
valeurs introduites au pas de temps n°1, qui commence à 0 jour (et se termine à 0.1 jour).
- de : 60 à 360 jours : Pluie = 0 et ETP = 10 mm/j
valeurs introduites au pas de temps n°65, qui commence à 60 jours (et se termine à 61 jours).

Dans le fichier des pas de temps, on demande également la sauvegarde de certains champs calculés.

Sauvegardes des valeurs calculées :

Aux dates : 5 jours et 30 jours on demande la sauvegarde des champs :

- De charge hydraulique : « CHARGE ».
- Du niveau du Lac : « NIVEAU_LAC ».

On pourrait également demander la sauvegarde des champs :

- De Débit Lac « DEBIT_LAC » pour obtenir les termes du bilan des Lacs.
- De débit d'échange du Lac vers la Nappe : « QECH_LAC_NAPP ».

Extrait du fichier des pas de temps [.pastp] :

```
Lac_Ile_Radial
#<V7.5># --- Fin du texte libre --- ; Ne pas modifier/retirer cette ligne

      [Régime permanent : Pluie = 0 ; ETP = 0]
*** Début de la simulation      à la date :          0; ***
/FLUX_PLUV/ZONE_CLIM      Z=      1V=      0;
/FLUX_ETP/ZONE_CLIM      Z=      1V=      0;
/*****/***** Fin de ce pas

      [Début du régime transitoire : Pluie = 40 mm/j ; ETP = 0]
*** Le pas :      1: se termine à la date :      0.1; ***
/FLUX_PLUV/ZONE_CLIM      Z=      1V=      40;
/FLUX_ETP/ZONE_CLIM      Z=      1V=      0;
/CHARGE/EDITION          I= 1;
/*****/***** Fin de ce pas

      [Demande de sauvegarde des profils après 5 jours]
*** Le pas :      9: se termine à la date :      5; ***
/CHARGE/EDITION          I= 1;
/NIVEAU_LAC/EDITION      I= 1;P= 0;
/DEBIT_LAC/EDITION      I= 0;L= 1; [Listing des termes de débit]
/*****/***** Fin de ce pas

      [Demande de sauvegarde des profils après 30 jours]
*** Le pas :     34: se termine à la date :     30; ***
/CHARGE/EDITION          I= 1;
/NIVEAU_LAC/EDITION      I= 1;P= 0;
/*****/***** Fin de ce pas

      [Début de l'évaporation : Pluie = 0 ; ETP = 10 mm/j]
*** Le pas :     65: se termine à la date :     61; ***
/FLUX_PLUV/ZONE_CLIM      Z=      1V=      0;
/FLUX_ETP/ZONE_CLIM      Z=      1V=     10;
/CHARGE/EDITION          I= 1;
/*****/***** Fin de ce pas

      [Fin du calcul après 360 jours]
*** Le pas :    364: se termine à la date :    360; ***
/CHARGE/EDITION          I= 1;
/NIVEAU_LAC/EDITION      I= 1;P= 0;
/*****/***** Fin de ce pas
***          :          : Fin de la simulation :          ; ***
```

Fichier des « Mailles à historiques »

Avec le préprocesseur des données non maillées, on crée un fichier de « mailles à historiques », d'extension de fichier [.histo].

Il y a 2 types d'historiques relatifs aux lacs :

- Des historiques de champs globaux. Ces champs ont une valeur globale unique pour chaque lac. Il suffit donc de donner le numéro d'une maille quelconque du lac : par exemple : Colonne n°1, Ligne n°1, Couche n°1 : Ce sont les historiques de :
 - Niveau de l'eau dans le lac : « Niveau_Lac ».
 - Superficie du lac en haut : « Surface_Lac »
(La superficie est exprimée en : carré de l'unité de maillage)
 - Volume d'eau dans le Lac : « Volume_Lac »
(Le volume est exprimé en unité utilisateur de volume d'eau).
 - Débit d'échange global du Lac vers la nappe : « Qéch_Lac_Napp »
 - Débit extérieur dans le lac : « Débit_Ext_Lac »
 - Débit de pluie sur le Lac : « Pluie_sur_Lac »
 - Débit d'évaporation du lac : « Évapor_Lac »
 - Débit de ruissellement vers le lac : « Ruissel_Lac » (sans objet ici)
- Des historiques de champs locaux. Ces champs ont une valeur différente dans chaque maille de lac. Il faut indiquer le numéro (Colonne, Ligne, Couche) de la maille concernée : Ce sont les historiques de :
 - Profondeur de l'eau dans le lac : « Profond_Lac ».
 - Débit d'échange Lac vers la nappe dans la maille : « Éch_M_Lac_Nap ».

On obtient alors un fichier de mailles à historiques qui contient les lignes suivantes :

/Niveau_Lac	/HISTO/	=	/MAIL:C=	1L=	1P=	1;
/Profond_Lac	/HISTO/	=	/MAIL:C=	12L=	1P=	1;
/Surface_Lac	/HISTO/	=	/MAIL:C=	1L=	1P=	1;
/Volume_Lac	/HISTO/	=	/MAIL:C=	1L=	1P=	1;
/Débit_Lac	/HISTO/	=	/MAIL:C=	1L=	1P=	1;
/Qéch_Lac_Napp	/HISTO/	=	/MAIL:C=	1L=	1P=	1;
/Éch_M_Lac_Nap	/HISTO/	=	/MAIL:C=	12L=	1P=	1;
/Débit_Ext_Lac	/HISTO/	=	/MAIL:C=	1L=	1P=	1;
/Évapor_Lac	/HISTO/	=	/MAIL:C=	1L=	1P=	1;
/Pluie_sur_Lac	/HISTO/	=	/MAIL:C=	1L=	1P=	1;
/Ruissel_Lac	/HISTO/	=	/MAIL:C=	1L=	1P=	1;

31.3. RÉSULTATS DE LA SIMULATION EN RÉGIME TRANSITOIRE

Lancement des calculs.

Les calculs s'exécutent en une fraction de seconde, et on vérifie qu'ils ont parfaitement convergé.

Le fichier « chasimsq.prn » contient les sauvegardes des champs demandés, sous forme de profil puisque le maillage radial est monodimensionnel.

Le fichier « historiq.prn » contient l'évolution des champs sélectionnés.

Le fichier « histobil_debit.prn » contient :

- En premier : l'évolution des termes du bilan des débits de la nappe,
- Puis : l'évolution des termes du bilan des débits relatifs aux lacs

- Puis : l'évolution des termes du bilan des débits relatifs aux lacs, cumulés depuis le débit de la simulation et exprimés en volumes cumulés.

La Figure 156 présente le niveau d'eau dans le lac, calculé après 5 jours de pluie, et après 30 jours de pluie. On voit qu'après 5 jours (partie gauche) le lac est peu rempli, et partiellement asséché, avec une zone sans eau qui forme une « île ». La nappe (courbe en traits interrompus) est alimentée par la percolation du lac, mais elle est décrochée. Après 30 jours, le lac est quasi-rempli, il n'y a plus d'« île », et la nappe est en contact avec le lac. (Cette figure a été obtenue à partir du fichier des profils « chasimsq.prn » qui concerne les rayons de 0 à 60 m. Pour davantage de clarté on a rajouté le symétrique de $x = -60$ m à 0 m).

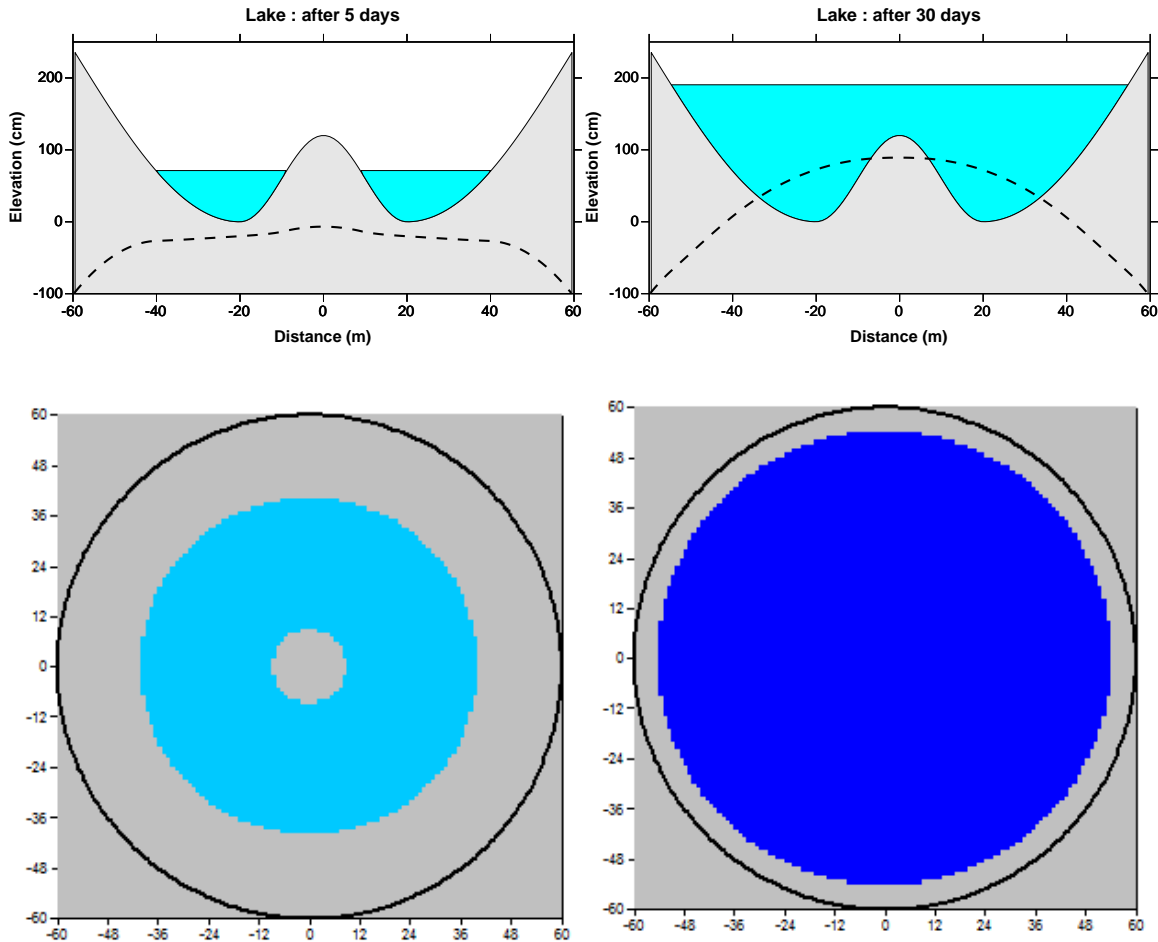


Figure 156 – Niveau d'eau dans le lac après 5 jours et après 30 jours
 Les lignes en traits interrompus sont les profils de charge.
 (en bas : vue de dessus obtenue avec un maillage 2D non décrit ici).

À partir du fichier « histobil_debit.prn » (ou du fichier « historiq.prn », si on a sélectionné ces variables) on peut réaliser les graphiques d'évolution temporelle des termes du bilan du lac ainsi que de son niveau, sa superficie, son volume et sa profondeur en certains points.

La Figure 157 montre l'évolution du débit de pluie et du débit d'évaporation : on voit que le débit de pluie sur le lac est constant jusqu'à 60 jours, alors qu'à partir de cette date le débit d'évaporation diminue pour s'annuler vers 190 jours. En effet bien que le flux d'ETP soit constamment égal à 10 mm/j, la superficie du lac diminue et devient nulle quand le lac

s'assèche vers 190 jours. La partie inférieure de cette figure montre l'évolution comparée du niveau du lac et du niveau dans la nappe à 9.5 mètres du centre.

La Figure 158 montre que, quand le lac recouvre la nappe : il n'y a pas d'évaporation de la nappe. Cependant, au fur et à mesure que le lac s'assèche : l'évaporation agit sur la partie émergée ce qui provoque la baisse du niveau dans la nappe. (En pratique, en utilisant l'option de « limitation de la reprise à la nappe par ETR », on aurait pu facilement limiter cette évaporation pour être plus réaliste).

La Figure 159 montre évolution comparée du niveau du lac et du débit d'échange global vers la nappe. La partie inférieure montre l'évolution du volume d'eau dans le lac et de sa superficie.

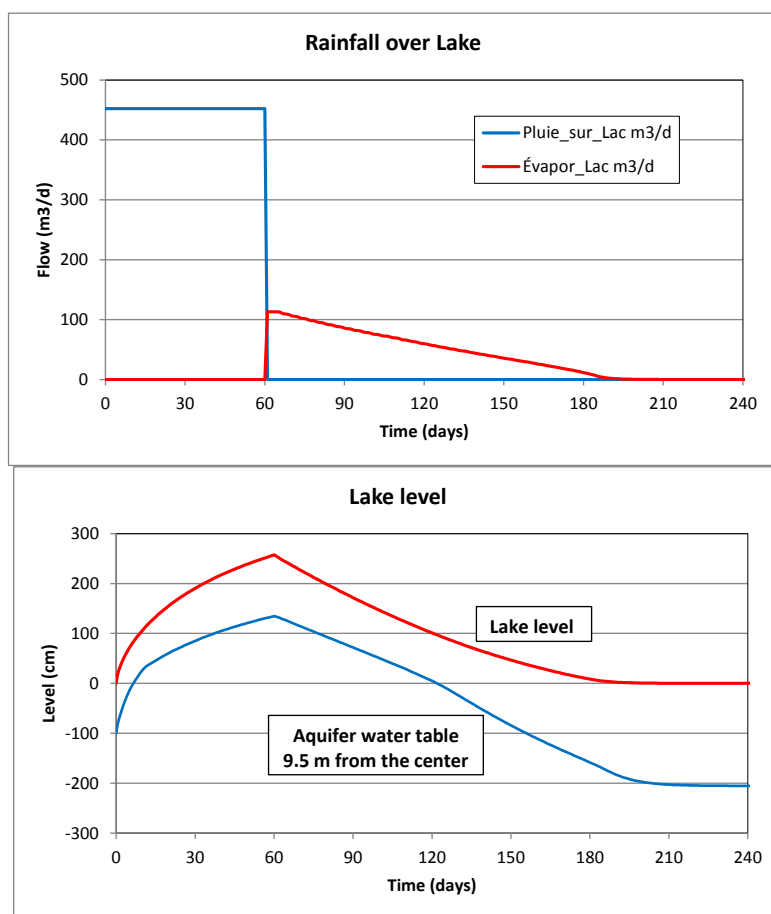


Figure 157 – En haut : évolution du débit de pluie et du débit d'évaporation ; en bas : évolution du niveau d'eau dans le lac et du niveau en un point de la nappe.

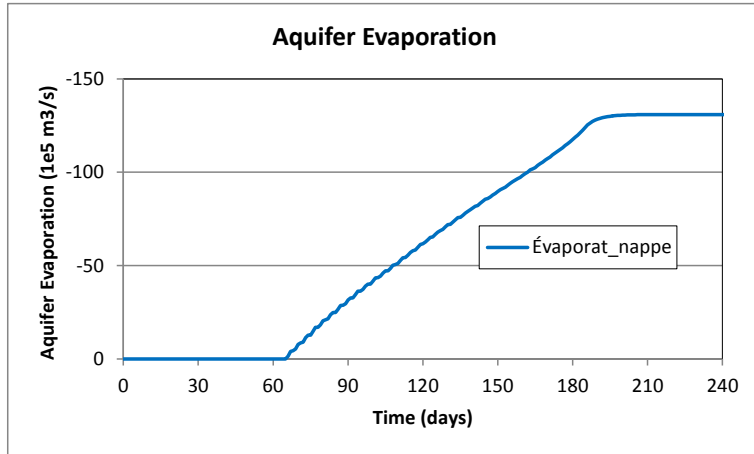


Figure 158 – Évaporation de la nappe.

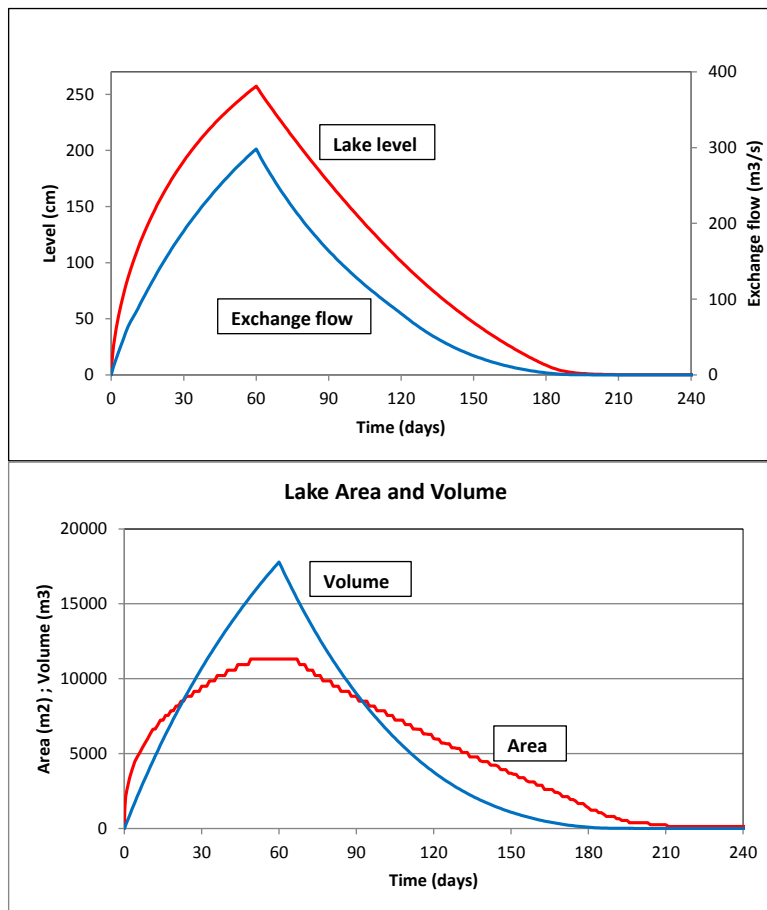


Figure 159 – En haut : évolution comparée du niveau du lac et du débit d'échange global vers la nappe. En bas : évolution du volume d'eau dans le lac et de sa superficie.

31.4. SIMULATION EN RÉGIME PERMANENT

Il est possible de réaliser une simulation avec des lacs en régime permanent. À titre d'exemple, on fixe un flux de pluie égal à 6 mm/j sur tout le lac.

Pour réaliser une telle simulation on apporte les modifications suivantes aux fichiers :

Fichier des « Paramètres Généraux »

Dans le fichier des paramètres [.mart] on fixe les nouvelles valeurs :

Paragraphe : Contrôle de la Résolution Hydrodynamique :

<p>0 = Nombre Maxi d'itérations par pas de temps calcul suivant le pas n°0 Perman = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]</p>
--

Paragraphe : Initialisation avant calculs :

<p>/PERMEAB/GRILLE N: =8 [Pour être plus démonstratif]</p>
--

(Les données de coefficients d'emmagasinement ne sont plus utilisées, mais on peut les laisser sans conséquences.)

Fichier des « Pas de temps »

Dans le fichier des pas de temps [.pastp] on définit avec le préprocesseur :

<pre> Lac_Ile_Radial : Régime permanent #<V7.5># --- Fin du texte libre --- ; Ne pas modifier/retirer cette ligne *** Début de la simulation à la date : 0; *** /FLUX_PLUV/ZONE_CLIM Z= 1V= 6; [Flux de Pluie = 6 mm/jour] /FLUX_ETP/ZONE_CLIM Z= 1V= 0; [Pas d'évaporation] [Champs à éditer : Charge, Niveau Lac, Listing des termes d'échange, Débit d'échange] /CHARGE/EDITION I= 1; /NIVEAU_LAC/EDITION I= 1;P= 1; /DEBIT_LAC/EDITION I= 0;L= 1; /QECH_LAC_NAPP/EDITION I= 1; /***** Fin de ce pas *** : : Fin de la simulation : ; *** </pre>
--

Résultats obtenus

On obtient les résultats en quelques itérations et en une fraction de seconde (Figure 160). L'équilibre est atteint quand le flux d'échange du lac vers la nappe est égal au débit d'alimentation par la pluie.

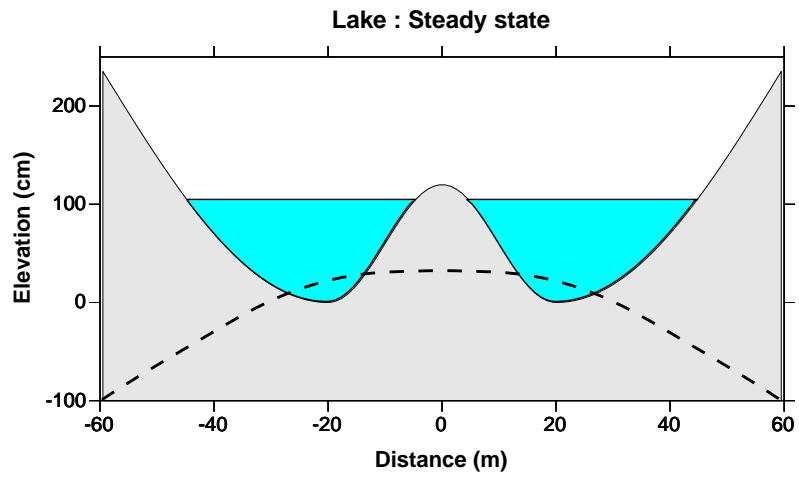


Figure 160 – Niveau d'eau dans le lac en régime permanent avec un flux de pluie de 6 mm/j
Le profil de charge est représenté par la ligne en traits interrompus.

32. Exemple n°22 : Dissolution de Calcite par transport réactif.

Cet exemple montre comment simuler du transfert réactif dans un milieu poreux 2D en utilisant les fonctionnalités des modules de PHREEQC-RM intégrés à certaines versions de MARTHE.

Cette application est relative à la percolation d'une solution aqueuse enrichie en CO₂ dans un milieu poreux formé de Calcite pure.

32.1. DÉFINITION DU SYSTÈME MODÉLISÉ

Les caractéristiques du système sont les suivantes :

Géométrie :

Le milieu poreux est un bloc de 1 m x 1 m x 1 m formé de Calcite pure.

Discrétisation :

Dans le plan, le domaine s'étend de -50.5 à +50.5 cm dans les directions ox et oy. Il a 1 mètre d'épaisseur. Il est discrétisé en 101 colonnes x 101 lignes x 1 couche, donc en 10201 mailles.

Avec WinMarthe, on crée donc un nouveau projet et on choisit un maillage régulier de :

- Origine des x = -50.5 (cm)
- Origine des y = -50.5 (cm)
- 101 colonnes, de largeurs = 1 (cm)
- 101 lignes, de largeurs = 1 (cm)
- 1 couche
- Altitude topographique = -100 (cm) ; épaisseur = 100 cm (car on choisira une unité de charge en cm)

Paramètres hydrodynamiques et hydrodispersifs :

Les paramètres hydrodynamiques du système sont les suivants :

- Perméabilité de l'aquifère : $K = 1.5915$ cm/h
- Porosité : $\omega = 30$ %
- Dispersivité Longitudinale = 1 cm
- Dispersivité Transversale = 0
- Méthode de transport : Différences Finies (D.F.)

Conditions aux limites :

- Charge imposée à 0 sur les 4 limites extérieures : colonne n°1 et n°101, ligne n°1 et 101

Régime d'écoulement :

- Écoulement en régime permanent calculé pendant une période de 360 jours.
- Transport réactif en régime transitoire calculé pendant une période de 2 heures.

Découpage du temps :

La période de calcul de 3600 secondes est découpée en 1 pas de temps de modèle de 1 seconde suivi de 24 pas de temps de modèle de 300 secondes. Chaque pas de temps de modèle est découpé en 5 sous-pas de temps. Il y a donc au total 5 pas de temps de calcul de 0.2 s, suivis de 120 pas de temps de 60 secondes.

Conditions initiales :

La Calcite a un volume molaire d'environ $37 \text{ cm}^3/\text{mol}$. Compte tenu de la porosité de 30 %, 1 L de terrain contient 0.3 L de solution et 700 cm^3 de matrice poreuse formée de Calcite, soit $700/37 = 18.9 \text{ mol}$ de Calcite.

Le milieu poreux est initialement saturé avec une solution d'eau, en équilibre avec la calcite avec une pCO_2 atmosphérique. Son pH est égal à 8.3

Dispositif d'injection

Injection en 3 points situés sur un triangle équilatéral : (col. 51, ligne 76), (col. 73, ligne 38), (col. 29, ligne 38).

Débit injecté en chacun des points = $1.5915 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3/\text{h}$.

La solution injectée a un pH égal à 3.9 et contient 10^{-6} mol/kgw de Chlore qui sert de traceur.

Unités pour la modélisation :

On choisit comme unités :

- Perméabilité : en cm/h
- Maillage : en cm
- Hauteurs, charges : en cm
- Débit : en cm/h, c'est-à-dire en cm/h par m^2 , donc en $10^{-2} \text{ m}^3/\text{h}$
- Temps : en seconde
- Porosité : en %

32.2. FICHIERS DE DONNÉES

Le fichier PHREEQC :

Les Figure 161 et Figure 162 reproduisent le « fichier PHREEQC » correspondant à cet exemple. Dans cet exemple : la solution injectée est la « Solution n°0 », et la solution initialement dans le milieu poreux est la « Solution n°1 ».

```

DATABASE Phreeqc_1lnl-cox.dat

TITLE Percolation d_une solution enrichie en CO2 dans de la calcite pure
# Calcul avec cinétique : Milieu poreux de calcite pure initialement saturée par :
# une solution d'eau en équilibre avec la calcite pure sous pCO2 atmosphérique
#=====
# 1 mole Calcite = 37 cm3
# Porosité = 0.30 => 1 L de terrain contient 0.30 L de solution (env. 0.30 kg)
# Donc 1 L terrain => 700 cm3 de roche = 700 / 37 = 18.9 moles de Calcite
#=====

# On place ici le SELECTED_OUTPUT pour qu'il soit pris en compte
#=====

SELECTED_OUTPUT
-file    Calcite_cin_phreeqc.res.prn # nom de fichier non utilisé
-reset  false
-charge_balance
-percent_error
-kin    Calcite
pH
-tot    Ca C(-2) C(-4) C(2) C(4) Cl(-1) Cl(1) Cl(3) Cl(5) Cl(7) H(0) O(0)
-mol    OH- H+ HCO3- CO2 CO3-2 CaCO3 CaHCO3+ Ca+2 CaCO3
-mol    CaHCO3+ CaOH+ H2 O2
-act    OH- H+ HCO3- CO2 CO3-2 CaCO3 CaHCO3+ Ca+2 CaCO3
-act    CaHCO3+ CaOH+ H2 O2
-high_precision true # tolerance = 1e-12 au lieu de 1e-8

SOLUTION 0
# Eau injectée ; Composition calculée par un calcul annexe
temp  25.0
pH    3.907          # pH de l'eau sous 1 bar
units mol/kgw
C     3.409e-02     # Équilibre avec pCO2=1 bar
Ca    5.000e-07     # 5e-7 mol/kg H2O de CaCl2 ajouté pour suivre traceur Cl
Cl    1e-6

END

SOLUTION 1
# Eau saturant initialement le milieu ; Composition calculée par un calcul annexe
temp  25.0
pH    8.275          # pH de l'équilibre eau pure-calcite sous Patm
units mol/kgw
C     9.868e-04     # valeur de l'équilibre eau-calcite sous Patm
Ca    4.973e-04     # valeur de l'équilibre eau-calcite sous Patm
Cl    1e-25         #

END

```

Figure 161 – Dissolution de Calcite : Fichier PHREEQC (Début).

```

KINETICS 1
Calcite
  -m0 18.9 # 18.9 pour 0.3 Litre << Car Porosité = 0.30 >> ; 63.0 mol/kg
  -parms 5. 100.087
# Calcite : Specific area = 5 cm2/g ; Masse molaire = 100.087 g/mol
  -tol 1e-12
  -step_divide 1e6 # Divise le premier pas d'intégration par le nbre indiqué

RATES
#=====
# Loi cinétique de dissolution/precipitation de la calcite
# Modèle PWP (Plummer, Wigley, Parkhurst, 1978)
#=====

Calcite
-start
  1 rem K2=10^-10.3288 : cste equilibre à 25°C de HCO3m=Hp+CO3m2
  2 rem Kc=10^-8.48 : cste equilibre à 25°C de CaCO3solide=Cap2+CO3m2
  3 rem M : nombre de mole de calcite à l'instant t

  20 k1=10^(0.198-444/TK)
  30 k2=10^(2.84-2177/TK)
  40 if TK<=298.15 then k3=10^(-5.86-317/TK)
  50 if TK>298.15 then k3=10^(-1.1-1737/TK)
  51 term1=(10^(-10.3288))/(10^-8.48)
  52 term2=1/ACT("H+")
  53 term3=k2*ACT("CO2")
  54 term4=k3*ACT("H2O")
  60 k4=term1*(k1+term2*(term3+term4))
  61 vall=k1*ACT("H+")+term3+term4
  62 vret=k4*ACT("Ca+2")*ACT("HCO3-")
  70 r=vall-vret
  80 area=PARM(1)
  90 volmol=PARM(2)
  95 if (M<=0 and SI("Calcite")<0) then goto 200
  100 rate=r*area*volmol*0.001*M
  110 moles = rate * TIME
  120 SAVE moles
-end

END

```

Figure 162 – Dissolution de Calcite : Fichier PHREEQC (Fin).

Le nom du fichier « base thermodynamique » utilisé est « Phreeqc_1lnl-cox.dat ». Il apparaît dans le fichier projet de MARTHE, d'extension [.rma] dont un extrait est présenté ci-dessous.

Phreeqc_1lnl-cox.dat	= Base thermo de réactions géochimiques
Col_Calcite_Phreeqc_RM_Equilat.phr	= Paramètres géochimiques de la simulation

Le fichier des paramètres généraux de MARTHE :

On crée un nouveau projet MARTHE, d'extension de fichier [.rma].

Avec le module de « gestion des données non maillées » de WinMarthe, on crée un fichier « profil d'utilisation » d'utilisation avec les options suivantes :

- Régime transitoire
- Transport de masse classique
- Couplage Géochimique PHREEQC

*** Profils d'Utilisation [Logiciel MARTHE 7.5] ***

1 =Régime Transitoire

1 =Transport de masse classique

2 =Couplage Géochimique ou Multicompos (1=SCS, Chaine ; 2=PHREEQC ; 3=TREACT)

Avec le module de « gestion des données non maillées » de WinMarthe, on crée un fichier de « Paramètres Généraux » pour définir les options et les paramètres physiques. La Figure 163 reproduit un extrait du fichier des paramètres généraux.

*** Pas de Temps et sous-pas de temps	***
5 = Nombre de sous-pas de temps de modèle	[Déf=0 => Aucun]
*** Contrôle de la Résolution Hydrodynamique	***
20 = Nombre maxi d'itérations pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)	
Perman = Régime de l'Hydrodynamique [0=Transitoire ; 1=Permanent]	
*** Unités des données	***
cm/h = Unité de Perméabilité des aquifères en m/s	
cm/h = Unité de Débit en m3/s	
cm = Unité de Charge, Altitude, Pression en m	
Second = Unité de Temps (des Pas de temps de modèle)	
cm = Unité de Coordonnées Horizontales en m	
% = Unité de Porosité = Teneur en Eau en [-]	
*** Couplage et Transport Concentration, Chaleur, Salinité	***
DF = Méthode de Transport [0=Diff_Finies ; 2=Caractéristiques=MOC ; 3=TVD]	
0.01 = Dispersivité Longitudinale (m)	
*** Température , effets Thermiques	***
25 =Température de référence [Viscosité, Gaz, Chimie, Dégradat.] [Déf=0 => 20°C]	
*** Concentration et Trajectoires	***
1 =Calcul de la Concentration	
1e-18 =Variation moyenne de Concentration entre 2 itérations pour convergence	
Transit=Régime du Transport de Concentration [0=Transitoire ; 1=Permanent]	
*** Géochimie	***
1 =Calcul d'Interactions Chimiques [0=Non ; 1=Oui ; -1=Uniquement Initialisation]	
* =Spéciation Initiale [0=Non ; -1=Prem maille ; N=Maille n°N ; *=Toutes les mailles]	
Phreeqc =Moteur géochimique [1=SCS ; 2=PHREEQC ; 3=TREACT]	
1e-20 =Seuil de variation de concentration pour déclencher les calculs de Chimie	
1 = Possibilité de sauvegarde des champs de variation d'Espèces/Infos	
*** Initialisation avant calculs	***
/PERMEAB/GRILLE N: =1.59154	
/H_TOPOGR/GRILLE N: =-100	
/H_SUBSTRAT/GRILLE N: =-200	
/POROSITE/GRILLE N: =30	
/CHARGE/GRILLE N: =0	
/DEBIT/MAILLE C= 51L= 76P= 1V= 1.5915;	<i>Point d'injection Sud</i>
/DEBIT/MAILLE C= 73L= 38P= 1V= 1.5915;	<i>Point d'injection Est</i>
/DEBIT/MAILLE C= 29L= 38P= 1V= 1.5915;	<i>Point d'injection Ouest</i>
/DEBIT/MAILLE C= *L= 1P= 1V= 9999;	
/DEBIT/MAILLE C= *L= 101P= 1V= 9999;	
/DEBIT/MAILLE C= 1L= *P= 1V= 9999;	
/DEBIT/MAILLE C= 101L= *P= 1V= 9999;	
/LIS_SOLU_CHIM/FICHER N: Col_Calcite_Phreeqc_List_Solut.li_solu	

Figure 163 – Dissolution de Calcite : Extraits du fichier des paramètres de MARTHE.

Le fichier « Liste de numéros de solutions chimiques », facultatif, « Col_Calcite_Phreeqc_List_Solut.li_solu » contient les 2 lignes suivantes :

Liste de Numéros Solutions chimiques initiales Phreeqc 0 1

Il sert à récupérer les concentrations de la solution n°0, qui sera injectée dans les 3 mailles d'injection. La solution n°1 apparaît également, pour vérification.

Il n'est pas nécessaire d'avoir de fichier « Numéro de zone d'initialisation de géochimie » puisque la composition initiale du milieu poreux est uniforme et que, dans le fichier PHREEQC, on a mis sa composition avec le plus grand numéro (« Solution 1 » et Equilibrium_Phases 1 »).

Par défaut c'est ce numéro « 1 », le plus grand, qui sera pris pour tout le domaine.

On aurait obtenu le même résultat en affectant le numéro « 1 » à toutes les mailles : « /ZON_INIT_CHIM/GRILLE N: =1 ».

32.3. SIMULATION

32.3.1. Calcul d'initialisation

On fait un premier calcul avec l'index « -1 » dans le fichier des « paramètres généraux » :

*** Géochimie	***
-1=Calcul d'Interactions Chimiques [0=Non ; 1=Oui ; -1=Uniquement Initialisation]	

On obtient alors :

- Le fichier « nomchim.txt » (Figure 164) qui contient les noms et numéros des composants, des minéraux, et des « Espèces et Infos ». Les composants n°1 à 4 sont toujours : H₂O, H, O, Charge.
- Le fichier « List_Initial_Conc.prn » (Figure 165) qui contient les concentrations initiales des solutions listées dans le fichier « Col_Calcite_Phreeqc_List_Solut.li_solu », c'est-à-dire des solutions n°0 et n°1. Ce sont les concentrations des composants, exprimées en « mol/L de soluté ». Ce fichier sera utilisé pour fixer les concentrations dans la solution injectée dans les 3 points d'injection.

Pour le conserver et pouvoir le réutiliser, on renomme le fichier « List_Initial_Conc.prn » en « Col_Calcite_RM_List_Initial_Conc.prn ».

Noms des Éléments Chimiques (Col_Calcite_Phreeqc_RM_60s_2D_Equilat_DF.rma)	
Éléments dissouts : 7	
1	: H2O
2	: H
3	: O
4	: Charge
5	: C
6	: Ca
7	: Cl
Phases minérales : 1	
1	: Calcite
Espèces et Infos : 39	
1	: pH
2	: charge(eq)
3	: pct_err
4	: Ca(mol/kgw)
	etc.
38	: k_Calcite
39	: dk_Calcite

Figure 164 – Dissolution de Calcite : Fichier « nomchim.txt » généré.

Concentrations initiales de(s) 2 numéro(s) de la liste de solutions :			
# Nom/Name <>	Col_1_Solut_0	Col_2_Solut_1	Num
H2O	: 5.536113741157503E+01	5.536113736839771E+01	1
H	: 2.444544580443357E-04	9.582976424475052E-04	2
O	: 6.809773081582247E-02	2.942321154640462E-03	3
Charge	: 5.778018373854035E-06	8.424887643164347E-07	4
C	: 3.398919629799940E-02	9.838820440219072E-04	5
Ca	: 4.985215062774918E-07	4.958294897568883E-04	6
Cl	: 9.970430125549835E-07	0.000000000000000E+00	7

Figure 165 – Dissolution de Calcite : Fichier « List_Initial_Conc.prn » généré lors de l'initialisation.

32.3.2. Simulation avec cinétique pendant 2 heures

On crée automatiquement un « fichier de pas de temps », avec 24 pas de temps de 300 secondes chacun. On rajoute au début un pas de temps de durée 1 seconde.

Au pas de temps n°0, avec le préprocesseur WinMarthe », on définit la « Concentration Extérieure » du débit injecté de tous les points d'injection :

```
/CONCEN_EXT/GRILLE/TOT= *; N:Col_Calcite_RM_List_Initial_Conc.prn
```

(Par défaut c'est la 1^{ère} colonne du fichier qui est utilisée, mais on aurait pu, avec le préprocesseur, sélectionner une autre colonne).

Tous les 3 pas de temps de modèle, on demande la sauvegarde :

- Du composant n°6 : Ca.
- Du minéral n°1 (le seul minéral)
- D'un certain nombre d' « Espèces ou Infos »

/CONCENTR/EDITION/TOT=	6;	I= 1;V= 0;R= 0;
/CONCENTR/EDITION/MIN=	1	I= 1;V= 0;R= 0;
/CONCENTR/EDITION/SEC=	1;	I= 1;V= 0;R= 0;
/CONCENTR/EDITION/SEC=	4;	I= 1;V= 0;R= 0;
/CONCENTR/EDITION/SEC=	38;	I= 1;V= 0;R= 0;
/CONCENTR/EDITION/SEC=	39;	I= 1;V= 0;R= 0;
/CONCENTR/EDITION/SEC=	9;	I= 1;V= 0;R= 0;
/CONCENTR/EDITION/SEC=	19;	I= 1;V= 0;R= 0;

Dans le fichier des « paramètres généraux » de MARTHE, on remplace alors l'index « -1 » (« Initialisation de la géochimie »), par l'index « 1 » (Calcul avec géochimie) et on lance les calculs.

*** Géochimie	***
1=Calcul d'Interactions Chimiques [0=Non ; 1=Oui ; -1=Uniquement Initialisation]	

Les calculs s'effectuent alors (en environ ½ heure avec un ordinateur de bureau de 2015 à 4 cœurs de calcul). On examine alors en particulier le fichier de résultats « chasim.out » avrc le préprocesseur graphique WinMarthe.

- Le nombre de Péclet moyen est égal à 1.2.
- Le nombre de Courant moyen est égal à 0.064, et le nombre de Courant maximal à 2.2

Les Figure 165 à Figure 169, réalisées par WinMarthe, illustrent les résultats obtenus.

- La Calcite est dissoute
- La concentration en Calcium augmente
- Le pH diminue
- La concentration en CO₂ augmente

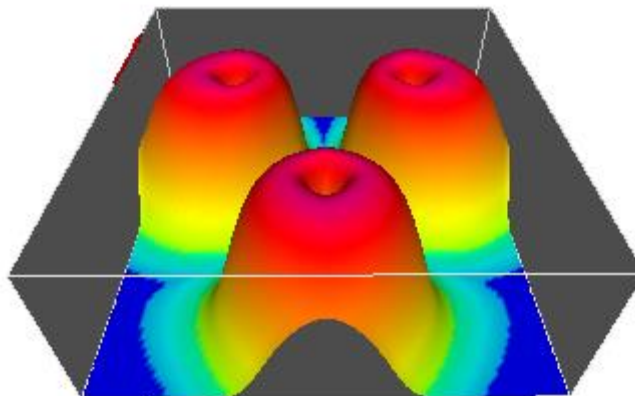


Figure 166 – Concentration en Calcium après 2 heures.

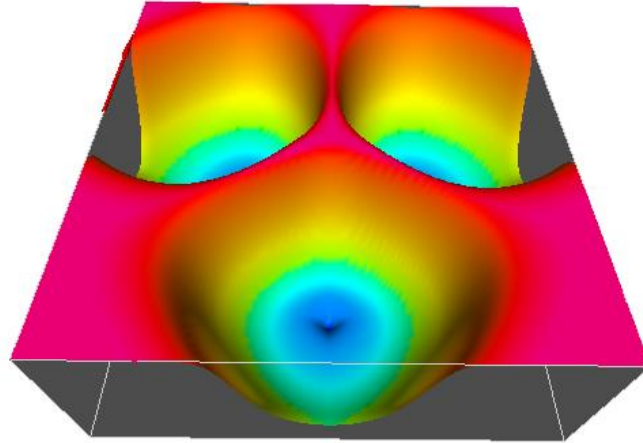


Figure 167 – Champ du pH après 2 heures : de 8.3 à l'extérieur à 5.7 près des points d'injection.

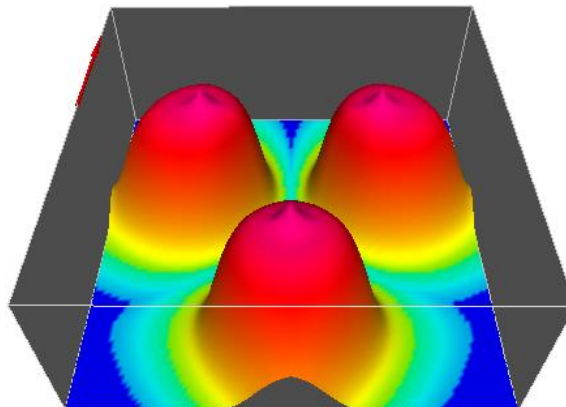


Figure 168 – Concentration en CO₂ après 2 heures : $3 \cdot 10^{-2}$ mol/kgw près des points d'injection.

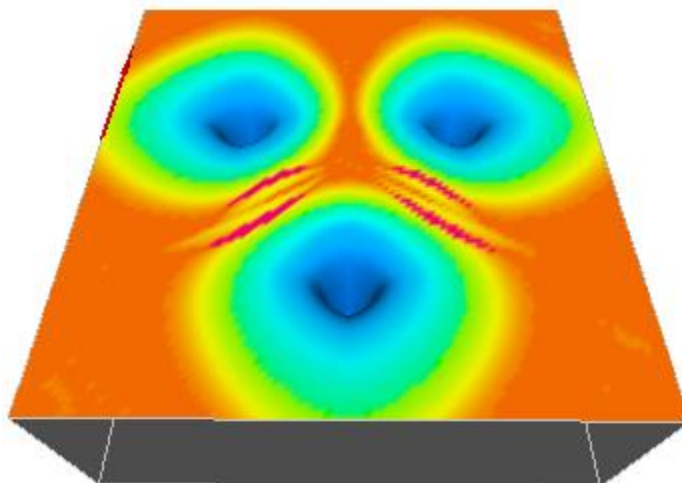


Figure 169 – Variation de concentration en Calcite après 2 heures :
 $-8 \cdot 10^{-2}$ mol/L de terrain près des points d'injection.

32.3.3. Simulation avec la Calcite à l'équilibre (sans cinétique)

Compte tenu de la rapidité de la dissolution de la Calcite, on a réalisé un autre calcul sans prendre en compte de cinétique. On a adapté l'exemple pour avoir des temps de séjour d'au moins 1000 mn (16.7 heures) dans chaque maille.

Pour cela on a modifié l'exemple comme suit en multipliant les unités par 1000 :

- Les mailles ont pour dimension horizontale 10 m au lieu de cm.
- Les pas de temps de calcul sont égaux à 60000 s (16.7 h) au lieu de 60 s
- Les débits sont multipliés par 1000
- La dispersivité est multipliée par 1000

On obtient ainsi les mêmes vitesses, les mêmes nombres de Courant, et les mêmes nombres de Péclet, mais les temps de résidence sont multipliés par 1000.

On supprime le paragraphe « RATES » et on remplace le paragraphe « KINETICS » par :

EQUILIBRIUM_PHASES 1		
Calcite	0	18.9

Les temps de calculs sont alors très réduits : environ 1 mn de temps CPU.

Les résultats obtenus après 2000 h (83.3 jours) de percolation sont proches des résultats obtenus précédemment après 2 h.

33. Références bibliographiques

- Bauer P., Attinger S., Kinzelbach W. (2001) - Transport of a decay chain in homogenous porous media: analytical solutions. *Journal of Contaminant Hydrology* 49 (2001) 217-239.
- Cooley, R.L. (1983) - Some new procedures for numerical solution of variably saturated flow problems. *Water Resour. Res.*, 19(5), 1271-1285.
- Douez, O., Bichot, F., Petit, V. (2011) - Contribution à la gestion quantitative des ressources en eau à l'aide du modèle Jurassique de Poitou-Charentes. Rapport BRGM/RP-59288-FR. 411 p., 286 fig.
- Chiang, W., Kinzelbach, W., (1998). Processing MODFLOW, A Simulation System for Modeling Groundwater Flow and Pollution, User's Manual, 325 pp.
- Cho, C. M. 1971 - Convective transport of ammonium with nitrification in soil, *Can. Jour. Soil Sci.*, 51(3), 339-350.
- Grove, D.B. & Stollenwerk, K.G. (1984) - Computer model of one-dimensional equilibrium-controlled sorption processes. U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 89-4059, 58 pp.
- Kinzelbach W., Aeschbach W., Alberich C., Goni I.B., Beyerle U., Brunner P., Chiang W.-H., Rueedi J., and Zoellmann K. (2002) - A Survey of Methods for Groundwater Recharge in Arid and Semi-arid regions. Early Warning and Assessment: Appendix: Your First Groundwater Model with PMWIN. Report Series, UNEP/DEWA/RS.02-2. United Nations Environment Program, Nairobi, Kenya. ISBN 92-80702131-3.
- Kueper, B.H. and Frind, E.O. (1991). Two-phase flow in heterogeneous porous media, 1, Model development. *Water Resources Research* 27 n°6 p. 1049-1057.
doi:[10.1029/91WR00266](https://doi.org/10.1029/91WR00266).
- 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>
- Saltel M., Pédron N. (2012) - Contribution à la révision du SAGE Nappes Profondes de Gironde : Utilisation du Modèle Nord-Aquitain dans le cadre du module « Tendances et Scénarios ». Rapport BRGM/RP-60416-FR, 56 p., 24 fig., 5 ann.
- Thiéry, D. (1990) - Software MARTHE. Modelling of Aquifers with a Rectangular Grid in Transient state for Hydrodynamic calculations of hEads and flows. Release 4.3. Rap. BRGM 4S/EAU R 32548.
- Thiéry, D., (1993) - Modélisation des aquifères complexes - Prise en compte de la zone non saturée et de la salinité. Calcul des intervalles de confiance. *Revue Hydrogéologie*, 1993, n°4 pp. 325-336.
<https://hal-brgm.archives-ouvertes.fr/hal-01062466> (Accès Novembre 2015).

- Thiéry, D. (2006) – Didacticiel du pré-processeur WinMarthe v4.0. Rapport final. BRGM/RP-54652-FR, 94 p., 48 fig.
<http://infoterre.brgm.fr/rapports/RP-54652-FR.pdf>. (Accès Novembre 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. (2013) - Didacticiel du code de calcul Gardénia v8.1. Vos premières modélisations. Rapport BRGM/RP-61720-FR, 127 p., 93 fig.
<http://infoterre.brgm.fr/rapports/RP-61720-FR.pdf>. (Accès Novembre 2015).
- Thiéry, D. (2014) – Logiciel GARDÉNIA, version 8.2. Guide d'utilisation. BRGM/RP-62797-FR, 126 p., 65 fig., 2 ann.
<http://infoterre.brgm.fr/rapports/RP-62797-FR.pdf>. (Accès Novembre 2015).
- Thiéry D. (2015a) – 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. (2015b) – 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.
- 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., Golaz, C. (2002) - Consideration of vegetation effects in version 6.2 of the MARTHE model. Consequences for water and mass uptake. Rapport BRGM/RP-51988-FR. 48 pp.
- van Genuchten, M. Th. (1985) - Convective-dispersive transport of solutes involved in sequential first-order decay reactions, *Computers & Geosciences*, 11(2), 129-147.
- Vinsome, P.K.W. and J. Westerveld (1980) - A Simple Method for Predicting Cap and Base Rock Heat Losses in Thermal Reservoir Simulators, *J.Canadian Pet. Tech.*, 19 (3), 87-90, July-September 1980.
- Zheng C. and Wang P.P. (1998) - MT3DMS A modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminant in groundwater systems. Documentation and User's Guide. Contract Report SERDP-99-1, U.S. Army Engineer Research and Development Center, Vicksburg, MS.

Annexe 1

Icônes et boutons du préprocesseur WinMarthe

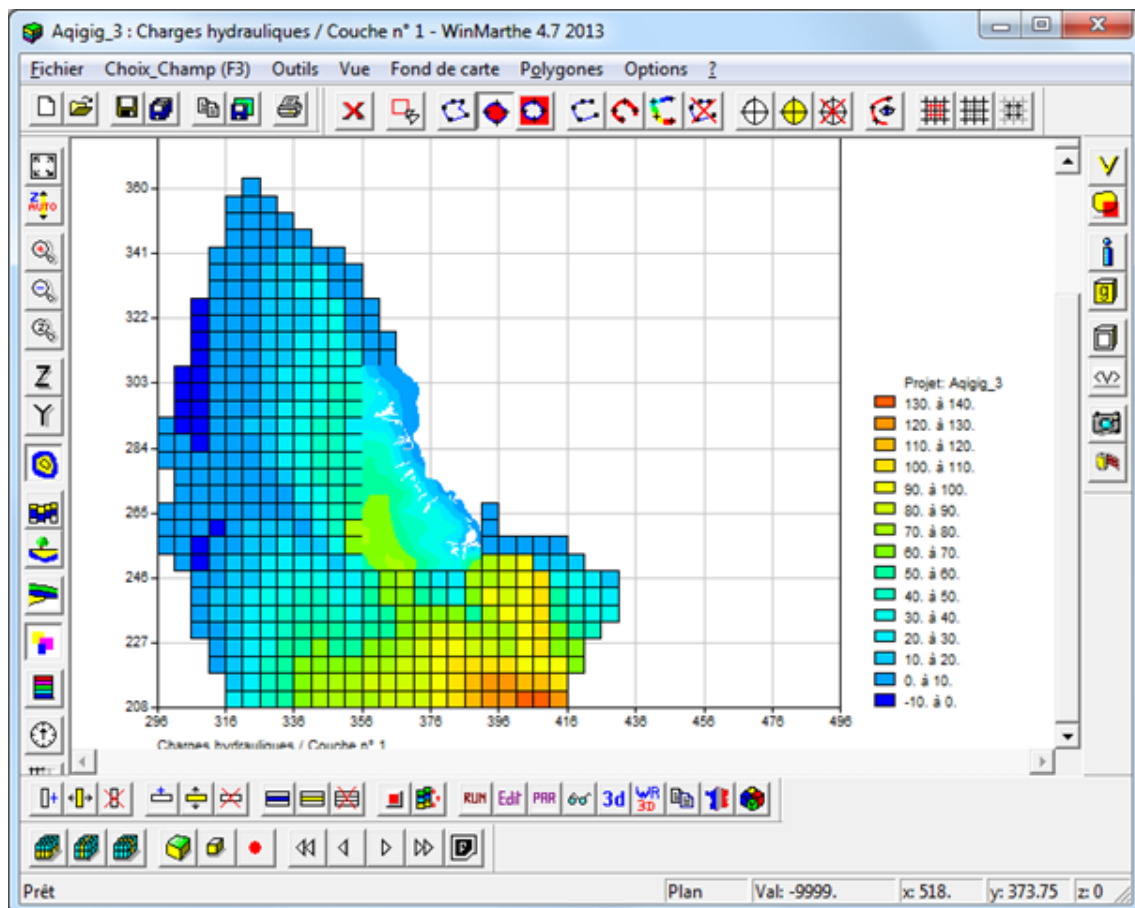








Figure 170 – Fenêtre principale du préprocesseur graphique WinMarthe.

33.1. BOUTONS DE LA BARRE D'OUTILS DU HAUT

-  Crée un nouveau projet.
-  Ouvre un projet existant, fichier [.rma].
-  Enregistre le projet en cours (enregistre les fichiers modifiés).
-  Enregistre le projet en cours sous un nouveau nom (enregistre les fichiers modifiés).
-  Copie la vue dans le presse-papier.
-  Enregistre la vue dans un fichier bitmap [.bmp].



Imprime l'image visible à l'écran, pour des documents de travail.



Désélectionne l'ensemble des mailles du modèle (dans toutes les couches).



Sélectionne les mailles à l'intérieur d'un domaine rectangulaire défini par un rectangle extensible.

Ctrl+ Rectangle_Extensible = Alt Gr+Rectangle_Extensible = Désélection.

Majusc. + Rectangle_Extensible = Inverse la sélection.



Digitalise un contour fermé (double-cliquer pour terminer et fermer le contour).



Sélectionne les mailles à l'intérieur du contour sélectionné ou d'un contour à sélectionner.



Sélectionne les mailles à l'extérieur du contour sélectionné ou d'un contour à sélectionner.



Crée une courbe (double-cliquer pour terminer).



Sélectionne les mailles situées sur la courbe ou le contour sélectionné.



Interpole ou numérote des valeurs le long d'une courbe (ouverte).



Supprime la courbe ou le contour fermé sélectionné.



Crée des points servant à « habiller » le dessin.



Modifie le point sélectionné.



Supprime le point sélectionné.



Affiche la boîte de dialogue de gestion des polygones



Crée un nouveau gigogne.



Pour un gigogne : fait disparaître les mailles gigognes sélectionnées (et y fait apparaître le maillage principal) => Réalise un gigogne « partiel ».



Pour un gigogne « partiel » : fait apparaître les mailles gigognes cachées sous les mailles sélectionnées.

33.2. BOUTONS DE LA BARRE D'OUTILS DE GAUCHE

Ces boutons concernent la visualisation en plan ou en coupe :



« Fit to page » : La vue remplit tout l'écran de WinMarthe.



Détermine une échelle verticale automatique (pour les coupes verticales).



Augmente la taille de l'image (Zoom in).

Possibilité également de définir une zone à zoomer avec le bouton droit de la souris (en maintenant le bouton enfoncé pour définir un rectangle extensible)



Réduit la taille de l'image (Zoom out).



Définit un facteur de zoom. Un cm sur l'écran représentera $100 / \text{Fact. Zoom}$ unités de coordonnées. Par exemple avec un facteur de zoom égal à 5, 1 cm sur l'écran représentera $100 / 5 = 20$ unités de coordonnées.



Modifie le coefficient d'amplitude des Z : pour les visualisations en coupe verticale.



Distord les ordonnées Y par rapport aux abscisses X (pour les vues en plan).



Visualisation en plan.



Visualise en coupe verticale style « modèle » suivant une colonne ou une ligne précédemment sélectionnée.



Visualise en coupe verticale style « réel » (interpolée), suivant une colonne ou une ligne précédemment sélectionnée.



Colorie les mailles selon le numéro de la couche.



Colorie les mailles selon la valeur du champ.



Définit des plages de couleurs personnalisées.




Passé d'une coupe Ouest Est (suivant OX) à une coupe Sud Nord (suivant OY) ou inversement.






Rafraîchit le dessin : recoloré.



33.3. BOUTONS DE LA BARRE D'OUTILS DE DROITE



Ces boutons concernent principalement les actions relatives aux valeurs des champs : sélection par valeur/ affectation/modifications.


 Affecte une valeur à une maille ou à une zone de mailles précédemment sélectionnée.

 Donne accès aux mailles extérieures au domaine.

 Affiche les valeurs des différents champs chargés dans une maille et ses voisines.
Après avoir cliqué sur , il suffit de double-cliquer sur une maille pour la sélectionner. Si on modifie des valeurs, ne pas oublier alors de cliquer sur « **Appliquer les modifications** » dans la boîte de dialogue.


 Donne les informations sur la géométrie du modèle : altitudes du toit et du substratum des différentes couches. Après avoir cliqué sur , il suffit de double-cliquer sur une maille pour la sélectionner. Il est possible de modifier des valeurs.

 Permet de définir des « liaisons étanches ». Après avoir cliqué sur , il suffit de double-cliquer sur une maille. Une boîte de dialogue apparaît alors qui permet de sélectionner les côtés de la maille sur lesquels on veut imposer une liaison étanche.


 Sélectionne les mailles dont la valeur du champ est comprise entre une valeur mini et une valeur maxi. Ou bien sélectionne les mailles dont la valeur est différente d'une valeur donnée. Sélection au choix dans la couche affichée ou bien dans toutes les couches.

33.4. BOUTONS SUR LES BARRES D'OUTILS DU BAS


33.4.1. Première ligne : boutons concernant la construction du maillage et son raffinement ainsi que le lancement des modules externes


 Ajoute une colonne : partage la colonne sélectionnée en deux colonnes de même largeur. Il faut au préalable être en mode « Sélection par colonne » et avoir sélectionné une colonne.




 Modifie la largeur de la colonne sélectionnée.

 Supprime la colonne sélectionnée : regroupement avec la colonne suivante.












 Ajoute une ligne : partage la ligne sélectionnée en deux lignes de même hauteur.

 Modifie la largeur de la ligne sélectionnée.

 Supprime la ligne sélectionnée : regroupement avec la ligne suivante.

-  Ajoute une couche : intercale une couche au-dessus de la couche courante.
-  Modifie l'épaisseur d'une couche.
-  Supprime la couche courante.

Attention : L'ensemble des opérations de définition du maillage doit être réalisé avant l'introduction des champs. WinMarthe ne permet pas de gérer le transfert des champs d'un maillage dans un autre maillage différent. Il est cependant possible d'utiliser l'outil de modification de maillage (« Outils » → « Autre » → « Modification de maillage ou de coordonnées »). Si on souhaite construire un maillage irrégulier, il est beaucoup plus aisé d'utiliser directement l'option de « création d'un maillage irrégulier », plutôt que de modifier un maillage régulier.

-  Contrôle la cohérence de la géométrie (comparaison des altitudes de toit et de substratum), offre la possibilité de corriger les incohérences.
-  Mise à jour des altitudes des mailles à partir de la topographie et des substratum. Cette opération peut exceptionnellement être rendue nécessaire à la suite de certaines importations ou transformations qui modifient la topographie ou les substratums.
-  Lance le moteur de calcul « MARTHE ».
-  Éditeur des valeurs numériques du champ et de la couche sélectionnés.
-  Lance le module « PARAMART » qui permet d'introduire les paramètres et options de calcul du moteur de calcul MARTHE.
-  Examen de fichiers ([.txt] , [.out] , [.avi] , [.pdf] , [.hlp] , [.htm], etc. Permet en particulier d'examiner les résultats de convergence et de bilans à l'issue d'un calcul (fichiers « bilandeb.txt », « mart_ver.txt ») ou tout autre fichier texte.
-  Visualisation en 3D.
-  Visualisation VRML en 3D.
-  Gestion de fichiers : Copie / Supprime / Renomme / Édite.
-  Exportation de résultats vers le logiciel QGIS® ou MAPINFO®. Les fichiers qui peuvent être exportés sont des fichiers « grille », des fichiers [.bln] (courbes, contours, vitesses, etc.), des fichiers trajectoires (trajmar.out), des fichiers de particules : Génération de fichiers « mif/mid ». Également transformation de fichiers de courbes ou contours [.mif] en format [.bln] avec changement de repère pour utilisation par WinMarthe.
-  Visualisation 3D :
 - Visualisation avec 3D View (Winteracter®)
 - Exportation au format VTK pour une visualisation avec PARAVIEW®
 - Exportation vers Tecplot®

33.4.2. Seconde ligne : boutons concernant les différents modes de sélection des couches / lignes / colonnes / mailles



Passé en mode sélection par couche. Pour sélectionner toute les mailles de la couche : double-cliquer sur une maille de la couche, qui apparaît alors en rouge.



Passé en mode sélection par colonne. Pour sélectionner une colonne : double-cliquer sur la colonne, qui apparaît alors en rouge.



Passé en mode sélection par ligne. Pour sélectionner une ligne : double-cliquer sur la ligne, qui apparaît alors en rouge.



Sélectionne tout le domaine (sélectionne toutes les mailles dans toutes les couches).



Passé en mode sélection maille par maille. Double-cliquer sur une maille pour inverser sa sélection (sélectionne la maille si elle n'était pas sélectionnée ; la désélectionne si elle était sélectionnée). Les mailles sélectionnées apparaissent en rouge (ou en violet si elles sont à l'extérieur du maillage).



Déplacement avec ou sans sélection en coupe verticale (peu utile).



Revient à la première ligne / colonne / couche du maillage. (selon que la vue est en coupe verticale Sud-Nord, en coupe verticale Ouest-Est, ou en plan).



Reculé d'une ligne / colonne / couche du maillage.



Avance d'une ligne / colonne / couche du maillage.



Se déplace à la dernière ligne / colonne / couche du maillage.

33.5. RACCOURCIS CLAVIER

- **F3** : Choix d'un champ
- **Control_R** : Ouvre un fichier **R**ésultat (champs simulés)

- **Control_I** : Isovaleurs **s**imples
- **Control_D** : Isovaleurs **D**oubles

- **Control_Q** : Plages de coupures **é**qui-réparties
- **Control_T** : Plages de coupures logari**T**hmiques
- **Control_L** : Plages de coupures **L**inéaires
- **Control_U** : Plages de coupures **U**tilisateur

- **Control_E** : **É**diteur de grilles

- **Control_A** : Select **A**ll (Sélectionner tout)
- **Control_P** : Imprimer (**P**rint) la fenêtre

- Control_ **S** : Sauvegarder le projet
- Maj+Control_ **S** : Sauvegarder le projet sous

- Majusc. **F5** : Lancement de la simulation (Run)
- Control **F** : Fit to Page (Le dessin remplit au mieux l'écran)
- Control_ **B** : Ouvrir un champ « Travail » (anciennement « Brouillon »)
- Control_ **H** : Position des mailles à Historiques
- Alter_ **S** : Statistiques
- Alter_ **T** : Transformation numérique
- Alter_ **O** : Opération entre champs
- Control_ **C** : Copie la vue (ou une partie) dans le presse-papier
- Alter_ **P** : Gestion des Polygones

- Alter_ **C** : Dessin des Contours de mailles (remet/retire)
- Alter_ **M** : Affichage du Maillage
- Alter_ **F** : Affichage du Fond de carte
- Control_ **G** : Aller à : colonne, ligne, couche (Go to)

- Contr+Alter_ **T** : Plages de couleurs pour Tout le domaine



Géosciences pour une Terre durable

brgm

**Centre scientifique et technique
Service Eau, Environnement et Écotechnologies**

3, avenue Claude-Guillemin
BP 36009 – 45060 Orléans Cedex 2 – France – Tél. : 02 38 64 34 34