

MANUEL d'UTILISATION de TAFFETAS

TAFFETAS: Transport And Flow: Finite Element Technique in Aquifer Simulations

Volume 1. METHODES et POSSIBILITES

- Hydrodynamique
- Transport de solutés
- Couplages
- Transport de chaleur
- Maillages adaptatifs
- Calage automatique
- Ecoulements multiphasiques
- Double porosité

Volume 2. PROCESSING

- Pré-processing: Construction du modèle
- Post-processing: Résultats

Volume 3. DONNEES de MODELISATION

- Données nécessaires
- Informations pour la maintenance du code
- Bibliographie

Volume 4. EXEMPLES d'APPLICATIONS

E. FILLION, M.L. NOYER
Collaboration A. MENJOZ
J.P. SAUTY, P. SIEGEL

VERSION 2.0.1. du 02 janvier 1997
R 38621 DR/HGT 95



Avant-propos

TAFFETAS est un outil de modélisation des transferts dans tous types de milieux poreux et fracturés. C'est un outil nouveau (première routine implémentée en novembre 1994, premières simulations pour des projets en mars 1995), écrit dans un langage moderne (le FORTRAN 90). Il a été développé avec l'attentive collaboration de A. Menjoz et de M.L. Noyer, ingénieurs au BRGM, tous deux familiers des modélisations hydrogéologiques. L'auteur tient à les remercier vivement pour leurs actives participations, leur patience et la pertinence de leurs remarques.

Le projet scientifique encadrant le développement de **TAFFETAS** a été volontairement très ambitieux. Cet outil de modélisation, maintenant disponible, doit permettre au groupe BRGM d'afficher :

- d'une part, un niveau d'expertise indiscutable en modélisation couplée de l'hydrodynamique densitaire et visqueuse, de la thermique (et de la chimie), dans tous types de milieux géologiques, et ceci quelle que soit la complexité géométrique des sites étudiés ;
- d'autre part, des méthodes originales (méthodes mixtes, mailleurs automatiques, méthodes auto-adaptatives, calages automatiques) pour fiabiliser les résultats des simulations en routine par les ingénieurs modélisateurs du groupe BRGM.

Abstract

BRGM has developed and uses softwares to simulate groundwater flow and transport processes. One of these tools is the TAFFETAS software (Transport And Flow: Finite Element Techniques in Aquifer Simulations), a finite element model for flow and transfers in 3D fractured rock with porous matrix.

The finite element program system TAFFETAS has been developed to simulate spatial flow and transport processes of fluid phases in fractured rock. The complex geology is approximated by coupling 1D elements for flow channels or boreholes, 2D elements for fractures and 3D elements for the porous matrix.

Flow Modelling

Several implemented methods are able to simulate steady and transient fluid flow as, the conform finite element method or mixed hybrid finite element method. TAFFETAS is able to simulate the incompressible one fluid phase flow: the fluid filtration velocity is simulated according to the linear Darcy Law in the porous matrix and can be simulated with linear or nonlinear laws in the fracture planes.

The TAFFETAS tool includes self-adaptive methods. The approximated errors in the fractures due to the high velocity gradients and sharp saturation fronts in the fracture-rock interfaces and in the vicinity of wells and sinks can be minimized using adaptive grids.

Transport Modelling

Several methods are able to simulate contaminant conservative transport with finite element techniques. However, half life of radioactive contaminants can be simulated as well as a retardation factor dealing with adsorption problems. Three time integration schemes are used: the implicit scheme, the Cranck-Nicolson centered scheme and the Leismann-Frind scheme.

Other techniques are also implemented to simulate mass or heat transport:

- RW: The Random Walk model is based on a particle tracking method to simulate the advective, diffusive and dispersive components of the transport processes with a random generation of a great number of particles.

- The method of characteristics (M.O.C.) is implemented in TAFFETAS to simulate contaminant transport with the velocity field and pressure heads computed with the mixed hybrid finite element method. In this case, the particle tracking is only used for the advection, and a numerical finite element technique is used for the dispersion/diffusion.

Coupled modelling

The fluid viscosity and fluid density are functions of the temperature, the pressure and the concentrations of several solute components in the fluid. These coupling between flow and transport equations are implicitly taken into account in TAFFETAS.

Automatic Calibration

All the model's parameters can automatically be calibrated in TAFFETAS (Khan-Newton automatic calibration method). For example, the following spatialized parameters can be calibrated:

- matrix conductivity and storage coefficient, fracture transmissivity;
- diffusion, longitudinal and transversal dispersions, porosity;
- fluid density and fluid viscosity;
- flow flux, mass flux and heat flux as time dependant functions.

Self adaptive meshes

For the simultaneous solution of flow, thermal and multicomponent transport problems defined over 3D general double porosity regions (fractured porous rocks), an original approach of space refinements with coupled 1D, 2D and 3D finite elements, is proposed. The implemented multigrid modified method (coarser to finer meshes are fitted into each other) is an efficient h-method (some father element is partitioned into smaller elements) for transient flow and transport modelling. New refinement criteria and mesh adaptation rules are defined.

Validation

The model verification has been carried out by its users' group. It has been applied for the steady and transient flow modelling in double porosity domain (Aspö, Sweden). It has also been applied to study the pathways of radioactive waste in granite rock (Grimsel, Switzerland; Finnsjön, Sweden; Neuvy Boin, France) and to matrix diffusion of contaminated waste material deposited in Münchehagen (Germany) and in Mol (Belgium).

Synthèse

TAFFETAS (Transport And Flow: Finite Element Techniques in Aaquifer Simulations) est un logiciel de simulation des écoulements et du transport de masse (multi-composants) et de chaleur en milieu poreux et/ou fracturé.

TAFFETAS est issu du code ROCKFLOW développé à l'université de Hanovre (IFS) et assure une compatibilité ascendante totale pour les modèles antérieurement réalisés avec ROCKFLOW au BRGM (entre 1989 et 1994).

TAFFETAS a été écrit en fortran 90 entre octobre 1994 et octobre 1995 et propose par défaut les méthodes de ROCKFLOW.

Les différentes possibilités de modélisation sont :

- les écoulements en régime permanent ou transitoire, dans un domaine bidimensionnel ou tridimensionnel. Les techniques disponibles utilisent des éléments finis 1D, 2D et 3D couplés. Ces éléments sont linéaires, quadratiques ou cubiques pour la méthode conforme, et sont vectoriels pour la méthode mixte hybride. Ils permettent :
 1. la prise en compte d'une matrice poreuse 3D et des fractures conductrices 2D,
 2. la prise en compte de toutes les géométries envisageables (en 2D et en 3D) ainsi que de toute distribution d'hétérogénéité et de toute anisotropie directionnelle ;
- le transport d'un ou de plusieurs solutés (composants chimiques) et/ou le transport de chaleur par diverses méthodes complémentaires :
 1. les éléments finis conformes (méthode de Taylor-Galerkine avec correction des oscillations liées à l'advection) et plusieurs schémas d'intégration temporelle (Cranck-Nicolson ou Leismann-Frind),ou
 2. une méthode de déplacement aléatoire de particules (Random Walk),ou
 3. une méthode des Caractéristiques (M.O.C) combinant suivi de particules (pour l'advection) et méthodes numériques (éléments finis mixtes hybrides ou conformes pour la dispersion et la diffusion) ;
- le couplage de l'hydrodynamique, du transport de masse (multi-composants) et du transport de chaleur est réalisé via la densité et la viscosité du fluide ;
- le calage automatique des différents paramètres lors des simulations par une méthode modifiée de Khan-Newton ;

- l'affinement automatique du maillage, permettant le contrôle des erreurs de discrétisation, à la fois pour le calcul des écoulements et le calcul des transferts de masses et de chaleur.

Les développements en cours concernent :

- le couplage avec la chimie (interactions physico-chimiques) : utilisation d'un réacteur chimique. (début 1996) ;
- le développement de méthodes de simulations des transferts multi-phasiques : écoulements de fluides immiscibles (1995), transport et échanges de solutés par ces fluides (1996) ;
- l'optimisation du code pour le calcul parallèle (sujet de parallélisation sur la ferme de stations Alpha).

Enfin, le logiciel TAFFETAS est un outil de calculs doté d'une interface utilisateur (TAF) assumant les fonctions de pré-processeur et de post-processeur (hors actions graphiques) ainsi que l'accès aux "runs" du logiciel principal sur micro-ordinateur (compatible PC) et sur station Alpha.

FICHE LOGICIEL

TAFFETAS

TRANSPORT AND FLOW: FINITE ELEMENT TECHNIQUES IN AQUIFER SIMULATIONS

TAFFETAS est un logiciel pour la modélisation - par éléments finis - des écoulements et du transport de masse et/ou de chaleur en milieu poreux et/ou fracturé. Issu du code ROCKFLOW, initialement développé à l'Université de Hanovre (Institut für Strömungsmechanik), TAFFETAS a été entièrement remanié par le BRGM: réécriture en FORTRAN 90, renforcement des possibilités (éléments linéaires, quadratiques, mixte-hybrides, ...).

TAFFETAS permet de modéliser les écoulements et le transport en milieu géologique hétérogène, du type matrice + fissures. La perméabilité de la matrice peut résulter soit de l'existence d'une véritable porosité, soit d'un réseau de fissures suffisamment connectées pour que le milieu présente une continuité hydraulique à l'échelle du problème étudié. Outre les milieux à double porosité, comprenant à la fois une roche perméable et un réseau de fractures, il est possible de traiter les milieux poreux continus "classiques" et les milieux à seule porosité de fractures.

La flexibilité de la technique de discrétisation utilisée, par éléments finis mono-, bi- et tridimensionnels, permet de suivre avec précision la géométrie des discontinuités, notamment pour respecter la forme des fractures et des aménagements souterrains (puits, galeries, parois étanches...).

REFERENCES

Au cours des 5 dernières années, ROCKFLOW puis TAFFETAS ont été principalement utilisés pour modéliser les écoulements autour de sites profonds de stockage de déchets, notamment dans le cadre de programmes internationaux.

Domaines d'application :

TAFFETAS permet de résoudre les problèmes d'écoulement rencontrés dans différents domaines fracturés ou non:

- gestion des aquifères :
 - évaluation des termes du bilan hydraulique (entrées-sorties, stockage-déstockage),
 - interactions entre forages ;
- environnement :
 - modélisation de la migration d'un ou de plusieurs polluant(s) dans une nappe ;
- stockage souterrain de déchets industriels :
 - étude du confinement d'un stockage souterrain ;
- géothermie :
 - étude des doublets géothermiques du bassin Parisien.

Manuels d'utilisation : Rapport R38621DR/HGT/95	Ordinateurs : PC Système d'exploitation : DOS Station Alfa: Open VMS Station Alfa: Unix
Langage de programmation : FORTRAN 90	Versions : Français

TAFFETAS

Possibilités offertes par TAFFETAS :

TAFFETAS propose différentes possibilités de modélisation :

- écoulement en régime permanent ou transitoire, dans un domaine bidimensionnel ou tridimensionnel, avec une combinaison d'éléments finis 1D, 2D et 3D couplés entre eux. Ces éléments peuvent être linéaires, quadratiques ou cubiques pour la méthode conforme, et sont vectoriels pour la méthode mixte-hybride. Ils permettent :
 - la prise en compte d'une matrice poreuse 3D connectée à des fractures conductrices 2D (aussi bien en écoulement qu'en transport). Au sein de la matrice, les écoulements suivent la loi de Darcy généralisée. Par contre, dans les fractures, il est possible de simuler des lois non linéaires,
 - la prise en compte de toutes les géométries envisageables (en 2D et en 3D), ainsi que de toute distribution d'hétérogénéité et d'anisotropie, indépendamment de la direction des axes ;
- transport d'un ou de plusieurs composants chimiques ("transport multicomposants") et/ou transport de chaleur selon trois méthodes complémentaires. Cette offre permet de sélectionner la meilleure méthode en fonction du problème posé et d'effectuer des comparaisons entre les résultats obtenus avec différentes méthodes. Les techniques proposées sont les suivantes :
 - éléments finis conformes (méthode de Taylor-Galerkine avec correction des oscillations liées à l'advection),
 - méthode des déplacements aléatoires (Random Walk), encore appelée méthode des particules,
 - méthode des caractéristiques (MOC), combinaison des deux méthodes précédentes ;
- couplage de l'hydrodynamique, du transport de masse (multicomposants) et du transfert de chaleur, réalisé via la densité et la viscosité du fluide ;
- calage automatique des différents paramètres du modèle, selon une variante de la méthode de Khan-Newton.

TAFFETAS est doté d'une interface utilisateur (TAF) assumant les fonctions de pré- et de post-processeur et permettant le contrôle de l'exécution des calculs. A souligner la présence d'un mailleur automatique 3D mis au point conjointement avec l'Université de Okayama (Japon).

TAFFETAS est constitué de 15 bibliothèques thématiques (FLOWlib pour les écoulements, MASSlib pour le transport CFEM, MHMClib pour le transport MOC avec MHFEM et RWPTlib pour le transport avec Random Walk, PATHlib pour les trajectoires, MULlib pour le multi-phasique, SOLVlib pour les solveurs de systèmes linéaires, COUlib pour les couplages implicite, CONDLlib pour le conditionnement des matrices, OPTlib pour le calage automatique des paramètres, ADAPlib pour les maillages auto-adaptatifs, CHIMlib pour le couplage avec la chimie, READlib: lecture de toutes les données, UTILlib contenant les utilitaires et TAFFlib le programme principal).

Tableau des possibilités actuelles de modélisation avec TAFFETAS

possibilités de TAFFETAS		X :	opérationnelle										
		0 :	réalisable										
		- :	sans objet										
	simple ou double porosité	hydraulique			transfert: méthode conforme			transfert: méthode des particules			transfert: méthode MOC		
		conforme linéaire	conforme autres ...	mixte hybride	mono-composant thermique	multi-composant	mono-composant thermique	multi-composant	mono-composant thermique	multi-composant			
hydraulique	1D	X	X	0	X	X	X	0	0	0	0	0	0
	2D	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
	1D et 2D	X	X	0	X	X	X	0	0	0	0	0	0
	3D	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
	2D et 3D	X	X	0	X	X	X	0	0	0	0	0	0
trajectoires	2D	X	X	X	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	3D	X	X	X	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	2D et 3D	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	-
transfert: méthode conforme	1D	X	X	-	X	X	X	-	-	-	-	-	-
	2D	X	X	-	X	X	X	-	-	-	-	-	-
	1D et 2D	X	X	-	X	X	X	-	-	-	-	-	-
	3D	X	X	-	X	X	X	-	-	-	-	-	-
	2D et 3D	X	X	-	X	X	X	-	-	-	-	-	-
transfert: méthode des particules	2D	0	0	X	-	-	-	X	X	X	-	-	-
	3D	0	0	X	-	-	-	X	X	X	-	-	-
	2D et 3D	0	0	0	-	-	-	0	0	0	-	-	-
transfert: méthode MOC	2D	0	0	X	-	-	-	-	-	-	X	X	X
	3D	0	0	X	-	-	-	-	-	-	X	X	X
	2D et 3D	0	0	0	-	-	-	-	-	-	0	0	0
raffinement automatique du maillage	2D	X	0	0	X	X	X	0	0	0	0	0	0
	3D	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	2D et 3D	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
calage automatique des paramètres	2D	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
	3D	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
	2D et 3D	X	X	0	X	X	X	0	0	0	0	0	0

Glossaire

Blocs poreux : groupe d'éléments connexes définis par leurs paramètres hydrodynamiques communs (perméabilité, coefficient d'emmagasinement, porosité, ...),

- en 2D, toute surface concave ou convexe limitée par une ligne brisée fermée, constituée de segments 1D (fractures ou limites type rivière à charge imposée, ou ligne à flux imposé ou à flux nul ou lignes fictives),

- en 3D, tout volume fermé, concave ou convexe limité par un ensemble de sections planes appartenant entre autre à des fractures planes, ou à la topographie, etc... et sur lesquelles peut être appliqué tout type de conditions aux limites.

Blocs vides : des blocs vides peuvent être inclus dans le maillage, par exemple pour simuler une galerie ou tout autre cavité souterraine.

Caractéristiques (méthode des) : MOC. La méthode des caractéristiques appliquée à l'équation du transport, consiste à séparer la composante advective, traitée par une méthode de suivi de trajectoires, des composantes diffusives et dispersives, traitée par une méthode numérique (éléments finis mixtes hybrides par exemple).

Conditions aux limites (CL) : conditions imposées aux variables (charge, pression, température, concentrations ...) ou à leurs dérivées (flux volumiques, flux massiques ...).

Couplage densitaire et visqueux : lorsque le fluide est le vecteur du transport de chaleur d'une part, et/ou de différents composants chimiques d'autre part, sa viscosité et sa densité peuvent varier en fonction de la température d'une part et/ou des concentrations (via la salinité par exemple) d'autre part.

Double porosité : un domaine poreux perméable intersecté par un réseau de fractures conductrices est dit à double porosité. En plus de la porosité de matrice à la fonction capacitive souvent prépondérante, le réseau de fractures confère au domaine une seconde porosité dite de fractures à fonction essentiellement conductrice.

Éléments finis : la méthode des éléments finis consiste à utiliser une approximation simple de variables inconnues pour transformer les équations aux dérivées partielles en équations algébriques. L'approximation par éléments finis est une approximation en certains points (appelés noeuds) dans un domaine partitionné en sous-domaines (appelés éléments).

Élément linéaire, élément quadratique incomplet ou complet, élément cubique... : l'élément est désigné par le type d'interpolation ou d'approximation simple qui le caractérise : l'interpolation peut être linéaire (en 1D, bilinéaire en 2D et trilinéaire en

3D), c'est-à-dire que la variable physique considérée (par exemple la pression) ne peut varier que linéairement au sein de chaque élément de ce type. De même la fonction d'interpolation sur l'élément peut être quadratique, cubique etc...

	1D (monodimensionnel) (2 sommets)	2D (bidimensionnel) (4 sommets)	3D (tridimensionnel) (8 sommets)
linéaire	2 noeuds	4 noeuds	8 noeuds
quadratique incomplet	3 noeuds	8 noeuds	20 noeuds
quadratique complet	3 noeuds	9 noeuds	27 noeuds
cubique incomplet	4 noeuds	12 noeuds	32 noeuds

Elément de référence : c'est l'élément unitaire dont toutes les coordonnées (dites locales) sont comprises entre (-1 et +1). En éléments finis, la plupart des opérations sont réalisées après transformation dans l'élément de référence.

Fonction de forme (ou fonction de base) : fonctions scalaires ou vectorielles définies par élément et utilisées, ainsi que leurs dérivées pour approcher les variables physiques scalaires ou vectorielles sur cet élément.

Fracture ou faille : structure plane (en 3D) ou ligne brisée (en 2D) plus transmissive que son encaissant poreux. Les accidents étanches (colmatés) doivent être uniquement considérés de manière géométrique.

Maillage adaptatif : simulation permettant d'améliorer automatiquement la finesse du maillage en fonction d'un critère, d'une part pour les écoulements, et d'autre part pour les transferts.

Méthode conforme (FEM: finite element method) : méthode des éléments finis avec fonctions de base (ou de forme) scalaires identiques aux fonctions d'interpolation (GALERKINE) pour la définition d'une seule variable (par exemple la pression).

Méthodes mixtes (MFEM: mixed FEM) : la formulation mixte de l'équation de diffusivité permet d'approcher simultanément la charge piézométrique (ou la pression) et le champ de vitesse.

Le système d'équations alors construit est dit mixte car il comprend simultanément comme inconnues des pressions nodales et des vitesses élémentaires.

Méthode mixte hybride (MHFEM: Mixed Hybrid FEM) : - l'approche mixte hybride consiste à choisir comme inconnues principales les traces de pression (TP) en éliminant les autres inconnues. Après avoir résolu le système d'équations en traces de pression, on utilise sur chaque élément les équations locales pour déterminer les flux à travers les côtés et la pression moyenne par élément.

Multi-composant : transport simultané de plusieurs espèces chimiques.

Objet géologique : la liste des objets désignés sous ce titre dans la base d'objets comprend : les rivières, les points fixes, les puits, les fractures, les blocs poreux, les blocs vides, les points de départ des trajectoires.

Puits (2D ou 3D) : tout forage susceptible en cours de simulation d'être sollicité (pompage ou injection) ou tout drain linéaire (ouvrage abandonné entre 2 aquifères) lieu de circulation forcée. En 2D, il s'agit d'un point, et en 3D d'une ligne brisée définie par une liste de noeuds. Les débits sont nodaux et varient au cours du temps.

Random Walk (RW) : méthode de modélisation du transport par déplacements aléatoires dite de "la marche au hasard", utilisant le déplacement d'un ensemble de particules pour simuler le transport d'un soluté.

Rivière : une rivière est constituée d'une ligne brisée de noeuds situés sur la surface topographique du modèle en 3D.

Les noeuds sont à potentiels imposés en fonction du temps.

Trace (de) : la trace d'une variable sur une face donnée d'un élément est une approximation moyenne de cette variable sur cette face. L'utilisation des traces permet d'assurer la continuité du champ considéré au travers de la face commune à deux éléments voisins.

Trajectoires et lignes de courant : une ligne de courant en régime permanent peut être générée à partir de tout point du domaine. Il en est de même en régime transitoire, mais la succession des segments de lignes de courant pour chaque pas de temps, est appelée trajectoire.

Trajectoires inverses : en régime permanent, pour définir l'aval hydraulique d'un point donné, l'utilisateur peut définir la ligne de courant aboutissant en ce point. Les trajectoires inverses peuvent être tracées en partant du pourtour d'un ouvrage en pompage ou à partir d'une limite aval d'un aquifère (rivière drainante par exemple).

SOMMAIRE

Volume 1. METHODES et POSSIBILITES

- **Hydrodynamique**
- **Transport de solutés**
- **Couplages**
- **Maillages adaptatifs**
- **Calage automatique**

Volume 2. PROCESSING

- **Pré-processing: Construction du modèle**
- **Post-processing: Résultats**

Volume 3. DONNEES de MODELISATION

- **Données nécessaires**
- **Informations pour la maintenance du code**
- **Bibliographie**

Volume 4. EXEMPLES d'APPLICATIONS

VOLUME 1

Méthodes et possibilités

- **Hydrodynamique**
- **Transport de solutés**
- **Couplages**
- **Transport de chaleur**
- **Maillages adaptatifs**
- **Calage automatique**
- **Ecoulements multiphasiques**
- **Double porosité**

Sommaire

Introduction	5
Préambule : modélisation 2D et 3D des domaines poreux et/ou des domaines fracturés	6
1. Hydrodynamique.....	8
1.1. Objectifs et méthodes	9
1.2. Méthode conforme.....	9
1.3. Méthode mixte hybride.....	12
1.3.1. Formulation variationnelle mixte de la loi de Darcy	13
1.3.2. Formulation variationnelle de l'équation de continuité	14
1.3.3. Ecoulements en régime permanent (au moins un $S = 0$ dans le modèle)	16
1.3.4. Ecoulements en régime transitoire	16
1.4. Ecoulements avec densité variable	16
2. Trajectoires	17
2.1. Calcul des vitesses aux faces	17
2.1.1. Eléments linéaires conformes	17
2.1.2. Eléments quadratiques conformes	17
2.1.3. Eléments cubiques conformes	17
2.1.4. Eléments mixtes hybrides	17
2.2. Méthode de Pollock	18
2.2.1. Formulation dans l'élément de référence	18
2.2.2. Correspondance des vitesses au point courant	18
2.3. Etat permanent/état transitoire	19
2.3.1. Régime permanent : trajectoires infinies ou tronçons temporaires	19
2.3.2. Régime transitoire	19
2.4. Trajectoires directes/trajectoires inverses	19
2.4.1. Trajectoires directes	19
2.4.2. Trajectoires inverses	20

3. Transport de solutés	21
3.1. Méthodes	21
3.1.1. Méthode des éléments finis conformes	21
3.1.2. Méthode Random Walk (RW) : Cheminements aléatoires	27
3.1.3. Méthode des caractéristiques (MOC) : Advection par particules et dispersion par EF mixte hybride	29
3.1.4. Désintégration	31
3.1.5. Coefficient de retard	32
3.2. Multi-composants	32
3.2.1. La gestion des conditions aux limites (CL).....	33
3.2.2. Optimisation de la résolution	33
3.3. Couplage transport géochimie	34
3.3.1. Introduction	34
3.3.2. Implémentation dans TAFFETAS.....	35
3.3.3. L'appel aux calculs chimiques.....	37
3.4. Couplage visqueux et densitaire	38
3.5. Couplages implicites (boucle de Picard)	39
3.5.1. Couplage des équations différentielles : équation d'état.....	39
3.5.2. Accélération des itérations : présentation pour le cas densitaire simple	39
3.5.3. Critère général	41
4. Transport de chaleur	42
4.1. Phénomènes géothermiques : Equivalence avec le transport de masse.....	42
4.2. Couplage visqueux et/ou densitaire.....	45
4.2.1. Cas séquentiel.....	45
4.2.2. Cas itératif implicite pur.....	45
5. Maillages adaptatifs	46
5.1. Objectifs et méthodes	46
5.1.1. Objectifs	46
5.1.2. Méthodes implicites	46
5.1.3. Critère d'affinement a posteriori.....	46
5.1.4. Techniques d'affinements des maillages	47

5.2. Utilisation en modélisation hydrodynamique.....	47
5.3. Utilisation pour les transferts de masse et de chaleur.....	48
5.4. Utilisation simultanée en hydrodynamique et en transport	48
6. Calage automatique des paramètres et des données	49
6.1. Méthode.....	49
6.2. Applications.....	49
7. Ecoulements multiphasiques : développement en cours	51
7.1. Ecoulements de deux phases immiscibles	51
7.2. Zone Non Saturée (ZNS).....	51
7.3. Ecoulements biphasiques 1D/2D/3D.....	51
8. Double porosité	52
8.1. Hydrodynamique	53
8.2. Transport par la méthode FEM.....	53
8.3. Transport par la méthode RW	53
8.4. Transport par la méthode MOC.....	53
8.5. Ecoulements multi-phasiques	53

Liste des figures

Fig. 1 - Concept de modélisation des écoulements.

Fig. 2 - Zones fracturées tridimensionnelles.

Schéma 3.5.1. - Enchaînement itératif du couplage.

Introduction

TAFFETAS est un outil de modélisation des systèmes aquifères en terme d'hydrodynamique et de transfert de masse et de chaleur. Ces systèmes aquifères peuvent être poreux et/ou fracturés, bidimensionnels (plan ou coupe) ou tridimensionnels. Leurs modélisations en régime permanent et/ou transitoire permettent d'envisager la gestion quantitative et qualitative de la réserve d'eau douce que constitue les nappes. La protection des réserves en eaux, lorsqu'elles sont menacées (pollutions diffuses ou ponctuelles, chroniques ou accidentelles) passe bien souvent par l'étude de scénarios prédictifs à l'aide d'un modèle. De plus, les méthodes proposées dans TAFFETAS garantissent des simulations fiables dans leurs détails, apportant aux décideurs un plus grand confort dans les choix qu'ils sont amenés à faire dans la gestion de la ressource ou du risque liés aux stockages de tout type (chimiques, radioactifs ...).

Pour tous les problèmes à géométries complexes (réseaux de fractures, réseaux de galeries, ouvrages souterrains, topographie et réseaux hydrographiques chahutés) et nécessitant un calcul précis, les méthodes éléments finis présentées ici sont spécialement efficaces. Ces méthodes sont indispensables pour le calcul des écoulements dans un milieu anisotrope dont les directions principales de perméabilité varient dans l'espace.

Préambule : modélisation 2D et 3D des domaines poreux et/ou des domaines fracturés

Pour garantir un résultat le plus proche possible du comportement de "mère nature", nous avons fait porter notre effort sur les points classiquement faibles de l'analyse d'un système aquifère par une modélisation hydrogéologique. Considérant les équations fondamentales des écoulements et du transport, la modélisation (numérique) consiste à réaliser les opérations suivantes :

- 1) inventorier les données disponibles et les confronter aux questions posées, pour décider de l'utilité d'une modélisation hydrodynamique et de sa faisabilité ;
- 2) discrétiser l'espace en intégrant, si possible, toute la connaissance que l'on possède du domaine à étudier, et l'ensemble des demandes du décideur (situations des sites et extensions possibles des impacts) ;
- 3) discrétiser le temps en fonction de la connaissance historique du système aquifère et de la (ou des) question(s) posée(s), définir des scénarios pouvant répondre aux demandes du décideur ;
- 4) estimer les valeurs des paramètres inconnus et évaluer l'impact des hypothèses physiques et géologiques choisies, sur les réponses apportées par les différentes simulations ;
- 5) et en permanence au cours des étapes précédentes, contrôler la non-apparition de biais numériques liés aux choix des pas de temps et d'espace ainsi qu'aux méthodes de modélisation, telles des oscillations ou autres instabilités toujours possibles dans des systèmes numériques complexes.

Pour faciliter la tâche du modélisateur, donc limiter les risques d'erreurs, TAFFETAS propose :

- une discrétisation aisée de l'espace grâce à la grande souplesse des éléments finis et l'utilisation d'une panoplie de mailleurs automatiques basés sur une description conceptuelle du milieu en terme d'objets hydrogéologiques ;
- une méthode mixte hybride pour le calcul simultané des charges hydrauliques et des flux, fournissant des bilans locaux parfaitement équilibrés (d'autant plus que TAFFETAS est écrit en double précision) ;

- trois méthodes de calcul du transport pouvant être utilisées concurremment :
 - . une méthode sans diffusion numérique en transport et sans aléas (MOC),
 - . une méthode par déplacements aléatoires (Random Walk),
 - . une méthode classique aux éléments finis conformes (CFEM) ;
- une technique de maillage auto-adaptatif permettant de supprimer tous les risques numériques liés aux gradients abrupts (propagation de fronts de pression, de concentrations et de température) ,
et
- une méthode robuste de calage automatique des paramètres du modèle.

Enfin, TAFFETAS est dérivé du code ROCKFLOW de l'université de Hanovre (depuis novembre 1994). Il est entièrement écrit en fortran 90 et rendu évolutif par sa structuration en bibliothèques autonomes.

1. Hydrodynamique

L'équation de diffusivité décrivant l'hydrodynamique d'un domaine poreux et/ou fracturé, saturé et captif est :

Pour un fluide isodensitaire :

$$(1.) \quad -\nabla(K.\nabla H) + S_s \frac{\partial H}{\partial t} = Q$$

H	[L]	: charge hydraulique
∇H	[-]	: gradient de la charge
$K = k (\rho_0/\mu_0) g$	[LT ⁻¹]	: tenseur de perméabilité à l'eau
k	[L ²]	: tenseur de perméabilité intrinsèque
ρ_0	[ML ⁻³]	: densité de l'eau douce
g	[LT ⁻²]	: accélération de la pesanteur
μ_0	[ML ⁻¹ T ⁻¹]	: viscosité dynamique de l'eau douce
$\frac{\partial H}{\partial t}$	[LT ⁻¹]	: dérivée temporelle de la charge
$S_s = \rho_0 g [(1-n) C_m + n C_w]$	[L ⁻¹]	: emmagasinement spécifique
Q	[T ⁻¹]	: terme source volumique
C _m	[Pa ⁻¹]	: compressibilité de la matrice poreuse
C _w	[Pa ⁻¹]	: compressibilité de l'eau

Pour un fluide à densité variable, l'équation en charge équivalente d'eau douce $H = P/\rho_0 g + Z$ est :

$$(1. \text{ bis}) - \nabla(K'.\nabla H) + S'_s \frac{\partial H}{\partial t} = Q' - n \frac{\partial \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)}{\partial t} - \nabla \left[K' \left(\frac{\rho}{\rho_0} - 1 \right) . Z \right]$$

avec

n	[-]	: porosité
$K' = K (\rho/\rho_0)(\mu_0/\mu)$	[LT ⁻¹]	: perméabilité à l'eau de densité ρ et de viscosité μ
$S'_s = S_s (\rho / \rho_0)$	[L ⁻¹]	: emmagasinement d'eau de densité ρ
$Q' = Q.(\rho / \rho_0)$	[T ⁻¹]	: terme source volumique, d'eau de densité ρ

1.1. OBJECTIFS ET METHODES

Pour calculer les écoulements dans un domaine aquifère, les objectifs des différentes méthodes développées et implémentées dans TAFFETAS sont :

- d'utiliser au maximum la souplesse des éléments finis d'un point de vue géométrique ;
- de proposer des méthodes originales pour assurer simultanément une convergence rapide et des bilans locaux exacts ;
- d'assurer un calcul du champ de vitesse suffisamment précis en milieu hétérogène pour envisager le transport advectif de masse ou de chaleur par suivi de particules.

La première méthode numérique utilisée dans TAFFETAS pour résoudre l'écoulement au sein d'un aquifère est celle des éléments finis conformes. Cette méthode facilite la discrétisation spatiale de domaine irrégulier contrairement à la méthode des différences finies. Elle fournit une approximation de la charge piézométrique sur l'ensemble du domaine modélisé. Le champ de vitesse est ensuite obtenu par dérivation locale de la charge piézométrique, élément par élément. Cette dérivation introduit une erreur numérique. De plus, le champ de vitesse ainsi obtenu est discontinu à l'interface de deux éléments. Cette méthode des éléments finis conformes est bien adaptée aux problèmes où seule la connaissance de la charge piézométrique est nécessaire. Par contre, pour des problèmes de transfert (de masse ou de chaleur), nécessitant une bonne connaissance du champ de vitesse, cette méthode peut se révéler insuffisante.

Le but des développements introduits dans TAFFETAS est de pallier cette insuffisance en proposant une autre méthode pour résoudre les mêmes problèmes d'hydrodynamique.

La deuxième méthode numérique utilisée dans TAFFETAS pour résoudre les écoulements est celle des éléments finis mixtes hybrides. Cette méthode approche simultanément la charge piézométrique et la vitesse de filtration, dans tout le domaine modélisé.

1.2. METHODE CONFORME

Nous donnons ci-après la formulation de l'équation fonctionnelle correspondant à 1. bis, sous sa forme en pression par commodité d'écriture, soit :

$$\rho.S.(\partial p)/(\partial t) + \text{div}(\rho.v) = \rho.q - n.(\partial \rho)/(\partial t)$$

Les considérations qui suivent, s'appliquent de la même manière à l'équation 1. bis en charge H (si $\rho=\rho_0$).

On considère l'équation fonctionnelle équivalente sur le domaine d'étude B :

$$(1.2.1.) \quad \int_B \varphi \cdot \rho \cdot S \cdot (\partial p)/(\partial t) \cdot dV + \int_B \varphi \cdot \text{div}(\rho \cdot v) \cdot dV = \int_B \varphi \cdot \rho \cdot q \cdot dV - \int_B \varphi \cdot n \cdot (\partial \rho)/(\partial t) \cdot dV$$

où la fonction de forme φ est un élément quelconque de l'espace des fonctions admissibles T (voir [Gärtner, 1987]). En appliquant la première intégrale de Green, on obtient l'équation de continuité

$$(1.2.2.) \quad \int_B \varphi \cdot \rho \cdot S \cdot (\partial p)/(\partial t) \cdot dV - \int_B (\text{grad}(\varphi))^T \cdot \rho \cdot v \cdot dV =$$

$$\int_B \varphi \cdot \rho \cdot q \cdot dV - \int_{\Gamma} \varphi \cdot \rho \cdot v_n \cdot dS - \int_B \varphi \cdot n \cdot (\partial \rho)/(\partial t) \cdot dV$$

où $\Gamma \equiv$ enveloppe du domaine d'étude
 $v_n \equiv$ vitesse du fluide dans la direction des normales extérieures $\underline{n}$
 ($\underline{n}$ est perpendiculaire à Γ et est orientée vers l'extérieur)

En appliquant la loi de Darcy, on obtient l'équation fonctionnelle

$$(1.2.3.) \quad \int_B \varphi \cdot \rho \cdot S \cdot (\partial p)/(\partial t) \cdot dV + \int_B (\text{grad}(\varphi))^T \cdot \rho \cdot k/\mu \cdot \text{grad}(p) \cdot dV =$$

$$\int_B \varphi \cdot \rho \cdot q \cdot dV - \int_{\Gamma} \varphi \cdot \rho \cdot v_n \cdot dS - \int_B \varphi \cdot n \cdot (\partial \rho)/(\partial t) \cdot dV + \int_B (\text{grad}(\varphi))^T \cdot \rho \cdot (k/\mu) \cdot \rho \cdot g \cdot dV$$

L'enveloppe Γ du domaine d'étude se compose des deux parties Γ_1 et Γ_2 , qui se différencient par le type de conditions aux limites, soit :

$$p = p_0 \text{ sur } \Gamma_1 \text{ (conditions aux limites de Dirichlet)}$$

et

$$\rho v_n = - \rho \cdot k/\mu \cdot (\partial p/\partial n - \rho \cdot g) = \rho \cdot v_{n0} \text{ sur } \Gamma_2 \text{ (conditions aux limites de Neumann)}$$

Pour la résolution numérique de l'équation de continuité (1.2.3), l'application de la méthode des différences finies à la dérivée temporelle permet de produire une équation fonctionnelle discrète qu'on peut ensuite résoudre comme un problème aux limites avec la méthode de GALERKINE.

On calcule les répartitions des pressions $p = p(x, y, z, t)$ en approchant la dérivée locale de la pression par une interpolation linéaire $p(x, y, z, t) = (1 - \Theta)p^- + \Theta p^+$ pour $t^- \leq t \leq t^+$ et $0 \leq \Theta \leq 1$ avec $p^- = p(x, y, z, t^-)$ et $p^+ = p(x, y, z, t^+)$

On obtient un procédé absolument stable, où le pas de temps n'est soumis à aucune restriction, pour les valeurs $\Theta \geq 0,5$. La méthode fournit pour $\Theta = 0,5$ une solution oscillante, qui est amortie pour les valeurs $\Theta > 0,5$. Il est recommandé d'exécuter les calculs avec la valeur $\Theta = 1,0$ (schéma implicite pur).

Après la discrétisation temporelle, l'équation (1.2.3.) donne une répartition des pressions $p(x,y,z)$ qui n'est plus fonction que de la localisation. On calcule par approximation

$$p(x,y,z) \approx p_0 + \sum_{i=1}^n c_j \cdot \omega_j(x,y,z)$$

Les fonctions de forme ω_j vérifient $\omega_j(x_i, y_i, z_i) = 1$ pour $i = j$ et $\omega_j(x_i, y_i, z_i) = 0$ pour $i \neq j$ de telle manière que les coefficients c_j soient immédiatement interprétables comme les pressions aux n points j (noeuds). En appliquant le développement précédant, on transforme l'équation différentielle de la fonction inconnue $p(x,y,z)$ en un système d'équations algébriques à n coefficients inconnus si simultanément le nombre jusqu'à présent infini des fonctions test est réduit à un système de n fonctions $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$.

$$\begin{aligned} & [1/\Delta t \int_B \varphi_i \cdot \rho \cdot S \cdot \omega_j \cdot dV + \Theta \int_B (\text{grad}(\varphi_i))^T \cdot \rho \cdot k/\mu \cdot \text{grad}(\omega_j) \cdot dV] p_j^+ = \\ (1.2.4.) \quad & 1/\Delta t \int_B \varphi_i \cdot \rho \cdot S \cdot p^- \cdot dV - (1-\Theta) \int_B (\text{grad}(\varphi_i))^T \cdot \rho \cdot k/\mu \cdot \text{grad} p^- \cdot dV \\ & + \int_B \varphi_i \cdot \rho \cdot q \cdot dV - \int_{\Gamma_2} \varphi \cdot v_n \cdot dS - \int_B \varphi_i \cdot n \cdot (\partial p)/(\partial t) \cdot dV + \int_B (\text{grad}(\varphi_i))^T \cdot \rho \cdot (k/\mu) \cdot \rho \cdot g \cdot dV \\ & \text{pour } i, j = 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

Le domaine d'étude B est découpé en sous-domaines B^e (avec $e = 1, 2, \dots, m$ éléments finis) dont les sommets sont les noeuds du réseau. On constate par ailleurs que les fonctions de forme ω_j ne sont différentes de zéro que dans un domaine B_j^p défini ci-après : le domaine B_j^p doit englober tous les éléments finis B^e qui sont raccordés aux noeuds ayant les coordonnées (x_j, y_j, z_j) et est également représenté sous forme de patch. Il en va de même pour les fonctions test φ_j introduites en (1.2.4.).

Il convient d'interpréter les intégrales qui apparaissent dans ce système algébrique non pas pour la totalité du domaine B mais seulement pour les sous-domaines B^e , ce qui, compte tenu de la définition des fonctions de forme, est particulièrement simple.

On obtient ainsi l'équation élémentaire

$$\begin{aligned} & [1/\Delta t \int_{B^e} \varphi_i \cdot \rho \cdot S \cdot \omega_j \cdot dV + \Theta \int_{B^e} (\text{grad}(\varphi_i))^T \cdot \rho \cdot k/\mu \cdot \text{grad}(\omega_j) \cdot dV] p_j^+ = \\ (1.2.5.) \quad & [1/\Delta t \int_{B^e} \varphi_i \cdot \rho \cdot S \cdot \omega_j \cdot dV - (1-\Theta) \int_{B^e} (\text{grad}(\varphi_i))^T \cdot \rho \cdot k/\mu \cdot \text{grad}(\omega_j) \cdot dV] p_j^- \\ & + \int_{B^e} \varphi_i \cdot \rho \cdot q \cdot dV - \int_{\Gamma_2^e} \varphi \cdot v_n \cdot dS - \int_{B^e} \varphi_i \cdot n \cdot (\partial p)/(\partial t) \cdot dV \\ & + \int_{B^e} (\text{grad}(\varphi_i))^T \cdot \rho \cdot (k/\mu) \cdot \rho \cdot g \cdot dV \\ & \text{pour } i, j = 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

Le calcul des intégrales du système d'équation (1.2.5.) se fait par acquisition des termes élémentaires et diffère selon les types d'éléments. L'assemblage nécessaire en volumes partiels B_i^p ("patches") conditionne la construction du système d'équations et s'opère par la sommation des valeurs en fonction de la position respective des sommets des éléments qui déterminent la numérotation des noeuds dans le système d'équations.

Chaque charge imposée est introduite en modifiant les termes de l'équation correspondante dans ce système. Les débits imposés sont quant à eux reportés directement dans le membre de droite du système d'équations pour chaque noeud.

Remarque : Le système d'équations est normalisé de telle sorte que les éléments des diagonales principales de la matrice de coefficients prennent la valeur 1.

On résout en p_k le système algébrique suivant :

$$\sum_{k=1}^n \left(\frac{a_{ik}}{\Delta t} + \Theta b_{ik} \right) p_k = r_i + E_i \quad \forall i \in (1,n)$$

avec

$$a_{ik} = \int_{B^e} \varphi_i \cdot \rho \cdot S \cdot \omega_k \cdot dV$$

$$b_{ik} = \int_{B^e} (\text{grad}(\varphi_i))^T \cdot \rho \cdot k / \mu \cdot \text{grad}(\omega_k) \cdot dV$$

$$r_i = 1/\Delta t \int_{B^e} \varphi_i \cdot \rho \cdot S \cdot p^* \cdot dV - (1-\Theta) \int_{B^e} (\text{grad}(\varphi_i))^T \cdot \rho \cdot (k/\mu) \cdot \text{grad}(p^*) \cdot dV$$

$$E_i = \int_{B^e} \varphi_i \cdot \rho \cdot q \cdot dV - \int_{\Gamma_2^e} \varphi_i \cdot v_n \cdot dS - \int_{B^e} \varphi_i \cdot n \cdot (\partial \rho) / (\partial t) \cdot dV + \int_{B^e} (\text{grad}(\varphi_i))^T \cdot \rho \cdot (k/\mu) \cdot \rho \cdot g \cdot dV$$

et

$$p^* = p \text{ calculé au pas de temps précédent.}$$

Enfin, après résolution du système, on détermine les vitesses élémentaires de Darcy en appliquant la loi de Darcy, élément par élément :

$$v^e = -k^e / \mu^e \cdot (\text{grad } p - \rho \cdot g \cdot i_z) \text{ dans } B^e \quad \text{avec } i_z \text{ vecteur unitaire suivant l'axe des } z.$$

1.3. METHODE MIXTE HYBRIDE

Reprenant les notations des équations 1. et 1. bis, la formulation mixte (Siegel, 1995 : DEA) permet d'approcher simultanément le champ des charges H et le champ des vitesses v .

Pour ce faire, sur chaque élément E, on approche H et v :

- H_E est une approximation de la moyenne de H sur l'élément E ;
- TH_i est une approximation de la moyenne de H sur la face i, appelée trace de la charge sur la face i ;
- v_E est une approximation de $v = -K \cdot \text{grad} H$ sur l'élément E.

Un champ de vecteur v_E est déterminé par la connaissance de ses flux v_{Ei} à travers toutes les faces i (en 3D ou côtés en 2D) des éléments E du domaine d'approximation (domaine modélisé). Considérant comme fonctions de base sur les éléments le champ des vecteurs w_i correspondant respectivement à des flux unitaires à travers le côté i de l'élément et des flux nuls à travers les autres côtés, on peut écrire v_E comme combinaison linéaire des w_i :

$$v_E = \sum_i w_i \cdot v_{Ei}$$

1.3.1. Formulation variationnelle mixte de la loi de Darcy

Considérons la formulation de Darcy : $K^{-1} \cdot v = -\nabla H$ que nous pouvons intégrer sur l'élément E, en appliquant la formule de Green et en remplaçant H et v par leurs approximations, il vient :

$$(1.3.1.) \quad \int_E (K_E^{-1} v_E) w_i = H_E \int_E \nabla w_i - \sum_j TH_j \int_{A_j} w_i \cdot n_{Ej} \quad , \forall i \in \delta E$$

avec

E	indice d'un élément quelconque du maillage
δE	ensemble des faces de l'élément E (frontière de l'élément E)
A_j	face j de l'élément E
n_{Ej}	vecteur unitaire normal à la face A_j , sortant de l'élément E
K_E	tenseur de perméabilité de l'élément E
H_E	charge moyenne dans l'élément E
TH_j	trace de la charge sur la face A_j
w_i	fonction vectorielle, définissant un flux unitaire au travers de la face i

par construction, les w_i vérifient les deux relations suivantes :

$$\int_{A_j} w_i \cdot n_{Ej} = \delta_{ij}$$

$$\int_E \nabla w_i = 1.$$

L'équation (1.3.1.) devient donc : $\int_E K_E^{-1} \left(\sum_i w_j v_{Ej} \right) w_i = H_E - TH_i, \forall i \in \delta E$

L'hypothèse qui permet de réduire le système mixte en un problème dont les seules inconnues sont les TH_i , est l'hypothèse de continuité de la composante normale de la vitesse au travers de chaque face de chaque élément.

En posant $B_{Eij} = \int_E (K_E^{-1} w_i) w_j$ comme composante i,j d'une matrice B_E

on obtient :

$$(1.3.2.) \quad \sum_j v_{Ej} B_{Eij} = H_E - TH_i \quad \forall i$$

dès lors on peut obtenir une expression de la vitesse v_{Ej} en fonction de la charge moyenne H_E dans l'élément et des traces des pressions TH_j aux faces de l'élément E .

$$(1.3.3.) v_{Ej} = H_E \alpha_{Ej} - \sum_{i \in \delta_E} B_{Eji}^{-1} TH_i$$

$$\text{avec } \alpha_{Ej} = \sum_{i \in \delta_E} B_{Eji}^{-1}$$

$$\text{On définit aussi } \alpha_E = \sum_{j \in \delta_E} \alpha_{Ej}$$

enfin, on obtient l'expression de la somme des flux sur les faces d'un élément E avec :

$$(1.3.4.) \sum_{i \in \delta_E} v_{Ei} = H_E \alpha_E - \sum_{j \in \delta_E} \alpha_{Ej} TH_j$$

1.3.2. Formulation variationnelle de l'équation de continuité

D'autre part, l'équation de continuité appliquée à l'élément E (équation bilan) de volume VOL_E pour le pas de temps n , est :

$$(1.3.5.) VOL_E \cdot S_E \cdot (H_E^n - H_E^{n-1}) / \Delta t + \sum_{i \in \delta_E} v_{Ei}^{n\theta} = Q_E^n$$

$$\text{avec } v_{Ei}^{n\theta} = (1-\theta) v_{Ei}^{n-1} + \theta v_{Ei}^n$$

et Q_E^n le débit entrant dans l'élément E pendant le pas de temps n

en introduisant (1.3.4.) dans (1.3.5) il vient :

$$(1.3.6.) \text{VOL}_E \cdot S_E \cdot (H_E^n - H_E^{n-1}) / \Delta t + \alpha_E \cdot H_E^{n\theta} - \sum_{j \in \delta_E} \alpha_{Ej} \cdot TH_j^{n\theta} = Q_E^n$$

la charge moyenne H_E^n sur l'élément E au pas de temps n, peut dès lors être exprimée uniquement en fonction des traces sur toutes les faces de l'élément E.

$$(1.3.7.) H_E^n = (1 - \beta_E) H_E^{(n-1)} + Q_E^n \cdot \beta_E / \alpha_E + \sum_{i \in \delta_E} (\gamma_{Eij} / \alpha_{Ei}) \cdot [\theta \cdot TH_i^n + (1 - \theta) \cdot TH_i^{n-1}]$$

$$\begin{aligned} \text{avec } \beta_E &= \Delta t \cdot \alpha_E / (S_E \cdot \text{VOL}_E + \theta \cdot \Delta t \cdot \alpha_E) & \forall E \\ \text{et } \gamma_{Eij} &= \beta_E / \alpha_E \cdot (\alpha_{Ej} \alpha_{Ei}) & \forall i, j \end{aligned}$$

Or la continuité des flux au travers d'une face i d'un élément impose :

$$(1.3.8.) \quad \alpha_{Ei} \cdot H_E^n + \alpha_{E'i} \cdot H_{E'}^n = \sum_{j \in \delta_E} B^{-1}_{Eij} \cdot TH_j^n + \sum_{j \in \delta_{E'}} B^{-1}_{E'ij} \cdot TH_j^n$$

quelle que soit la face (interne) i commune aux éléments E et E'

$$\text{et (1.3.9.)} \quad \alpha_{Ei} \cdot H_E^n = \sum_{j \in \delta_E} B^{-1}_{Eij} \cdot TH_j^n + q_{ci}^n$$

quelle que soit la face (externe) i de l'élément E où q_{ci}^n est le débit imposé sur cette face.

Ces deux dernières expressions (1.3.8.) et (1.3.9.) expriment H en fonction de TH, et permettent donc d'éliminer H de l'équation bilan (1.3.7.) (hybridation).

Il en résulte le système d'équations en TH :

$$\begin{aligned} (1.3.10.) \quad \left[\sum_{j \in E} (B^{-1}_{Eij} - \gamma_{Eij}) \right] \cdot TH_i^n &= (1 - \theta) \cdot \left(\sum_{i, j \in E} \gamma_{Eij} \right) \cdot TH_i^{n-1} \\ &+ \sum_{i \in E} \alpha_{Ei} \cdot [(1 - \beta_E) H_E^{(n-1)} + Q_E^n \cdot \beta_E / \alpha_E] + q_{ci}^n \end{aligned}$$

Une fois les TH calculés avec (1.3.10.), on utilise :

$$\begin{aligned} (1.3.7.) &\text{ pour calculer les } H \\ (1.3.3.) &\text{ pour calculer les } v \end{aligned}$$

1.3.3. Ecoulements en régime permanent (au moins un $S = 0$ dans le modèle)

Le cas permanent est défini avec :

$$S_E = 0. \text{ donc } \beta = 1. \\ \text{et } \theta = 1.$$

1.3.4. Ecoulements en régime transitoire

Le cas transitoire est présenté par le système d'équations (1.3.10.) en TH (traces de charge).

Les conditions aux limites sont conformes à la logique des fichiers de données de ROCKFLOW, c'est-à-dire que toute contrainte (charge imposée ou flux imposé au travers d'une face ou flux imposé dans un élément) est assujettie à une fonction temporelle multiplicative, permettant de régir les variations des différents paramètres au cours du temps.

1.4. ECOULEMENTS AVEC DENSITE VARIABLE

Les écoulements densitaires sont pris en compte par le couplage avec l'équation du transport de masse (soluté) via une équation d'état qui définit la densité du fluide en fonction de la concentration en soluté.

Ce couplage implicite sera présenté en détail après la présentation du transport.

2. Trajectoires

2.1. CALCUL DES VITESSES AUX FACES

Les vitesses calculées sont donc, d'une part les vitesses de filtration de Darcy aux interfaces entre les différents éléments (qui sont en fait les flux relatifs à chaque face des éléments qui peuvent être dessinés grâce à l'option FLECHE) et d'autre part les vitesses réduites dans l'élément de référence (-1,+1). Ces dernières sont ensuite utilisées pour le calcul des trajectoires et le transport advectif en RW et MOC.

2.1.1. Éléments linéaires conformes

Pour tous les éléments conformes, les vitesses sont calculées par intégration numérique locale de la loi de Darcy, élément par élément. Un élément linéaire donne donc une vitesse constante dans l'élément de référence, et presque constante dans l'élément réel. Il y a donc discontinuité de la vitesse à la frontière de deux éléments voisins. La vitesse considérée est la moyenne des deux vitesses calculées dans chaque élément au centre de la face commune.

2.1.2. Éléments quadratiques conformes

La vitesse est linéaire dans chaque élément mais toujours discontinue aux faces. Les vitesses aux faces sont calculées comme indiquées au 2.1.1.

2.1.3. Éléments cubiques conformes

La vitesse est quadratique dans chaque élément mais toujours discontinue aux faces. Les vitesses aux faces sont calculées comme indiquées au 2.1.1.

2.1.4. Éléments mixtes hybrides

Le calcul hydrodynamique par la méthode des éléments finis mixtes hybrides donne directement les flux au travers des faces des éléments. Ces flux correspondent à un champ de vitesse continu sur tout le domaine modélisé.

2.2. METHODE DE POLLOCK

L'élément utilisé par TAFFETAS n'est généralement pas parallélépipédique. Par contre, l'élément de référence l'est. On fait donc l'hypothèse que la distribution des composantes des vitesses est linéaire au sein de l'élément de référence.

Dans un élément parallélépipédique, Pollock (1989) développe une expression analytique de l'équation des trajectoires, basée sur l'hypothèse de variation linéaire de chaque composante du vecteur flux V (ou vitesse de Darcy), par rapport à l'axe correspondant :

$$\begin{aligned} V_x &= V_{xW} + (X - X_0) \cdot [(V_{xW} - V_{xE}) / (X_W - X_E)] \\ V_y &= V_{yN} + (Y - Y_0) \cdot [(V_{yN} - V_{yS}) / (Y_N - Y_S)] \\ V_z &= V_{zU} + (Z - Z_0) \cdot [(V_{zU} - V_{zL}) / (Z_U - Z_L)] \end{aligned}$$

Ces équations ne sont valables qu'au sein de chaque élément (Lorsqu'au cours d'un pas de temps, on passe d'un élément à un autre, le calcul est repris dans le nouvel élément).

Les vitesses effectives u en sont déduites en divisant ces flux par la porosité cinématique de l'élément :

$$u_x = V_x / \omega, u_y = V_y / \omega, u_z = V_z / \omega.$$

2.2.1. Formulation dans l'élément de référence

Dans cette cellule parallélépipédique, Pollock intègre l'équation des vitesses pour calculer les trajectoires :

$$\begin{aligned} X &= -1. + 2 \cdot (u_{xW} / (u_{xW} - u_{xE})) \cdot \{ \exp[(t - t_0) \cdot (u_{xW} - u_{xE}) / 2.] - 1. \} \\ Y &= -1. + 2 \cdot (u_{yN} / (u_{yN} - u_{yS})) \cdot \{ \exp[(t - t_0) \cdot (u_{yN} - u_{yS}) / 2.] - 1. \} \\ Z &= -1. + 2 \cdot (u_{zU} / (u_{zU} - u_{zL})) \cdot \{ \exp[(t - t_0) \cdot (u_{zU} - u_{zL}) / 2.] - 1. \} \end{aligned}$$

Cette équation fournit l'expression d'une trajectoire au sein de l'élément de référence.

2.2.2. Correspondance des vitesses au point courant

Le calcul des déplacements étant effectué dans l'élément de référence, on a besoin de récupérer les coordonnées du point réel pour localiser les particules dans l'espace réel, au moment de visualiser les trajectoires ou un nuage de particules.

La correspondance entre un point $X(x,y,z)$ (espace réel), c'est-à-dire situé dans l'élément du domaine d'étude, et le point de l'élément de référence $\chi(\xi,\eta,\zeta)$ (espace de référence), s'écrit :

$$X(\chi) = \langle N(\chi) \rangle \{X_n\},$$

où X_n sont les coordonnées des noeuds de l'élément n , et $N(\chi)$ les fonctions de forme.

2.3. ETAT PERMANENT/ETAT TRANSITOIRE

Le calcul des trajectoires est toujours réalisé par la méthode de Pollock. Les tronçons sont définis de manières différentes suivant le régime des écoulements, en permanent (un pas de temps infini) ou en transitoire (en fonction du nombre et de la durée des pas de temps).

2.3.1. Régime permanent : trajectoires infinies ou tronçons temporaires

Les trajectoires sont calculées par tronçons durant les différents pas de temps définis dans le fichier des données hydrodynamiques, sauf au dernier pas de temps, où la trajectoire est automatiquement calculée pour un temps infini.

Dans le cas permanent, les porosités sont toutes initialisées à 100%.

2.3.2. Régime transitoire

Les trajectoires sont calculées par tronçons durant chaque pas de temps de l'hydrodynamique.

Dans le cas transitoire, les porosités sont toutes lues dans le premier fichier de transport (.TMD ou .TMT en thermique).

2.4. TRAJECTOIRES DIRECTES/TRAJECTOIRES INVERSES

2.4.1. Trajectoires directes

Les points de départ des trajectoires sont définis dans le fichier .TRA de deux manières différentes :

- soit en coordonnées locales dans les éléments :
 - . numéro de l'élément (format: I5),
 - . puis sur la même ligne, les trois coordonnées locales (comprises entre -1. et +1.) (format 3F10.0) ;

- soit en coordonnées absolues :
 - . trois coordonnées réelles dans le domaine modélisé (format 5X, 3F10.0).

La création du fichier .TRA puis sa modification sont réalisées dans l'option TRAJECTOIRE du sous-menu PREPARATION du pré-processeur de TAFFETAS. La définition des trajectoires est de ce fait très conviviale.

2.4.2. Trajectoires inverses

Cette option n'est disponible qu'en régime permanent (car en régime transitoire elle nécessiterait une mise en mémoire de l'évolution des champs de vitesse $v(x,y,z,t)$, sans être d'un quelconque intérêt pratique).

N.B. : Outre la représentation directe des vitesses, la présentation des trajectoires permet sur quelques cas symétriques de tester la précision du champ de vitesse.

3. Transport de solutés

3.1. METHODES

Les trois types de méthodes utilisés pour résoudre l'E.D.P. (équation aux dérivées partielles) du transport dans un domaine poreux et implémentés dans TAFFETAS sont :

- les méthodes numériques basées sur une discrétisation de l'espace et l'écriture locale de l'équation de la diffusion, comme les éléments finis conformes (FEM) : ces méthodes présentent deux types d'inconvénients, à savoir, d'une part une diffusion numérique parfois importante, et d'autre part des oscillations ou autres instabilités résultant pour l'essentiel du terme advectif de l'E.D.P lorsque ces méthodes sont améliorées pour limiter la diffusion numérique ;
- les méthodes de type Random Walk (RW) qui calculent convection et dispersion par suivi de particules, la dispersion étant artificiellement ramenée à un problème de convection grâce à un tirage aléatoire. Ces méthodes présentent l'inconvénient d'introduire un aléa statistique sur la répartition des particules, donc le calcul des concentrations. Cet aléa peut être nuisible pour les études de sensibilité et d'autre part, ces méthodes s'accommodent difficilement des forts contrastes de vitesses ;
- les méthodes mixtes dites MOC (méthode des caractéristiques) qui combinent les avantages des deux méthodes précédentes en éliminant la quasi-totalité de leurs faiblesses respectives, en traitant l'advection par le déplacement d'un nuage de particules suivant des lignes de courants, comme pour les méthodes à particules (RW : trajectoires de Pollock) et la diffusion/dispersion par une méthode numérique (ex. : FEM ou MHFEM) basées sur la même discrétisation de l'espace que celle utilisée pour calculer le champ de vitesse.

3.1.1. Méthode des éléments finis conformes

Le fluide de l'aquifère contient une substance dissoute de concentration massique $c = m_c/m$ ou de concentration volumique $w = mc/B = \rho c$

avec m la masse du mélange,
 m_c la masse de la substance contenue dans un volume B

ρ la densité du mélange avec $\rho = m/B$

La masse en solution est supposée petite devant la masse de fluide, afin de ne pas perturber le bilan de masse du fluide en circulation (équation de l'hydrodynamique : hypothèse du traceur).

a) Equation de conservation de la masse

Le mouvement du fluide est décrit dans un système de coordonnées cartésiennes $x-y-z$ par le champ permanent ou transitoire des vitesses réelles $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$, supposé connu ou déjà calculé.

Soit V le volume total du domaine occupé par l'aquifère. Soit B un volume partiel quelconque servant de volume de contrôle pour la formulation eulérienne du processus de transport.

On obtient alors pour la substance le bilan massique

$$(3.1.1.1.) \quad \int_B (\partial w)/(\partial t) dV = \int_B r dV - \int_{\partial B} (\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}) dS$$

où le taux de production spécifique r représente la production ($r > 0$) ou la destruction ($r < 0$) de la masse de la substance, tandis que $\mathbf{J} = J(J_x, J_y, J_z)$ représente le flux de substance

$$(3.1.1.2.) \quad \mathbf{J}(w) = \mathbf{v} \cdot w - \mathbf{D} \cdot \text{grad } w$$

$\mathbf{v}w$ désigne le flux advectif et $-\mathbf{D} \cdot \text{grad } w$ le flux diffusif avec un tenseur de diffusion $\mathbf{D}$ symétrique. Si $\mathbf{n}$ est le vecteur normal extérieur, $\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}$ est le flux de substance qui quitte le volume de contrôle B par la surface ∂B . Le membre de droite de (3.1.1.1.) décrit donc la variation spatiale de la masse de substance dans le volume B , alors que le membre de gauche représente la variation temporelle correspondante de la concentration volumique.

b) Formulation variationnelle de l'équation du transport

En appliquant l'intégrale de Gauss, on passe d'une intégrale de surface à une intégrale de volume dans l'équation de bilan :

$$(3.1.1.3.) \quad \int_B [(\partial w)/(\partial t) + \text{div}(\mathbf{J})] dV = \int_B r dV \quad \forall \text{ les volumes partiels } B \text{ de } V$$

L'équation fonctionnelle équivalente est :

$$\int_B \varphi \cdot [(\partial w)/(\partial t) + \text{div}(\mathbf{J})] dV = \int_B \varphi \cdot r dV \quad \forall \varphi \in T$$

On obtient par intégration par partie :

$$\int_V \varphi \cdot (\partial w)/(\partial t) dV - \int_V (\text{grad } \varphi)^T \cdot \mathbf{J} dV = \int_V \varphi \cdot r dV - \int_S \varphi \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dS \quad \forall \varphi \in T$$

La surface S du volume V se décompose en deux sous-surfaces S_1 et S_2 , auxquelles s'appliquent respectivement la condition aux limites de Dirichlet

$$w = w_0 \quad \text{sur } S_1$$

et la condition aux limites de Neumann (ou de Cauchy)

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{n} = w \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - (\mathbf{D} \cdot \text{grad } w) \cdot \mathbf{n} = J_{n0} \quad \text{sur } S_2$$

Compte tenu de ces conditions aux limites, on choisit un espace T des fonctions de forme, de sorte que

$$\varphi = 0 \quad \text{sur } S_1 \quad \forall \varphi \in T$$

Soit la condition initiale pour ce problème transitoire

$$w(x, y, z, t_0) = w^0(x, y, z) \quad \text{en } V,$$

où t_0 est le point de départ temporel.

c) Discrétisation temporelle

La dérivée locale temporelle de w est approchée par $w'/t = (w^1 - w^0)/t$ avec $t = t_1 - t_0$

Cette approximation permet de passer à l'équation différentielle semi-discrète suivante :

$$(3.1.1.4.) \quad (w^1 - w^0)/\Delta t + \text{div} [(1-\theta).J(w^0) + \theta.J(w^1)] = r.(t_0 + \theta.\Delta t)$$

Pour $\theta = 0$, on applique la méthode eulérienne et pour $\theta = 0.5$ la méthode centrée de Crank-Nicolson.

Remarques :

L'erreur sur la variable calculée w^1 , est liée à la méthode et a pour expression :

$$e(\theta) = |w^1 - w^1| = e_2(\theta) + e_3(\theta) + e_4(\theta) + e_5(\theta) + e_6(\theta)$$

- (1) Si on choisit $\theta = 0,5$, le terme $e_2(\theta)$ et tous les autres termes pairs $e_4(\theta)$, $e_6(\theta)$...s'annulent. Ces termes influent sur l'amplitude des composantes harmoniques de w . Mais si $\theta = 0,5$, le schéma (3.1.1.4) n'est pas amorti.
- (2) Les termes impairs $e_3(\theta)$, $e_5(\theta)$... génèrent des erreurs de phase des composantes harmoniques de w , où les termes d'erreur d'ordre supérieur n'entrent en ligne de compte que pour de hautes fréquences. Ces erreurs de phase altèrent en premier lieu le transport advectif et se manifestent par des erreurs oscillantes de la répartition des concentrations. Par contre, lorsqu'on ne simule pas seulement l'advection mais

aussi la diffusion, la fonction w ne comporte pas de composantes d'erreur haute fréquence.

Pour amortir les oscillations gênantes liées au transport advectif, on peut opter pour le schéma suivant :

$$1/\Delta t F(w^1 - w^0) + \text{div } J [(w^1 + w^0)/2] = r (+\Delta t/2)$$

Où l'opérateur F est défini par :

$$F(w) = w + (1/12) \cdot \Delta t^2 \cdot \text{div } [V \cdot \text{div}(v \cdot w)]$$

$$\text{avec } V = v \cdot v = \begin{bmatrix} v_x v_x & v_x v_y & v_x v_z \\ v_y v_x & v_y v_y & v_y v_z \\ v_z v_x & v_z v_y & v_z v_z \end{bmatrix}$$

On peut alors reformuler le système d'équations comme suit :

lorsqu'on écrit les dérivées secondes avec les fonctions test, il en résulte, en appliquant l'équation de continuité et en négligeant l'intégrale aux limites

$$\begin{aligned} \int_B ((1/\Delta t) \cdot \varphi_i \cdot \rho \cdot \omega_j + 1/2 \cdot \varphi_i \cdot \rho \cdot v \cdot \text{grad}(\omega_j) + 1/2 [\text{grad}(\varphi_i)]^T \cdot D \cdot \text{grad}(\rho \cdot \omega_j) + \\ \varphi_i \cdot \rho \cdot q \cdot \omega_j - \Delta t/12 \cdot [\text{grad}(\varphi_i)]^T \cdot V \cdot \text{grad}(\omega_j)) dV w_j^1 = \\ (3.1.1.5.) \quad \int_B ((1/\Delta t) \cdot \varphi_i \cdot \rho \cdot \omega_j + 1/2 \cdot \varphi_i \cdot \rho \cdot v \cdot \text{grad}(\omega_j) + 1/2 [\text{grad}(\varphi_i)]^T \cdot D \cdot \text{grad}(\rho \cdot \omega_j) + \\ \varphi_i \cdot \rho \cdot q \cdot \omega_j - \Delta t/12 \cdot [\text{grad}(\varphi_i)]^T \cdot V \cdot \text{grad}(\omega_j) + \varphi_i \cdot r) dV w_j^0 \end{aligned}$$

Le calcul du système d'équations se poursuit alors de manière analogue à la résolution de l'équation de continuité.

d) Formulations matricielles des schémas de discrétisation temporelle

Cette formulation (3.1.1.5) est accessible dans TAFFETAS (schéma de Crank-Nicolson avec correcteur de l'advection), mais n'est pas la seule disponible (Schéma sans correcteur, Schéma de Leismann et Frind...).

Les différents schémas de discrétisation peuvent être écrits, plus généralement [Leismann et Frind, 1989] sous la forme matricielle suivante :

$$([M]/\Delta t + [V] - d[D] - a[D_a]) \{C^{n+1}\} = ([M]/\Delta t - (1-d)[V] + (1-d)[D] + c_a[D_a]) \{C^n\} + \{B\}$$

Où $[D_a]$ est la matrice de diffusion artificielle [Leismann et Frind, 1989], et θ , θ_d et θ_a sont les facteurs de pondérations temporelles correspondant respectivement aux termes d'advection, de dispersion et de diffusion artificielle.

- Le schéma de Crank-Nicolson est défini par $\theta = 0.5$, $\theta_d = 1$ et $\theta_a = \theta_{ca} = 0$ et génère une matrice non symétrique.
- Le schéma de Leismann-Frind est défini par $\theta = 0$, $\theta_d = 1$ et $\theta_a = 0.5$ avec $\theta_{ca} = (1 - \theta_a)$, et génère une matrice symétrique. Le terme de diffusion artificielle est construit de manière similaire au terme correcteur F à l'aide de $V = v.v$ comme expliqué par Leismann and Frind [1989].

e) Tenseur de diffusion

On trouvera ci-après quelques remarques sur la deuxième composante du flux de matière, le flux diffusif $W = -D \cdot \text{grad } w$, s'écrit encore

$$(3.1.1.6) \quad \begin{bmatrix} W_x \\ W_y \\ W_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \partial w / \partial x \\ \partial w / \partial y \\ \partial w / \partial z \end{bmatrix}$$

La diffusion est un processus irréversible. Elle sous-tend les lois générales de la thermodynamique irréversible. On peut donc dire que le tenseur de diffusion doit être symétrique (relation de réciprocité d'ONSAGER-CASIMIR). Le tenseur de diffusion D possède en conséquence trois valeurs propres réelles λ_1 , λ_2 et λ_3 . Il existe donc une matrice de rotation Q présentant la propriété $Q^{-1} = Q^T$ et $D = Q^T \cdot \Delta \cdot Q$, avec

$$\Delta = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix}$$

On peut alors écrire l'équation (4.51) comme suit

$$W = -Q^T \cdot \Delta \cdot Q \cdot \text{grad } w$$

En multipliant par Q , on a :

$$Q \cdot W = -\Delta \cdot Q \cdot \text{grad } w$$

La symétrie du tenseur de diffusion ($D_{ik} = D_{ki}$) est représentative de l'orthotropie du processus de diffusion. La thermodynamique irréversible amène cependant à dire que les λ_i doivent impérativement être positifs.

Le tenseur de diffusion $\mathbf{D}$ est déterminé conformément à (3.1.1.6.) en fonction du système cartésien de coordonnées globales (x, y, z). Un système d'axes principaux est constitué avec les coordonnées (ξ, η, ζ) par rotation $\mathbf{Q}$ de (x,y,z).

L'hypothèse la plus souvent retenue part du principe que l'axe ξ et la ligne de courant sont tangents, autrement dit que cet axe a la direction de la vitesse réelle $\mathbf{v}$. Les axes η et ζ sont donc orthogonaux à cette ligne de courant.

Dans la direction des lignes de courant ainsi que perpendiculairement à celles-ci, une dispersion fonction de la vitesse est définie de telle sorte que la dispersion longitudinale α_L et la dispersion transversale α_T multipliées par la norme de la vitesse donnent le coefficient de dispersion dans les systèmes de coordonnées ξ , η et ζ . Lorsque ces coefficients sont de l'ordre de la diffusion moléculaire, on peut y adjoindre le coefficient de diffusion $\mathbf{D}$ (modèle 3). Sinon, la diffusion moléculaire n'est pas prise en compte (modèle 2). On peut donc formuler trois modèles de diffusion ou de dispersion :

Modèle 1 : Diffusion moléculaire

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = D$$

Modèle 2 : Dispersion mécanique fonction de la vitesse

$$\lambda_1 = \alpha_L |\mathbf{v}|$$

$$\lambda_2 = \alpha_T |\mathbf{v}|$$

$$\lambda_3 = \alpha_T |\mathbf{v}|$$

Modèle 3 : Fonction de dispersion générale, selon Scheidegger (Modèle 1 + Modèle 2)

$$\lambda_1 = \alpha_L |\mathbf{v}| + D$$

$$\lambda_2 = \alpha_T |\mathbf{v}| + D$$

$$\lambda_3 = \alpha_T |\mathbf{v}| + D$$

La matrice de rotation $\mathbf{Q}$ peut être déterminée en fonction du vecteur $\mathbf{v}$ (avec une certaine marge de liberté), de sorte que l'opération (3.1.1.6.) s'effectue avec les λ_i pour l'un des trois modèles de diffusion ou de dispersion.

3.1.2. Méthode Random Walk (RW) : Cheminements aléatoires

La théorie des équations différentielles stochastiques permet de traiter ces processus par une méthode de caractéristiques, propre aux équations hyperboliques, en considérant la dispersion comme le résultat de fluctuations aléatoires de la vitesse, qui se superposent au phénomène convectif moyen.

La technique d'intégration par Déplacements Aléatoires (Random Walk, souvent traduit par Marche au Hasard), consiste à déplacer, à chaque pas de temps, un grand nombre de particules suivant des tirages aléatoires obéissants à une distribution normale pour simuler la diffusion, après un déplacement convectif conformément à la vitesse locale (Prickett *et al.*, 1981) :

soit en 2D :

$$\begin{aligned} x(t_i) &= x(t_{i-1}) + u_x(t_{i-1}) \Delta t + (z_1 g_{11} + z_2 g_{12}) \sqrt{\Delta t}, & \text{et} \\ y(t_i) &= y(t_{i-1}) + u_y(t_{i-1}) \Delta t + (z_1 g_{21} + z_2 g_{22}) \sqrt{\Delta t}, & \text{avec :} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g_{11} &= u_x(t_{i-1}) \cdot \sqrt{[2\alpha_L/u_x(t_{i-1})]} ; & g_{12} &= -u_y(t_{i-1}) \cdot \sqrt{[2\alpha_T/u_y(t_{i-1})]}, & \text{et} \\ g_{21} &= u_y(t_{i-1}) \cdot \sqrt{[2\alpha_L/u_y(t_{i-1})]} ; & g_{22} &= -u_x(t_{i-1}) \cdot \sqrt{[2\alpha_T/u_x(t_{i-1})]} \end{aligned}$$

où z_1 et z_2 sont des nombres aléatoires tirés suivant une distribution normale de moyenne nulle et d'écart type unité.

Cependant, lorsque le champ de vitesses n'est pas uniforme, la méthode Random Walk traditionnelle se concrétise par l'envoi d'un excédent de particules dans les zones à plus faible vitesse. Elle conduit, en effet, à extrapoler la vitesse locale ; chaque déplacement élémentaire est calculé comme si la vitesse était uniforme, et égale à sa valeur au point de départ : d'une part dans la direction de la vitesse locale (par convection et dispersion longitudinale), d'autre part dans les directions perpendiculaires (par dispersion transversale). Si la vitesse réelle diminue fortement le long d'un de ces déplacements rectilignes, la particule se trouve projetée artificiellement dans une zone à plus faible vitesse. Cet artefact de calcul se traduit par des sur-concentrations dans ces zones, notamment au voisinage de points d'arrêt (stagnation points) ou dans des épontes peu perméables, le long de leur interface avec une couche aquifère.

a) Méthode d'intégration continue des vitesses

Une méthode proposée par Sauty et Barthélémy, consiste à suivre les lignes de courant lors du déplacement convectif, et du déplacement dispersif longitudinal. Or, une expression analytique approchée de la ligne de courant au sein d'une maille a été proposée par Pollock (1988). De façon similaire, le déplacement transversal peut être effectué le long d'une équipotentielle en 2D (Sauty, Barthélémy), ou d'une manière un peu plus approchée, dans le contexte plus difficile du 3D, à l'intérieur du plan normal à la ligne de courant (Séguin). Avec cette technique, le calcul de chaque déplacement

diffusif prend en compte la variation de la vitesse au cours du déplacement, et notamment au passage d'un élément à l'autre, où la perméabilité est susceptible de varier brusquement ; on évite les extrapolations supposant la vitesse constante en grandeur et direction depuis le point de départ de chaque déplacement élémentaire, tout en conservant la formulation traditionnelle du déplacement (Prickett). C'est cette méthode en version 3D qui est appliquée dans TAFFETAS.

b) Correspondance des vitesses au POINT COURANT

L'expression de la vitesse dans l'élément de référence a été dérivée par Trösch et Von Kanel (1990) :

$V_\chi = -K_\chi \partial H / \partial \chi$ avec $K_\chi = (J^{-1})^T K_X (J^{-1})$ le tenseur de perméabilité dans l'espace de référence, K_X le tenseur de perméabilité dans l'élément réel et avec J , Jacobien :

$J_{ij} = \partial X_j / \partial \chi_i = \langle N(\chi), \chi \rangle \{X_n\}$, où $\langle N(\chi), \chi \rangle$ sont les dérivées par rapport à χ des fonctions de forme $\langle N(\chi) \rangle$ (ou fonctions d'interpolation).

c) Correspondance des dispersions et dispersivités

Transposant la démonstration précédente, il est possible d'exprimer de façon similaire les coefficients de diffusion moléculaire D_m et les dispersivités (α_χ), utilisés pour calculer les déplacements aléatoires au sein de l'élément de référence.

$$D_{m\chi} = (J^{-1})^T D_{mX} (J^{-1}), \quad \text{et} \quad \alpha_\chi = (u_X / u_\chi) \chi (J^{-1})^T \alpha_X (J^{-1})$$

c) Etapes des calculs RW dans TAFFETAS

En résumé, la méthode RW de TAFFETAS (Particle Tracking) opère donc de la façon suivante :

- l'interpolation des vitesses est effectuée par application de la méthode de Pollock sur l'élément de référence carré (ou cubique en 3D) ;
- les déplacements convectifs et dispersifs longitudinaux suivent les lignes de courant ;
- les déplacements dispersifs transversaux suivent les droites perpendiculaires à la vitesse aux points de départ des segments en cours (2D), ou dans les plans normaux à celles-ci (3D) : premier déplacement horizontal et second déplacement selon l'intersection du plan normal à cette vitesse, et le plan vertical la contenant ;

- dans le calcul du déplacement élémentaire, on remplace la notion de déplacement aléatoire par un temps de transfert aléatoire : $\Delta x = u_x \cdot \Delta t + z_1 \sqrt{(2\alpha_L u \Delta t)}$ est remplacé par $\Delta x = u(\Delta t + \Delta t_z)$, avec $\Delta t_z = z_1 \sqrt{(2\alpha_L \Delta t / u)}$. Lorsque ce déplacement passe d'un élément dans un élément voisin, il est interrompu à l'interface, la portion de Δt_z non consommée est reprise dans l'élément suivant avec la vitesse propre à cet élément ;
- le retour à l'espace réel n'est nécessaire que lorsque l'on veut localiser les particules, par exemple pour calculer des concentrations (décompte de la densité spatiale des particules) au sein de voisinages qui ne seraient pas les éléments du maillage, ou pour tracer une trajectoire.

Le champ de vitesses peut être stationnaire ou varier dans le temps ; la source de polluants peut être instantanée (masses ou flux de concentrations connues), continue ou à concentration imposée.

3.1.3.Méthode des caractéristiques (MOC) : Advection par particules et dispersion par EF mixte hybride

a) Objectifs

La méthode MOC apporte un certain nombre de réponses aux problèmes classiques de la modélisation numérique du transport (dispersions numériques, oscillation amont-aval, aléas statistiques, conditions aux limites difficiles à prendre en compte...).

La méthode des caractéristiques (M.O.C.) permet de résoudre successivement le terme advectif (convection pure) en suivant un nuage de particules le long de leurs lignes de courant (courbes caractéristiques) puis les composantes dispersives et diffusives par une méthode numérique (DF : différences finies ou EF : éléments finis).

Nous avons étudié le couplage :

- du lancé de particules suivant les trajectoires analytiques calculées par la méthode de Pollock modifiée pour des éléments finis :
 - conformes (1 : fonctions scalaires linéaires, quadratiques ou cubiques)
 - ou mixtes hybrides (2 : fonctions vectorielles)
- et
- du calcul des termes diffusifs par des méthodes aux éléments finis (1 : conforme de BUBNOW-GALERKINE ou 2 : mixte hybride MHFEM).

Le renouveau de la méthode (par rapport à la présentation de D. Konikow et J. Bredehoeft, du code USGS, M.O.C. de 1978) résulte :

- de l'utilisation des trajectoires analytiques de Pollock modifié en éléments finis ;
- de la gestion d'un nombre total de particules (type Random Walk), maximum car alloué dynamiquement ;
- de l'utilisation d'éléments finis multilinéaires de géométries quelconques ;
- de l'utilisation d'un maillage déformable.

Les avantages de cette nouvelle méthode sont clairement mis en évidence :

- grande stabilité numérique des calculs : absence de tout problème numérique, même pour suivre des fronts abrupts ; absence d'aléa statistique ;
- prise en compte aisée de tous les types de conditions aux limites ;
- temps de calculs (CPU et globaux) très raisonnables ;
- applicabilité immédiate du concept en milieu fracturé (double porosité).

L'objectif principal du développement d'une méthode MOC dans TAFFETAS est donc de pouvoir suivre des fronts abrupts de masse ou de chaleur, en domaine poreux ou/et fracturé, tout en conservant la souplesse de discrétisation des éléments finis, et en contrôlant efficacement la précision des calculs (diffusion numérique, aléas statistiques, prise en compte des conditions limites).

b) Méthode

- Equation résolue dans le domaine Ω limitée par Γ : est

$$(3.1.3.1.) \quad R (\partial c)/(\partial t) = \nabla(D\nabla c - v.c) - \lambda.R.c + q$$

avec comme condition initiale : $c(x,0) = C_0(x)$ et R : coefficient de retard.

Les conditions aux limites sur Γ_i sont de la forme $(-D\nabla c + vc)n + \alpha(c - \varphi) = Q$

- La méthode de décomposition de C est : $C(x, t) = C_{adv}(x, t) + C_{r-dis}(x, t)$

avec

$C_{adv}(x, t)$ pour le problème d'advection pur (résolution par : "natural tracking = forward particle tracking")

et

$C_{r-dis}(x, t)$ pour le problème résiduel de dispersion (résolution par : "finite element analysis")

d'où la réécriture de (3.1.3.1.) qui donne (3.1.3.2.) et (3.1.3.3.) :

$$(3.1.3.2.) \quad R. \frac{\partial C_{adv}}{\partial t} + v. \nabla C_{adv} = - C_{adv}. \nabla v - R. dC_{adv}$$

avec $C_{adv}(x,0) = C_0(x)$

$$v. C_{adv}.n + \alpha (C_{adv} - \varphi) = Q \quad \text{sur } \Gamma_i$$

et (3.1.3.3.) $R (\partial C_{r_dis})/(\partial t) + v \nabla C_{r_dis} = \nabla (D. \nabla C_{adv}) - C_{r_dis}. \nabla v - R d C_{r_dis} + q$

avec comme condition initiale : $C_{r_dis}(x, \Delta t/2) = C_{adv}(x, \Delta t/2)$

et comme condition aux limites : $C_{r_dis} = \alpha \varphi / (V_n + \alpha)$

Nous nous proposons donc de résoudre les équations (3.1.3.2.) et (3.1.3.3.) successivement pour chaque pas de temps, de la manière suivante :

- pour l'équation (3.1.3.2.), nous utilisons :
 - . un nuage de particules réparties spatialement au temps t , uniformément dans les éléments du domaine,
 - . un calcul du déplacement de ces particules le long de leurs trajectoires (courbes caractéristiques) est alors réalisé : la trajectoire est analytiquement définie dans l'élément de référence par la formulation de Pollock présentée au paragraphe 3.1.2.,
 - . enfin le calcul des concentrations, résultant de la seule advection (C_{adv}) est réalisé aux noeuds du maillage ;
- pour l'équation (3.1.3.3.), nous utilisons :
 - . soit la méthode des éléments finis conformes de GALERKINE dont l'implémentation a été présentée au paragraphe 3.1.1. à condition de neutraliser le terme advectif (v) et le correcteur ($F = v.v/12$),
 - . soit une méthode des éléments finis mixtes hybrides (MHFEM) similaire à celle présentée au paragraphe 1.3., plus stable mais plus coûteuse en temps CPU.

3.1.4. Désintégration

Une loi de décroissance exponentielle (valable notamment pour l'évolution de la radioactivité) est prévue dans TAFFETAS :

$$(3.1.1.7.) \quad w = w_0 e^{-\lambda t} \quad , \quad \lambda = \ln(2) / T_{1/2}$$

w_0	:	concentration volumique au début de la période de temps
λ	:	constante de désintégration
t	:	durée du processus de désintégration
$T_{1/2}$	:	période de demi-vie de la substance

on peut rendre compte du comportement dans le temps d'un traceur radioactif.

3.1.5. Coefficient de retard

En cas d'absence de couplage avec la chimie, chaque processus de transport peut être affecté par un coefficient de retard R lié à la tortuosité τ et la porosité η du domaine poreux par un coefficient de partage C_p :

$$R = (1 + (1 - \eta) / \eta) \cdot \rho_r \cdot C_p / \tau \quad \text{avec } \rho_r \text{ la densité de la roche.}$$

3.2. MULTI-COMPOSANTS

Le transport de plusieurs composants est totalement implémenté dans TAFFETAS. Pour réaliser ce type de simulation, il suffit de créer un fichier des paramètres du transport par constituant. Ces fichiers identiques à ceux utilisés par le module TM de ROCKFLOW contiennent l'ensemble des paramètres définissant une simulation de transport d'un soluté ou de chaleur :

- les conditions limites en concentrations (ou températures) imposées en fonction du temps ;
- les conditions limites en flux massiques (ou flux calorifiques) imposées en fonction du temps ;
- les injections instantanées ou/et continues de masse (ou de chaleur) ;
- les paramètres des transferts de masses : porosité, diffusion moléculaire, dispersion longitudinale et transversale, tortuosité et coefficient de retard (différents pour chaque composant chimique) ;
- les paramètres des transferts thermiques : conductivité équivalente, dispersion thermique, masse volumique équivalente et chaleur spécifique équivalente.

Ainsi il est possible de simuler simultanément un transfert de chaleur dans un aquifère de diffusivité thermique D_t et un transfert de masse d'un soluté de diffusion moléculaire D_m dans l'eau.

3.2.1. La gestion des conditions aux limites (CL)

Les conditions aux limites (en concentrations imposées ou initiales, en flux massiques, ou en masses injectées instantanément ou continûment) sont indépendantes pour les différents composants.

Ainsi, dans une même simulation, le modélisateur peut imposer un flux de masse du composant A, une concentration imposée localement en un composant B, et un gradient régional de température.

3.2.2. Optimisation de la résolution

La résolution du transport est optimisée pour les trois méthodes FEM, RW ou MOC :

1. Pour les méthodes utilisant des particules, un seul stock de particules est géré pour tous les composants transportés. Chaque particule porte un vecteur des masses respectives en chaque composant. Cependant, tous les composants doivent avoir les mêmes coefficients de retard. Il existe un second stock de particules pour le transfert de chaleur.
2. Pour les méthodes utilisant une résolution matricielle, les conditions aux limites des différents composants sont comparées de manière à ce que,
 - . si elles sont identiques (c'est-à-dire du même type pour chaque inconnue en chaque point de calcul) la résolution matricielle est réalisée simultanément avec autant de second membres qu'il y a de composants chimiques (Une seule inversion de la matrice globale),
 - . si elles ne sont pas identiques, la résolution matricielle du système du transport est réalisée pour chaque composant chimique. Ce cas peut physiquement se produire lorsqu'un élément est soumis simultanément à des flux massiques latéraux et surfaciques (comme par exemple si il est situé à l'aval d'une rivière et dans une zone d'épandage).

Il en est de même pour les différents paramètres du transport de chaque composant chimique, constitutifs du système linéaire à résoudre. C'est-à-dire que le système linéaire n'est identique pour tous les composants que si ils ont tous les mêmes paramètres.

3.3. COUPLAGE TRANSPORT GEOCHIMIE

3.3.1. Introduction

Les méthodes implémentées jusqu'ici dans TAFFETAS supposent qu'il ne se produit pas, au cours du transport, d'interaction entre le fluide et le milieu poreux environnant ni, dans le cas de plusieurs composants, entre les différentes espèces chimiques transportées, ou bien que ces interactions peuvent être représentées simplement par :

- un terme de dégradation irréversible exponentiel (cf § 3.1.4)
- un coefficient de partage C_p ou un facteur de retard R (cf § 3.1.5).

Si l'on souhaite représenter des phénomènes chimiques plus complexes entre la matrice poreuse et le fluide, tels que précipitation, dissolution, adsorption/désorption, etc..., il faut alors réaliser un couplage du transport et de la chimie.

Le choix a été fait au BRGM de couplages **explicites** entre le code qui gère l'hydrodynamique et le transport et des modules dédiés à la résolution des équations du problème chimique considéré. Jusqu'à présent ont été réalisés les couplages de CAT avec transport par Random Walk (Fabriol et al., 1993), puis de MARTHE, d'abord sous forme d'un prototype avec seulement transport par Random Walk (Noyer, 1995), ensuite de MARTHE 5.5 pour toutes les méthodes de transport considérées, soit DF, RW et MOC, (Thiéry, 1995). Dans chaque cas, le code considéré, CAT ou MARTHE gère totalement l'hydrodynamique et le transport (sans interactions chimiques) de tous les solutés pendant un pas de temps, puis communique les concentrations des différents constituants au module chimique. Après calcul chimique (sans transport) pendant un pas de temps, les nouvelles concentrations pour les différents composants constituent l'état initial du transport au pas de temps suivant.

En ce qui concerne les calculs chimiques, le choix du BRGM a été de travailler avec des simulateurs **dédiés** à chaque problème rencontré, mis au point à l'aide du générateur de code NEPTUNIX de la CISI. De ce fait, on doit linker les modules hydro-transport qui sont généraux avec des modules de chimie qui changent en fonction du problème, on crée donc une version d'exécutable par problème traité. Les manipulations sont facilitées par la normalisation progressive, entre la mise au point du couplage de CAT et celui de MARTHE, de l'interface de communication transport/chimie. Cet interface est constitué de 5 modules FORTRAN et d'une librairie NEPTUNIX spécifique et fait appel à des fichiers de données propres à la chimie, comme indiqué au § 1.1 du volume 3.

Pour introduire la possibilité du couplage transport-chimie dans TAFFETAS, on s'est donc inspiré de l'expérience acquise au cours des travaux avec CAT et MARTHE, on a en particulier bénéficié de la normalisation des interfaces réalisée en 1995 ; de cette manière, on a pu utiliser tels quels les simulateurs chimiques issus de NEPTUNIX mis au point précédemment, ainsi que les solutions analytiques quand elles existent. Si on

effectue le calcul de façon analytique, les 5 modules FORTRAN supplémentaires et les bibliothèques d'interfaçage sont inutiles.

L'option retenue pour la chimie consiste à effectuer le calcul du nombre de moles en chaque **élément chimique** présent dans la phase aqueuse. On peut ainsi traiter n'importe quel système polyphasé sans se préoccuper a priori des espèces présentes. Chaque volume élémentaire du domaine de calcul discrétisé est considéré comme un réacteur chimique homogène, contenant outre les moles d'éléments de la phase mobile (aqueuse), celles des différentes phases immobiles (solides ou espèces fixées) : par précipitation ou adsorption, une certaine quantité d'éléments est stockée dans chaque volume élémentaire fixe; par dissolution ou désorption, une autre quantité est rendue mobile et transportée par le fluide. On considère que tous les éléments chimiques mobiles sont transportés par la phase aqueuse avec **la même vitesse et le même coefficient de dispersion**; pour N éléments transportés et M éléments fixes, on obtient donc un système de N équations de transport avec des termes source différents qui caractérisent les échanges chimiques et sont fonction des N concentrations C_i en solutés, des M concentrations S_j en éléments dans les phases solides et éventuellement du temps pour une cinétique non instantanée.

Le système à résoudre est donc constitué de N équations couplées par les termes d'échanges chimiques.

3.3.2. Implémentation dans TAFFETAS

Dans le cas du code MARTHE, le transport peut être effectué de 3 manières différentes c'est-à-dire par différences finies (DF), par Random Walk (RW) ou par la méthode des caractéristiques (MOC). Avec chacune des méthodes, le volume élémentaire de référence dans le domaine discrétisé est une maille de calcul : en DF, on résout le système des équations du transport en calculant les **concentrations** aux centres des mailles, en RW ou MOC, on répartit sur des particules les **masses** d'éléments transportés comptabilisées dans chaque maille. Dans tous les cas, les mailles sont les réacteurs chimiques.

Avec un code aux éléments finis tel que TAFFETAS, le problème de la discrétisation spatiale doit être reconsidéré : on peut se demander s'il vaut mieux prendre pour volume élémentaire de référence l'élément fini ou le volume d'influence autour d'un noeud, sachant que la concentration, lorsqu'elle est calculée directement, est une grandeur nodale. Ainsi, avec une méthode à particules, il sera sans doute nécessaire de prendre l'élément comme volume de référence pour comptabiliser la masse transportée.

Afin de mettre au point le couplage, on a décidé de retenir pour le transport la méthode aux éléments finis conformes (CFEM), avec schéma de discrétisation temporelle de Leismann et Frind (cf § 3.1.1). Dans un premier temps, on a considéré que les éléments étaient les réacteurs chimiques, ce qui nous a conduit, pour effectuer la chimie, à passer

des concentrations nodales calculées par résolution du transport à des concentrations élémentaires, obtenues par moyenne pondérée des valeurs nodales ; or, on a constaté que cette façon de procéder conduisait à des résultats incorrects pouvant devenir extrêmement mauvais dans le cas du transport d'un créneau non dispersé. On a donc complètement renoncé à cette option. La solution adoptée consiste donc à considérer que toutes les concentrations (éléments en solution ou espèces solides) pour tous les calculs (transport et chimie) sont des concentrations nodales et que les réacteurs chimiques sont les volumes d'influence autour des noeuds. On ne revient éventuellement aux concentrations élémentaires que pour l'affichage des résultats.

Dans ces conditions, le calcul se décompose à chaque pas de temps selon les 2 étapes suivantes :

a/ Transport par éléments finis conformes

Pour chaque élément chimique i , il faut résoudre un système d'équations discrétisées (une par noeud) qui s'écrit sous forme matricielle :

$$[T]_{n,n}[C]_n = [RHS]_n$$

avec

- n = nombre de noeuds de calcul dans le domaine,
- $[T]_{n,n}$ = matrice du transport de dimension $n.n$ intégrant les vitesses, les porosités et les dispersivités, elle est identique quel que soit l'élément chimique i (tous les éléments se déplaçant à la même vitesse et avec la même dispersion),
- $[C]_n$ = vecteur de dimension n des concentrations nodales (en élément chimique i) à calculer,
- $[RHS]_n$ = vecteur de dimension n intégrant les termes sources (dont les interactions chimiques), les conditions aux limites, les concentrations au début du pas ; ce vecteur est différent d'un élément chimique i à un autre.
Il suffit donc de calculer la matrice $[T]_{n,n}$ une seule fois et de résoudre le système pour chaque élément chimique i , éventuellement de façon parallèle (pour des conditions aux limites identiques).

b/ Interactions chimiques

Après le transport, les interactions chimiques sont calculées par résolution d'un système d'équations non linéaires qui ne font pas intervenir l'espace. Ces interactions peuvent donc être calculées en chaque noeud, indépendamment les uns des autres, éventuellement de façon parallèle.

Le module de transport fournit en entrée du module chimique les informations suivantes :

C_1 à C_n = concentrations en **éléments** chimiques dans la phase **mobile** (aqueuse)
 S_1 à S_m = concentrations en **espèces** chimiques dans la phase **immobile** (solide, eau liée)
 P = pression (utilisée dans certains cas)
 T = température (utilisée dans certains cas)
 Δt = durée du pas de temps (pour les réactions avec cinétique).

Le module chimique fournit en retour au module de transport les informations suivantes :

C_1 à C_n = concentrations en éléments chimiques dans la phase mobile après échanges
 S_1 à S_m = concentrations en espèces chimiques dans la phase immobile après échanges
 E_1 à E_s = concentrations en certaines espèces de l'une ou l'autre phase, résultants des réactions (informations demandées, par exemple le pH).

3.3.3. L'appel aux calculs chimiques

Nous avons suivi la procédure mise au point pour MARTHE (Thiéry, 1995).

Le modèle chimique est soit un modèle généré par NEPTUNIX, soit un modèle analytique quand il existe ; le choix du modèle est déterminé par la valeur du paramètre IMET_CHM lu dans PROJET.NOM (cf. § 1.1. vol. 3) :

- si IMET_CHM = 0, le modèle est généré par NEPTUNIX, il est nécessaire de linker les modules d'interfaçage ;
- si IMET_CHM > 0, on fait appel à une solution analytique intégrée dans TAFFETAS, celle de CXTFIT (Parker, 1985) pour IMET_CHM = 1 ou celle du test de la silice (test CHEMVAL) pour IMET_CHM = 2 ; à ce jour, ce sont les seuls modèles chimiques analytiques intégrés dans le code.

Pour que TAFFETAS puisse effectuer les calculs chimiques, il faut lui fournir un certain nombre de paramètres supplémentaires qui sont :

- des paramètres propres au simulateur NEPTUNIX qui sont passés dans un fichier NOMPROJ.NTX où NOMPROJ est le nom du projet (cf volume 3, § 1.1), ce fichier est ignoré par les simulateurs analytiques ;
- des paramètres propres au problème chimique à traiter qui sont passés dans NOMPROJ.PCH, ce fichier est lu par tous les simulateurs chimiques, ce fichier et le précédent sont "livrés" par le géochimiste avec le simulateur correspondant ;

- les valeurs des concentrations initiales en espèces chimiques dans la phase immobile qui sont passées dans le fichier NOMPROJ.SCS (cf. §1.4. vol 3) ; pour ce qui est des concentrations initiales et/ou imposées en éléments chimiques dans la phase aqueuse, elles sont données normalement dans les fichiers de transport de type NOMPROJ.TMx où x vaut D, 2, 3,N (cf volume 3, § 1.3.2.).

Un message d'erreur s'affiche en début d'exécution de TAFFETAS si l'un de ces 3 fichiers est absent du répertoire de travail alors que le couplage géochimique a été demandé dans le fichier PROJET.NOM. Les autres paramètres nécessaires au couplage géochimique, introduits dans le fichier PROJET.NOM, sont décrits aux § 1.1. vol. 3.

Enfin, des tests de validation comparatifs sont décrits au § 6 du volume 4.

3.4. COUPLAGE VISQUEUX ET DENSITAIRE

La viscosité et la densité d'une eau chargée en différents solutés i (de concentrations C_i), et soumise à une certaine température (T) et une certaine pression (p), sont définies en fonction des différentes variables (T, p, C_i), par des fonctions d'états.

Les fonctions d'état implémentées dans TAFFETAS sont :

- pour les eaux saumâtres :
 - . la viscosité dynamique μ d'une solution saline est exprimée en centipoise en fonction de :
 - la température en Celsius,
 - la concentration en équivalent NaCl (en moles /kg d'eau),
 - . la densité ρ (en g/l ou kg/m³) est exprimée en fonction de :
 - la température en Celsius,
 - la pression en atmosphère,
 - la salinité en g/l.

Les deux formulations implémentées résultent des travaux de M. Vandenbeusch et A. Menjoz (1972).

- pour les mélanges :
 - . la densité d'un mélange aqueux contenant les n espèces $h \in [1, n]$, est calculée dans l'hypothèse d'une variation linéaire en fonction du mélange :

$$\rho_{mix} = \rho_w \left(1 - \sum_{h=1}^n \frac{C_h}{C_h^{ref}} \right) + \sum_{h=1}^n \frac{C_h}{C_h^{ref}} \rho_{ref}$$

avec C_h^{ref} = concentration de référence pour l'espèce h donnant une densité connue ρ_h^{ref} pour une eau pure contenant uniquement la concentration C_h^{ref} en espèce h

C_h^{ref} est choisie de manière à vérifier $C_h^{\text{ref}} \geq \max(C_h) \quad \forall h \in [1, n]$
 ρ_ω = densité de l'eau pure.

. la viscosité dynamique d'un mélange aqueux contenant les n espèces $h \in [1, n]$, est calculée (Reid *et al.*, 1987), également dans une hypothèse de variation linéaire :

$$\ln \mu_{\text{mix}} = \sum_{h=1}^n \omega_h \ln \mu_h^{\text{ref}} + \left(1 - \sum_{h=1}^n \omega_h \right) \ln \mu_\omega^{\text{ref}}$$

avec μ_h^{ref} = la viscosité d'une eau contenant l'espèce h avec une concentration C_h^{ref}
 ω_h : la fraction massique de l'espèce h
 μ_h^{ref} : la viscosité de référence de l'eau pure

3.5. COUPLAGES IMPLICITES (BOUCLE DE PICARD)

3.5.1. Couplage des équations différentielles : équation d'état

Pour résoudre le problème de l'écoulement densitaire, on applique l'équation de diffusivité régissant l'hydrodynamique du fluide, ainsi que l'équation de transport d'un soluté (masse créant des différences de densité dans le fluide). Ces deux équations comportent néanmoins trois inconnues, à savoir la pression (d'où l'on déduit la vitesse grâce à l'équation de Darcy), la densité et la concentration. Le système d'équations doit être couplé par une équation. Il s'agit de l'équation d'état reliant la densité et la concentration, par exemple :

$$(3.5.1.) \quad \rho = \rho_0 + \beta_c \cdot (c - c_0)$$

qui établit, via le coefficient $\beta_c = \frac{\partial \rho}{\partial c}$, le rapport entre la densité et la concentration, avec ρ_0 : densité de référence pour une concentration c_0 .

3.5.2. Accélération des itérations : présentation pour le cas densitaire simple

Il n'est possible de résoudre une équation différentielle par approximation à l'aide des méthodes de particules ou des éléments finis que pour les problèmes linéaires, ces méthodes amenant à définir un système d'équations linéaires algébriques.

Toutefois, l'équation de transport n'est pas linéaire en raison de l'équation d'état (3.5.1.) entre la densité et la concentration. Une solution couplée ne peut donc être calculée que par itérations. En supposant la densité connue, on linéarise l'équation de transport, ce qui permet de la traiter. La densité étant fonction de la solution calculée en concentration, on améliore la répartition des densités en fonction des concentrations nouvellement calculées conformément à (3.5.1.). Puis il faut réitérer le calcul de densité jusqu'à ce que la solution soit stabilisée. De plus à une densité variable est associée un champ de vitesse variable, également pris en compte dans l'équation de transport, de sorte que la résolution de l'équation de continuité par approximation fait aussi partie de l'itération.

Si la densité varie très lentement et que les variations au cours d'un pas de temps peuvent être négligées, on peut avoir recours à un couplage explicite non itératif. Sinon, la méthode d'itération la plus simple consiste à injecter successivement des résultats intermédiaires dans les équations correspondantes conformément à la figure 3.5.1.

On peut cependant accélérer la convergence de la méthode itérative en améliorant les variables évaluées pour le pas suivant de l'itération. Une méthode simple expliquée par la formule (3.5.2) est connue sous le nom de méthode d'Aitken. La nouvelle variable évaluée est calculée selon la formule :

$$(3.5.2.) \quad C_a = C_1 - \frac{C_2 - C_1}{\frac{C_2 - C_1}{C_1 - C_0} - 1}$$

La valeur améliorée C_a résulte de trois états antérieurs, pour la calculer il faut deux boucles du schéma 3.5.1. ci-dessous. Il en résulte une convergence qui donne, d'après la littérature, au minimum les mêmes valeurs que la méthode de NEWTON-RAPHSON, sans pour autant qu'il faille calculer les dérivées des fonctions de forme.

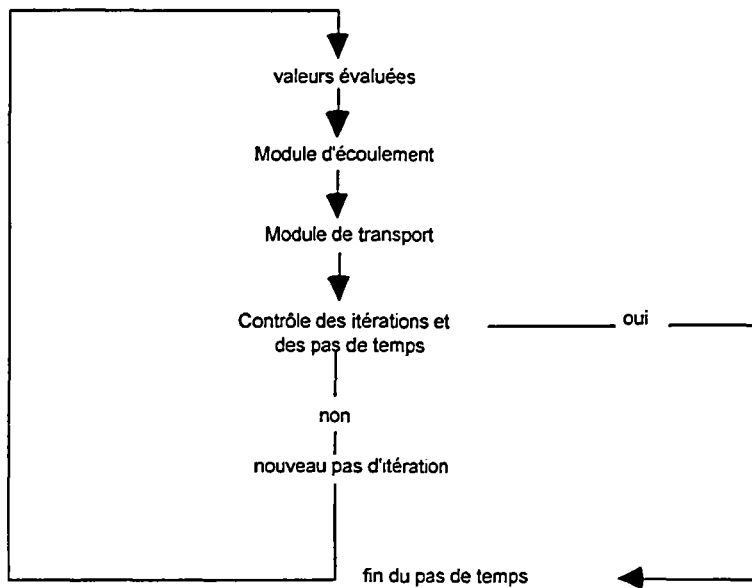


Schéma 3.5.1. - Enchaînement itératif du couplage.

3.5.3. Critère général

A chaque itération $h+1$ du schéma de Picard, l'ensemble des variables est confronté à un critère de convergence qui n'est autre qu'un différentiel de la variable entre deux itérations successives, inférieur à un seuil de tolérance imposé par l'utilisateur, et ceci pour tout instant t .

en pression max :

$$\max_n \left| \frac{p'(h+1) - p'(h)}{p'(h+1)} \right| \leq \text{seuil}_p$$

en concentration pour l'élément j :

$$\max_n \left| \frac{C_j'(h+1) - C_j'(h)}{C_j'(h+1)} \right| \leq \text{seuil}_c$$

en température :

$$\max_n \left| \frac{T'(h+1) - T'(h)}{T'(h+1)} \right| \leq \text{seuil}_T$$

en viscosité :

$$\max_m \left| \frac{\mu'(h+1) - \mu'(h)}{\mu'(h+1)} \right| \leq \text{seuil}_\mu$$

en densité :

$$\max_m \left| \frac{\rho'(h+1) - \rho'(h)}{\rho'(h+1)} \right| \leq \text{seuil}_\rho$$

n est le nombre de points discrétisés pour le calcul des pressions, des concentrations et des températures (noeuds ou faces),

m est le nombre de points discrétisés pour le calcul des viscosités et des densités (éléments ou faces).

4. Transport de chaleur

4.1. PHENOMENES GEOTHERMIQUES : EQUIVALENCE AVEC LE TRANSPORT DE MASSE

En transport de masse, les variations de la concentration C en soluté sont décrites par l'EDP (Bear, 1967) :

$$\text{div} (D_m \cdot \text{grad } C) - \text{div} (v \cdot C) = \omega \cdot \partial C / \partial t \quad \text{avec } D_m = \omega D + \alpha \cdot v$$

avec v = vitesse de Darcy

En transport de chaleur, les variations de la température T sont décrites par l'EDP (Marsily (de), 1987) :

$$\begin{aligned} \text{div} (D_T \cdot \text{grad } T) - \text{div} (v \cdot T) &= (\rho_{\text{equi}} C_{\text{equi}}) / (\rho_w C_w) \cdot \partial T / \partial t \\ \text{avec } D_T &= \lambda / (\rho_w C_w) = \lambda_o / (\rho_w C_w) + \beta \cdot v \\ \text{et } \rho_{\text{equi}} C_{\text{equi}} &= w_w \cdot \rho_w \cdot C + (1 - \omega) \cdot \rho_s C_s \end{aligned}$$

La transposition classique est définie par :

$$\begin{aligned} C &: \text{concentration} &= & T &: \text{température} \\ \omega &: \text{porosité} &= & (\rho_{\text{equi}} C_{\text{equi}}) / (\rho_w C_w) = V_T / v \\ D_m &: \text{diffusion/dispersion de masse} &= & \lambda / (\rho_{\text{equi}} C_{\text{equi}}): \text{diffusion thermique} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{avec } V_T &= \text{vitesse du front moyen de chaleur} \\ C &= \text{masse volumique et chaleur spécifique (equi: équivalent ; w: eau ; s: solide)} \\ \lambda &= \text{tenseur de conductivité équivalente} \\ \alpha &= \text{dispersion mécanique} \\ \beta &= \text{dispersion thermique} \end{aligned}$$

en fait, en masse on résout :

$$\text{div} (D_m / \omega \cdot \text{grad } C) - \text{div} (v / \omega \cdot C) = \partial C / \partial t$$

dont l'équivalent en thermique est :

$$\text{div} (\lambda / (\rho_{\text{equi}} C_{\text{equi}}) \cdot \text{grad } T) - \text{div} (v \cdot (\rho_w C_w) / (\rho_{\text{equi}} C_{\text{equi}}) \cdot T) = \partial T / \partial t$$

Ce type de problème est traité en utilisant les fichiers d'extension .TMD ou .TM2, .TM3, .TM4 ... etc

Les paramètres lus sont alors :

- la porosité ;
- la diffusion moléculaire ;
- la dispersion longitudinale ;
- la dispersion transversale ;
- le coefficient de partage (Kd) ;
- la tortuosité.

Mais, pour tenir compte à la fois des variations de λ et de ρC , on introduit un coefficient γ (paramètre donné du modèle) devant le terme $\partial T / \partial t$.

Il en résulte pour la méthode conforme (équation 3.1.1.5) :

$$\int_B \left((\gamma/\Delta t) \cdot \varphi_i \cdot \rho \cdot \omega_j + 1/2 \cdot \varphi_i \cdot \rho \cdot v \cdot \text{grad}(\omega_j) + 1/2 [\text{grad}(\varphi_i)]^T \cdot D \cdot \text{grad}(\rho \cdot \omega_j) + \varphi_i \cdot \rho \cdot q \cdot \omega_j - \Delta t / 12 \cdot [\text{grad}(\varphi_i)]^T \cdot V \cdot \text{grad}(\omega_j) \right) dV \cdot c_j^1 =$$

$$\int_B \left((\gamma/\Delta t) \cdot \varphi_i \cdot \rho \cdot \omega_j - 1/2 \cdot \varphi_i \cdot \rho \cdot v \cdot \text{grad}(\omega_j) - 1/2 [\text{grad}(\varphi_i)]^T \cdot D \cdot \text{grad}(\rho \cdot \omega_j) + \varphi_i \cdot \rho \cdot q \cdot \omega_j - \Delta t / 12 \cdot [\text{grad}(\varphi_i)]^T \cdot V \cdot \text{grad}(\omega_j) + \varphi_i \cdot r \right) dV \cdot c_j^0$$

L'équivalence avec la thermique est alors :

C	: concentration	=	T	:	température
ω	: porosité	=	$1/(\rho_w C_w)$	:	ρC pour l'eau
1.		=	$\gamma = (\rho_{\text{equi}} C_{\text{equi}})$	:	ρC équivalent
D_m	: diffusion/dispersion de masse	=	λ	:	conductivité équivalente

Ce type de problème est traité en utilisant les **fichiers d'extension .TMT**

Les paramètres lus sont alors :

pour l'aquifère	pour l'éponte
• le produit de la masse volumique du fluide par sa chaleur spécifique = $\rho_w C_w$ • La conductivité thermique de l'aquifère = λ_a • La dispersivité thermique longitudinale dans l'aquifère • La dispersivité thermique transversale dans l'aquifère • le produit de la masse volumique équivalente pour l'aquifère par sa chaleur spécifique = $\rho_a C_a$	• 0. • La conductivité thermique de l'éponte = λ_e • 0. • 0. • le produit de la masse volumique équivalente pour l'éponte par sa chaleur spécifique = $\rho_e C_e$

de manière à résoudre pour l'aquifère :

$$\text{div} [(\lambda_a + \rho_w C_w \cdot v_D) \cdot \text{grad } T] - \text{div} (v_D \cdot (\rho_w C_w) \cdot T) = (\rho_a C_a) \partial T / \partial t$$

et pour l'éponte :

$$\text{div} [\lambda_e \cdot \text{grad } T] = (\rho_e C_e) \partial T / \partial t$$

Remarque sur le schéma de Leismann et Frind en thermique

Le schéma de discrétisation temporelle de Leismann et Frind donne une matrice symétrique dont la résolution est donc plus rapide que pour d'autres schémas non symétriques. De plus, ce schéma donne, moyennant quelques précautions sur le choix des pas de temps, une convergence plus rapide car très stable du transport. Pour utiliser ce schéma en thermique, le terme de diffusion artificielle doit être calculé de la manière suivante (Menjoz, 1996) :

la conductivité thermique totale est exprimée par :

$$\lambda_{ij} = \lambda_0 + \rho_w C_w \cdot |v| \cdot \alpha + (\rho_w C_w)^2 / (\rho_{equi} C_{equi}) \cdot v_i \cdot v_j \cdot \Delta t / 2$$

$$\text{où } v_i \cdot v_j = V = \begin{bmatrix} v_x v_x & v_x v_y & v_x v_z \\ v_y v_x & v_y v_y & v_y v_z \\ v_z v_x & v_z v_y & v_z v_z \end{bmatrix}$$

donc, le terme de diffusion artificielle est :

$$\lambda_{ij}^* = (\rho_w C_w)^2 / (\rho_{equi} C_{equi}) \cdot v_i \cdot v_j \cdot \Delta t / 2$$

on vérifie que pour l'équivalence avec le transport de masse, en prenant :

$$\omega = (\rho_{equi} C_{equi}) / (\rho_w C_w) \quad \text{et} \quad \rho_{equi} C_{equi} = 1.$$

on retrouve la forme initiale de Leismann et Frind pour le terme de diffusion :

$$D_{ij}^* = (1/\omega)^2 \cdot v_i \cdot v_j \cdot \Delta t / 2$$

Remarque sur le calcul couplé en densitaire

En densitaire, la divergence du vecteur vitesse étant non nulle, on a :

$$\text{div} [\rho_w C_w \cdot v_D \cdot T] = (\rho_w C_w) \cdot [T \text{div} (v_D) + v_D \cdot \text{grad } T]$$

hydrodynamiquement, $\text{div}(\mathbf{v}_D)$ est alors un terme capacitif du type $S_S \cdot \partial h / \partial t$ qui génère un terme source $Q_{Told} = T \cdot S_S \cdot \partial h / \partial t$ pour le calcul du transport. Ce terme est ajouté au membre de droite :

$$\text{div} [(\lambda_a + \rho_w C_w \cdot \mathbf{v}_D) \cdot \text{grad } T] - \text{div} (\mathbf{v}_D \cdot (\rho_w C_w) \cdot T) = (\rho_a C_a) \partial T / \partial t + Q_{Told}$$

Il en va de même en transfert de masse :

$$\text{div} [(D_m / \omega) \cdot \text{grad } C] - \text{div} (\mathbf{v}_D / \omega \cdot C) = \partial C / \partial t + Q_{Cold}$$

$$\text{avec } Q_{Cold} = C \cdot S_S \cdot \partial h / \partial t$$

4.2. COUPLAGE VISQUEUX ET/OU DENSITAIRE

4.2.1. Cas séquentiel

Lorsque les pas de temps sont suffisamment petits, le couplage complet, pour un phénomène transitoire, n'est pas forcément nécessaire. Dans ce cas, on peut accélérer les simulations en supprimant les itérations du processus de Picard. Dès lors, l'action du transport de masse ou de chaleur sur l'écoulement via la densité et/ou la viscosité, n'est prise en compte qu'au changement de pas de temps, et donc n'agit que d'un pas de temps sur le pas de temps suivant.

Option I - PICARD = 0

4.2.2. Cas itératif implicite pur

Pour des raisons de stabilité du couplage, celui-ci est purement implicite.

Option I - PICARD = 1

5. Maillages adaptatifs

La simulation des processus d'écoulement et de transport dans un domaine poreux et fracturé est fortement influencée par la discrétisation spatiale choisie, c'est-à-dire le maillage du domaine de modélisation. Pour minimiser cette influence, l'utilisateur de TAFFETAS peut optimiser automatiquement les maillages de ses modélisations à l'aide d'une méthode de maillage adaptatif, entièrement automatique.

5.1. OBJECTIFS ET METHODES

Les maillages auto-adaptatifs répondent aux problèmes de simulation liés à l'existence de grands contrastes de vitesses et au suivi de front abrupt de concentrations ou de saturation. Le principe général, consiste à affiner le maillage uniquement là où celui-ci est trop grossier, c'est-à-dire où la dispersion numérique se manifeste le plus de part l'existence d'une forte erreur d'approximation de la solution calculée. Les éléments à affiner sont donc ceux présentant de grands gradients de charge lors d'un calcul hydrodynamique, ou de grands gradients de concentrations ou de température lors d'un calcul hydrodispersif.

5.1.1. Objectifs

L'objectif est de disposer d'un outil général d'affinement auto-adaptatif des éléments 1D, 2D et 3D en domaine à double porosité, lors du calcul simultané des écoulements, du transport de plusieurs composants chimiques dissous et du transfert de chaleur. De plus, cet outil doit être capable de fonctionner quelles que soient les méthodes numériques choisies par l'utilisateur pour le calcul d'une part, des pressions et des vitesses (CFEM ou MHFEM) et d'autre part des transferts (CFEM, MOC ou RW).

5.1.2. Méthodes implicites

Pour répondre à l'objectif précédant, la méthode d'affinement implémentée dans TAFFETAS est capable à chaque pas de temps d'optimiser itérativement le maillage, suivant un critère local d'erreur.

5.1.3. Critère d'affinement à posteriori

Le critère retenu, pour chaque phénomène étudié, est le gradient de l'inconnue calculée (charge, concentration, température), sur chaque face de chaque élément. Lorsque ce gradient est trop important (par rapport aux autres valeurs calculées dans le domaine de modélisation), la face associée à ce gradient doit être affinée en subdivisant le ou les

2 éléments partageant cette face. Un tel critère permet d'obtenir itérativement une équi-répartition de l'erreur sur tout le domaine. Ce critère est dit a posteriori car son évaluation nécessite une résolution au préalable du champ scalaire sur lequel il se base.

5.1.4. Techniques d'affinements des maillages

La technique d'affinement implémentée dans TAFFETAS consiste à subdiviser un élément père en plusieurs éléments fils. Ces méthodes sont désignées sous le nom de h-méthodes par opposition aux p-méthodes où l'affinement est réalisé par augmentation du degré des fonctions polynomiales d'interpolation. De plus, l'emboîtement successif des différents niveaux d'affinement permet de considérer le maillage comme une superposition de grilles emboîtées (méthode multi-grille) ce qui permet d'une part de faciliter la gestion du maillage, et d'autre part d'accélérer la vitesse de résolution des différentes simulations réalisées (systèmes d'équations des méthodes numériques).

5.2. UTILISATION EN MODELISATION HYDRODYNAMIQUE

Les paramètres de contrôle d'affinement automatique sont lus dans le **fichier PROJET.NOM**

```

C
C
C PROJECT DEFINITION
C
C
C TITLE: 2 spaces + 8 letters to give the files name (without extend)
C
C
C and 9 intergers (format 4X,I1)
C
C 1: 1 density coupling / 2 thermic only / 3 salinity only / 0 without
C 2: number of mass components (transport) < 9 (without thermic)
C 3: maximum number of step in self adaptive mesh : flow < 9
C 4: maximum number of step in self adaptive mesh : transport < 9
C 5: 1 with thermic transport / 0 without
C 6: 1 smoothing in 2D (Laplace's method)
C 7: number of additive refinement before unrefinement
C 8: number of grafic output pictures < 26
C 9: 1 with historic file (.HIS) / 0 without
C
C DATA
C the known files extensions are: .SMD or .DAT for the flow data + pathlines
C .TMD for the first component: transport data
C .TM1 , .TM2 , .TM3 ... for other components
C .TMT for thermic case
C
C RESULTS
C the generated files are .RES for the results
C .HIS for the historics
C
C / / / / / / / / / /
C titre I1 I2 I3 I4 I5 I6 I7 I8 I9
C / / / / / / / / / /
C adapmam1 0 3 0 0 0 0 100 0 1
C
C ....

```

Le paramètre qui contrôle l'affinement automatique du modèle hydrodynamique est I3 : le nombre de niveau d'affinement sur le champ calculé des gradients de charge (=0 si on ne veut pas affiner).

5.3. UTILISATION POUR LES TRANSFERTS DE MASSE ET DE CHALEUR

Le paramètre qui contrôle l'affinement automatique du modèle de transfert est I4 : le nombre de niveaux d'affinement sur le champ calculé des gradients des concentrations et/ou de la température (=0 si on ne veut pas affiner).

5.4. UTILISATION SIMULTANEE EN HYDRODYNAMIQUE ET EN TRANSPORT

Si I3 et I4 sont non nuls tous les deux, alors l'affinement est réalisé à la fois pour l'hydrodynamique et pour les transferts (pour chaque pas de temps).

Le paramètre I7 permet de définir le nombre maximum de niveaux d'affinement emboîtés les uns dans les autres avant de déclencher un retour au maillage grossier. Ceci permet de limiter la taille des maillages affinés automatiquement, qui dans le cas contraire est croissante à chaque pas de temps.

Le paramètre I6, utilisable pour des problème 2D uniquement, permet de déclencher un lissage initial du maillage (méthode de Laplace : Equidistance des barycentres).

6. Calage automatique des paramètres et des données

La méthode de calage automatique de tout paramètre du modèle est dérivée de celle proposée par Khan (1990).

6.1. METHODE

La méthode utilisée, ses spécificités, son implémentation et plusieurs de ses applications sont présentées dans Fillion (1995).

6.2. APPLICATIONS

Le fichier .OPT est similaire aux fichiers .DAT ou .SMD contenant les données du modèle hydrodynamique, à l'exception des champs des paramètres à caler automatiquement, qui contiennent le code `XXXXXXXXXX99`.

Ce code renvoie en lecture dans le fichier PARAMOPT.DAT qui contient la description des paramètres à caler automatiquement (le nombre de 01 à 99 inscrit à la fin du code renvoi à la "position" de ce paramètre dans le fichier PARAMOPT.DAT (cette position est facultative, dans ce cas l'ordre séquentiel doit être respecté) :

fichier PARAMOPT.DAT

```

C
C (I5,3(1X,F10.0))
C nombre maxi d'iterations completes externes
C   nombre maxi de calcul
C     PRECITE : ecart mini. entre deux iterations successives
C       PRECRIT : ecart mini sur le critere
C         COEMXDT : maxi. multipl. increment correctif
C         COEMIDT : mini. multipl. increment correctif
C           D2MIN :
C             derivee seconde minimale
C
C   /   /   /   /   /   /
C 15 300 1.0000E-04 1.0000E-01 15. .2 5.0000E-03
C
C (I5)
C nombre de parametres a optimiser
C   6
C
C (2I5,4(1X,F10.0))
C   log si (1) arithmetique si (0) pas de callage de ce parametre si (2)
C   /
C     libre si (0) et meme que (precedant) si non
C   /
C     valeur initiale du parametre
C       /
C       Borne minimale
C         /
C         Borne maximale
C           /
C           Increment en pourcentage
C             / division par 100
C
C                                     FACULTATIFS
C                                     numero
C                                     de
C                                     'position'      texte
C                                     info.
C
C   /   /   /   /   /   /
C OBLIGATOIRE: parametres dans l'ordre rencontre dans le fichier .DAT si les numeros
C                de positions ne sont pas indiqués
C
C   1   0   0.01   1.0   100.   10.   1   infilt.
C   1   1   0.01   1.0   100.   10.   2   infilt.
C   1   0 .10194E-11 .10194E-13 .10194E-09 10.   3   bloc 1
C   1   0 .20387E-08 .20387E-10 .20387E-06 10.   4   frac 1
C   1   0 .50960E-10 .50960E-12 .50960E-08 10.   5   frac 2
C   1   0 .20387E-08 .20387E-10 .20387E-06 10.   6   frac 3

```

Le **fichier NOEVAOPT.DAT** contient l'ensemble des informations sur les points de calage :

- numéro du noeud ;
- valeur mesurée ;
- pondérateur ;
- type de donnée (charge, pression, concentration en un ième composant, température.. etc) ;
- temps (instant de la mesure : 0. si permanent).

```

C
C nombre de points de calage (I5)
C   5
C
C (2I5F10.0)
C node measured ponderate kind      time
C   /   /   /   /   /
C 28   4.00   1.   0   1.   0   0.
C 62   4.00   1.   0   1.   0   1.
C 67   4.00   1.   0   1.   1   1.
C 102  4.00   1.   0   1.   1   5.
C 125  4.00   1.   0   1.   3   5.

```

7. Ecoulements multiphasiques : développement en cours

Les écoulements de deux phases immiscibles (eau et huile) dans la ZNS (présence constante de gaz à la pression atmosphérique: hypothèse de Richards) pourront être simulés avec TAFFETAS. Cette option permettra aussi un calcul monophasique en ZNS (Equation de Richards).

7.1. ECOULEMENTS DE DEUX PHASES IMMISCIBLES

La solution proposée permet d'étudier les écoulements de deux types de fluides immiscibles en zone non saturée. Les équations introduites permettent de modéliser trois phases non miscibles, dont deux phases liquides et une gazeuse. Les équations sont décrites en Pression-Pression. Les deux phases liquides font l'objet d'une équation d'écoulement complète chacune, mais la phase gazeuse n'est pas prise en compte explicitement.

7.2. ZONE NON SATURÉE (ZNS)

La phase gazeuse, l'air, est supposée de mobilité infinie et est toujours présente dans le milieu. En d'autres termes, la phase gazeuse est continue, et sa vitesse de déplacement est suffisante pour que les différences de pression créées par le déplacement des liquides soient instantanément compensées.

7.3. ECOULEMENTS BIPHASIQUES 1D/2D/3D

La formulation de Galerkin et l'utilisation de la technique des résidus pondérés, permettent l'utilisation d'éléments finis dont les couplages spatiaux (1D/2D/3D) sont similaires à ceux réalisés dans le cas monophasique classique.

La méthode a été validée sur un prototype 1D et partiellement développée en 2D et 3D en 1995.

L'implémentation complète est reportée en 1997.

8. Double porosité

La double porosité ou plutôt double perméabilité est la prise en compte simultanée, dans l'analyse hydrogéologique d'un massif, à la fois des écoulements dans la matrice poreuse que constitue tout matériau géologique et des écoulements dans le réseau des fractures majeures qui affectent ce massif.

- La matrice poreuse a toujours un rôle capacitif fort. De plus, en fonction du contraste de perméabilité entre cette matrice et les fractures qu'elle peut contenir, la matrice peut aussi jouer un rôle important vis-à-vis des écoulements de par sa fonction transmissive.
- Le réseau de fractures a un rôle majeur de par l'importance des transmissivités des différentes fractures ennoyées dans le massif. Son rôle capacitif est bien souvent franchement secondaire devant celui de la matrice.

La notion de double porosité (Warren et Root) a été généralisée pour la première fois en terme de modélisation hydrodynamique par Huyakorn *et al.* (1985) et mainte fois reprise depuis.

L'idée de base en modélisation hydrodynamique, consiste à traiter les deux milieux à porosités différentes comme deux réseaux continus. Ces deux réseaux ne sont liés que par la continuité des pressions (ou des flux d'eau) à leurs interfaces. Il en est de même en terme de transfert de masse, la continuité étant alors celle des flux massiques. Dans chaque réseau, les équations résolues sont, à quelques coefficients près, les mêmes que dans un milieu poreux classique.

C'est pourquoi, la capacité de TAFFETAS à modéliser un site en double porosité ne diminue en rien sa capacité à modéliser un domaine poreux classique, et cela sans alourdir les calculs.

Les paragraphes suivants présentent les méthodes de prise en compte de la double porosité, implémentées dans TAFFETAS. La discrétisation est cependant commune à l'ensemble de celles-ci.

Le milieu poreux est discrétisé en éléments tridimensionnels respectant la géométrie du domaine (ses limites, ses hétérogénéités, ses fractures...). Les fractures présentent dans ce milieu, sont alors discrétisées par un grand nombre de sections planes, elles-mêmes divisées en éléments bidimensionnels. La continuité entre les deux discrétisations est assurée en imposant à tout élément 2D d'être confondu géométriquement avec une face d'un élément 3D.

8.1. HYDRODYNAMIQUE

L'équation de diffusivité est écrite dans les deux réseaux. La continuité des pressions est vérifiée aux noeuds pour la méthode conforme (FEM), et au travers des faces pour la méthode mixte hybride (MHFEM).

8.2. TRANSPORT PAR LA METHODE FEM

L'équation du transport est écrite dans les deux réseaux. Le champ de vitesse résultant du calcul hydrodynamique précédant assure la continuité des débits. Cette remarque vaut pour les trois méthodes de transports (FEM, RW et MOC).

La continuité des flux massiques est vérifiée en imposant l'identité des concentrations aux noeuds pour la méthode FEM, et aux faces pour la méthode MHFEM.

8.3. TRANSPORT PAR LA METHODE RW

La continuité des flux massiques est vérifiée en gérant le mouvement des particules lors des échanges entre les deux réseaux, au travers des parements des fractures.

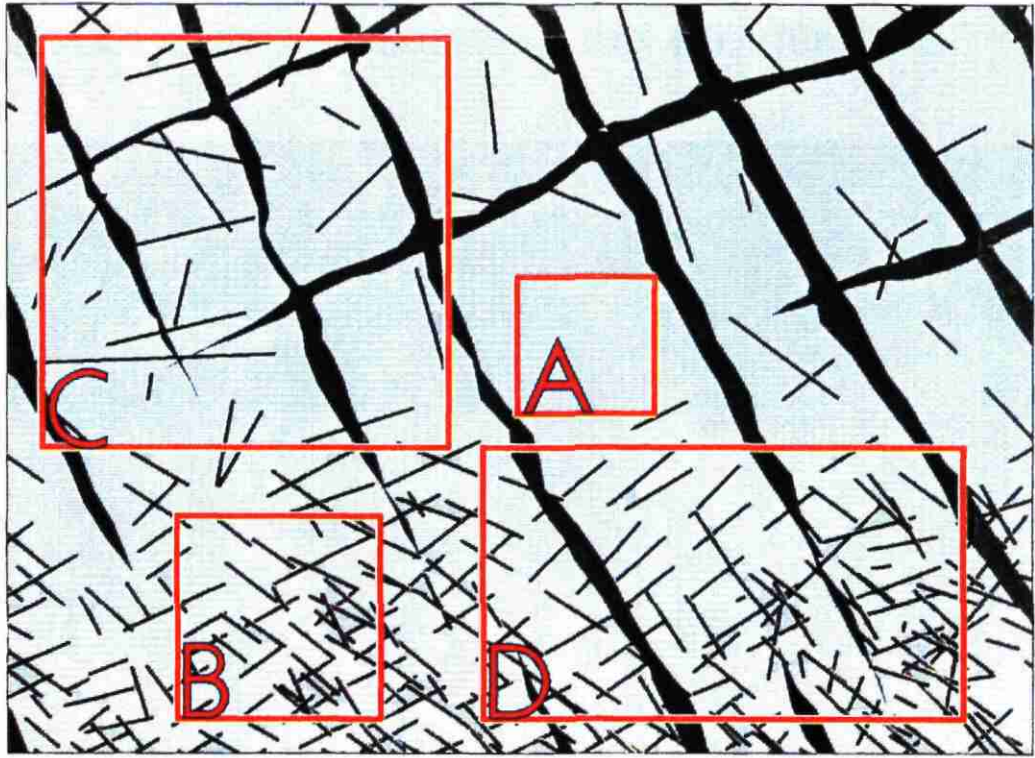
8.4. TRANSPORT PAR LA METHODE MOC

La continuité des flux massiques résulte du fait que la méthode MOC est une combinaison des deux précédentes FEM et RW.

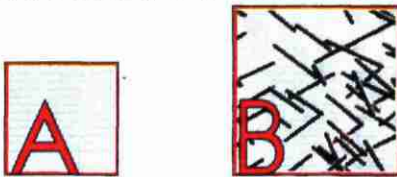
8.5. ECOULEMENTS MULTI-PHASIQUES

Pour un écoulement multi-phasique en domaine à double porosité, nous sommes amenés à considérer une équation de diffusivité par fluide en domaine poreux et une équation de diffusivité par fluide dans la fracture. Les continuités des pressions à l'interface étant alors assurées fluide à fluide.

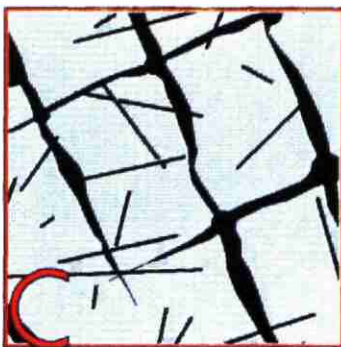
Fig. 1 : Concept de modélisation des écoulements.



- **MATRICE POREUSE**



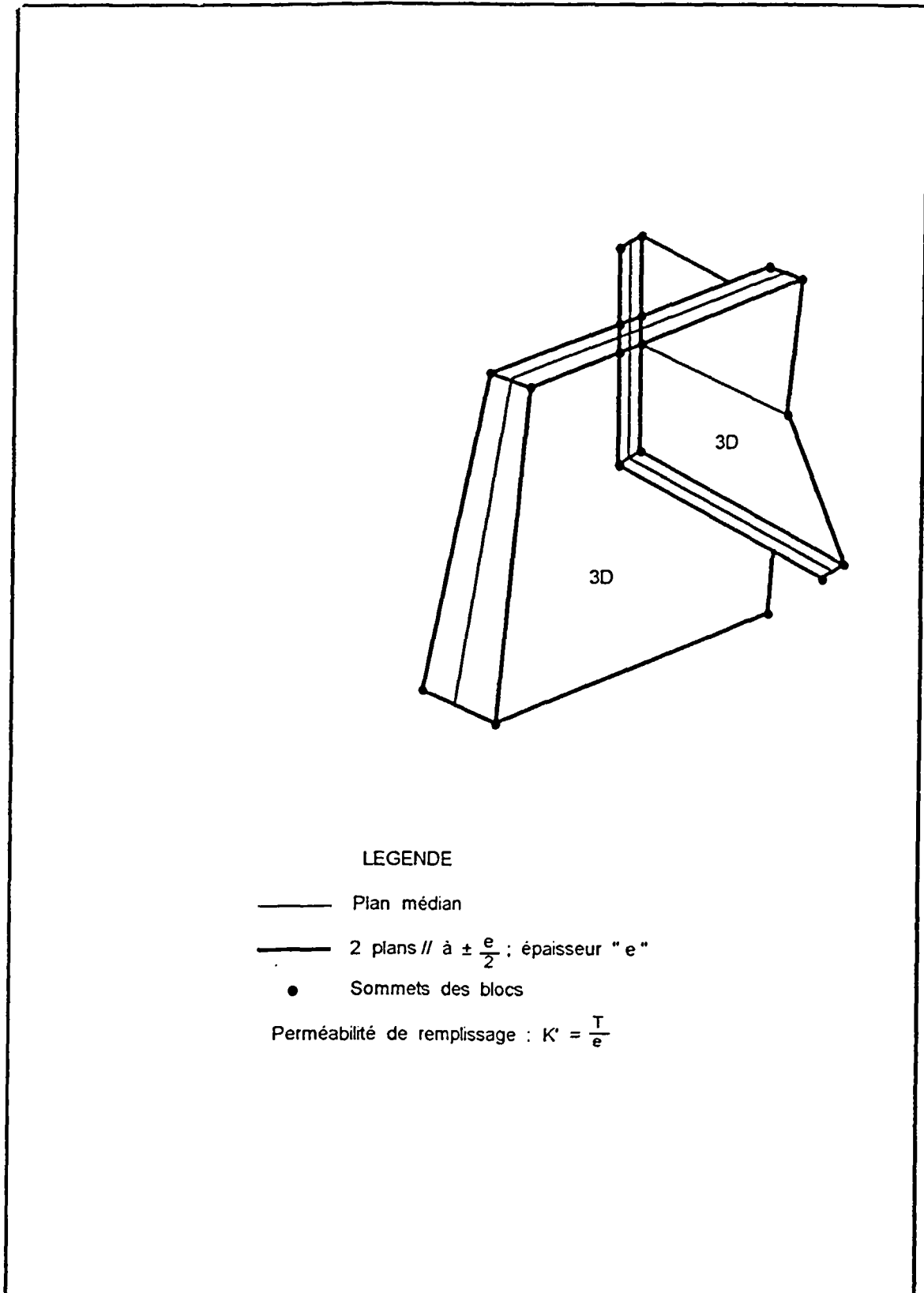
- **RESEAU DISCRET de FRACTURES**



- **DOUBLE POROSITE: MATRICE et FRACTURES**



Fig. 2 - Zones fracturées tridimensionnelles.



VOLUME 2

Processing

- **Pré-processing : construction du modèle**
- **Post-processing : résultats**

Sommaire

1. Le pré-processing : construction des modèles.....	4
1.1. La notion de projet.....	4
1.1.1. La création d'un projet.....	4
1.1.2. La base de fichiers.....	5
1.2. Les paramètres.....	5
1.2.1. Les unités.....	5
1.2.2. Les conditions aux limites.....	6
1.2.3. Les fonctions du temps.....	6
1.2.4. Les chroniques.....	6
1.3. Les objets.....	7
1.3.1. Les rivières	7
1.3.2. Les points fixes.....	7
1.3.3. Les puits	7
1.3.4. Les fractures	7
1.3.5. Les blocs poreux.....	8
1.3.6. Les blocs vides	8
1.3.7. Les points de départ des trajectoires.....	8
1.4. Les mailleurs	8
1.4.1. Maillages 2D type triangles de Delaunay.....	8
1.4.2. Maillages double porosité (très fracturé).....	9
1.4.3. Maillages multicouches.....	9
1.4.4. Maillages 3D axisymétrique.....	9
1.4.5. Maillage par macro-éléments 2D et 3D.....	9
1.4.6. Maillage 3D avec des structures planes 2D.....	10
1.4.7. Maillage 3D type tétraèdres de Delaunay.....	10
1.4.8. Conversion automatique MARTHE/TAFFETAS	10

2. Le post-processing :les résultats.....	11
2.1. Post-processing avec la clique ef d'unigrid.....	11
2.1.1. Les maillages : clique Mosaïque (MO)	11
2.1.2. Les cartes d'isovaleurs : cliques Iso-Surfaces et Iso-Lignes (IS et IL)	12
2.1.3. Les trajectoires : clique Habillage (HA).....	12
2.1.4. Les vecteurs vitesses : clique Vitesse (VT).....	12
2.1.5. Les chroniques nodales.....	12
2.2. Les utilitaires de TAFFETAS.....	13
2.2.1. Extractions à postériori d'historiques.....	13
2.2.2. La recherche de proximité (noeud ou point quelconque)	13
2.2.3. Coupe 2D dans un 3D	13
2.2.4. Coupe 1D dans un 2D	13
2.2.5. Opérations sur les champs (+;-;*;/; min ; max ; masques...)	13
2.2.6. Interpolations sur semis.....	14
2.2.7. Interpolations sur maillage éléments finis.....	14
2.3. Aide en ligne dans TAFFETAS	14
2.3.1. Aide en ligne pour toutes les options des menus déroulants	14
2.3.2. Aide à la construction d'un modèle : base de fichiers	14
2.3.3. Accès système	15

1. Le pré-processing : construction des modèles

1.1. LA NOTION DE PROJET

Le pré-processeur de TAFFETAS repose sur la notion de projet. Un projet doit être construit dans un répertoire dédié uniquement à celui-ci.

Un projet est constitué:

- d'un fichier de définition de projet PROJET.NOM ;
- d'un ensemble de fichiers contenant l'ensemble des données et des résultats des simulations, fichiers décrits dans une base de fichiers, et présentant tous le même nom générique de projet: Les extensions des noms des fichiers sont codifiées pour identifier le rôle de chaque fichier dans la bases de fichiers ;
- la clique PROJET donne accès:
 - . à la modification d'un PROJET EXISTANT,
 - . à la création d'un NOUVEAU PROJET,
 - . à la consultation de la BASE DE FICHIER.

1.1.1. La création d'un projet

La création d'un projet permet de définir :

- Le nom générique de celui-ci.
- Le nombre de composants transportés.
- Le type de couplage.
- L'utilisation de l'option transfert de chaleur.
- L'utilisation de l'option maillage adaptatif en écoulement.
- L'utilisation de l'option maillage adaptatif en transferts.
- Le nombre de niveaux de raffinement en écoulement.
- Le nombre de niveaux de raffinement en transport.
- Le lissage initial (technique de Laplace) d'un maillage 2D.
- Le nombre de sorties graphiques.
- Les pas de temps avec sorties graphiques.

```

T A F F E T A S
*** T A F F E T A S ***
software BRGM/DR/HY

```

```

: PROJET : PREPARER :: MODIFIER :: CALCULER :: VOIR :: RETOUR :

```

```

PROJET EXISTANT
NOUVEAU PROJET
BASE DE FICHIER
A PROPOS DE ...
RETOUR au menu precedent
ACCES AU SYSTEME

```

```

===== HELP =====
: Si vous desirez creer un nouveau projet, ou choisir de travailler sur
: un projet differant du projet actif, cette clique vous permettra de
: preparer un nouveau fichier PROJET.NOM
:===== RETURN pour revenir au menu=====

```

1.1.2. La base de fichiers

La base de fichier définit l'ensemble des fichiers du projet, en indiquant sa présence (existence du fichier) dans le répertoire de travail (répertoire courant).

1.2. LES PARAMETRES

La préparation d'un modèle se fait à l'aide de la clique PREPARER qui donne accès :

- à la gestion des UNITES UTILISATEURS (unités des débits, unités du temps, unités des distances, unités des concentrations, des infiltrations ...) ;
- à la gestion des CONDITIONS aux LIMITES (charges ou pressions imposées, débits imposés, infiltration, ...) ;
- à la définition d'ENREGISTREMENTS CHRONOLOGIQUES (ou chroniques) de tous paramètre du modèle au cours d'une simulation transitoire ;
- à la GESTION des différents OBJETS (rivières, puits 2D ou 3D, fractures 2D ou 3D, blocs poreux ...) ;
- à la CREATION du MODELE: MAILLAGES (maillage 2D, double porosité 1D/2D, multicouches, axisymétrique, 3D, double porosité 2D/3D, ...).

1.2.1. Les unités

Les unités utilisateur sont précisées non pas pour limiter le choix possible de celles-ci (tout étant permis, puisque les calculs sont réalisés en S.I.) mais pour éviter autant que possible des incompatibilités lors de l'introduction des données.

T A F F E T A S		software BRGM/DR/HYT.	
CHOIX DES UNITES UTILISATEUR			
*** UNITE DES DEBITS ***			
m3/s	m3/h	m3/j	l /s .. l /h .. l /j
*** UNITE DES TEMPS ***			
seconde	minute	heure	jour .. mois (30) .. annee
*** UNITE DES DISTANCES ***			
Km	m	cm	
* UNITE DES CONCENTRATIONS *			
Kg/m3	g/m3	mg/m3	g/l .. mg/l .. mg/cm3
* UNITE DES INFILTRATIONS *			
mm/an*m2	cm/an*m2	mm/mois*m2	mm/j*m2 .. m3/s

1.2.2. Les conditions aux limites

La définition d'une condition sur une limite peut être :

- sur un (ou plusieurs) noeud(s) d'un élément,
- sur une (ou plusieurs) arête(s) d'un élément,
- sur une (ou plusieurs) face(s) d'un élément,
- sur tout ou partie d'un plan contenant plusieurs faces de plusieurs éléments,
- dans le volume d'un élément,
- dans un volume parallélépipédique quelconque, sur tous les noeuds qu'il contient, ou tous les éléments 2D ou 3D qu'il contient, etc.

1.2.3. Les fonctions du temps

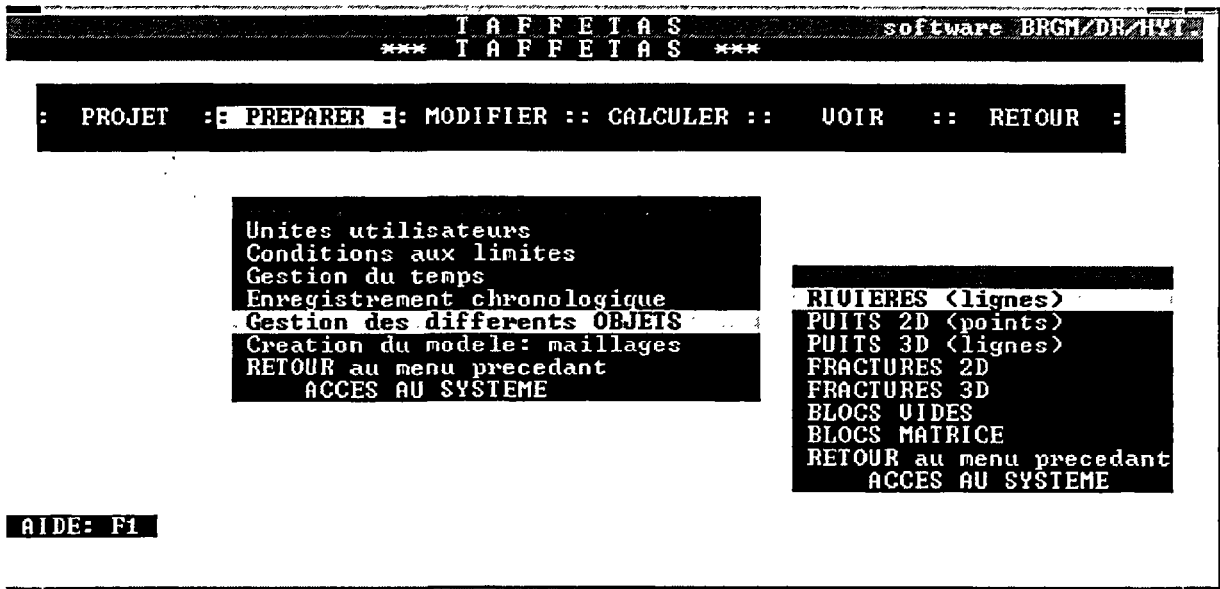
La logique de ROCKFLOW est entièrement respectée dans TAFFETAS: toute condition est imposée via une fonction du temps et donc varie comme celle-ci au cours des pas de temps de la simulation.

1.2.4. Les chroniques

La demande d'un enregistrement chronologique (ou chronique) peut être faite pour toute inconnue ou variable de la simulation.

1.3. LES OBJETS

Pour faciliter la création et la modification de modèles complexes, TAFFETAS utilise un certain nombre d'objets élémentaires définis à l'aide de la norme (dessin) graphique vecteur du BRGM.



1.3.1. Les rivières

Les rivières sont des objets de type B : lignes brisées $n^*(X,Y,Z)$.

1.3.2. Les points fixes

Les points fixes sont des objets de type A: points (X,Y,Z) .

1.3.3. Les puits

Les puits sont, en 2D des points fixes de type A (X,Y,Z,Q) et en 3D des lignes brisées de type B $n^*(X,Y,Z,Q)$.

1.3.4. Les fractures

Les fractures 2D sont en 3D, des polygones plans fermés de type C constitués de n points (X,Y,Z) , et affectés de propriétés physiques dans le fichier .FRA. Les fractures 1D sont en 2D des polygones constituées de n points (X,Y) et affectés de propriétés physiques dans le fichier .FRA.

1.3.5. Les blocs poreux

Les blocs poreux sont des polygones fermés en 2D (objet de type C) et des volumes polygonaux en 3D définis par une liste de surfaces planes qui le délimitent (liste d'objet de type C). Les blocs poreux sont affectés de propriétés physiques dans le fichier .BLO.

1.3.6. Les blocs vides

Les blocs vides sont définis comme des blocs poreux sans propriétés physiques (fichier .BLV).

1.3.7. Les points de départ des trajectoires

Les points de départ des trajectoires sont définis par 4 coordonnées (X,Y,Z,T) où T est le temps de départ (Cette liste de points est un objet de type B). Un point de départ d'une trajectoire peut aussi être défini à l'aide du numéro d'un élément et des coordonnées locales du point (coordonnées dans l'élément de référence).

1.4. LES MAILLEURS

La génération d'un maillage est en éléments finis un travail de première importance compte tenu de la grande souplesse qu'apporte l'utilisation d'éléments géométriquement déformables à volonté. Par défaut il est cependant toujours possible de construire des maillages réguliers en repère cartésiens du type maillage écossais, mais ceux-ci sont très rarement adaptés aux problèmes réels.

1.4.1. Maillages 2D type triangles de Delaunay

La technique de triangulation la plus efficace pour construire des maillages éléments finis est celle proposée par Delaunay (TANIGUCHI 1989). Le mailleur 2D Delaunay permet de prendre en compte toute géométrie 2D aussi complexe soit elle (réseau hydrographique, zones d'hétérogénéités complexes, fractures 1D, ...).

```

*** T A P F F E T A S *** software BRGM/DR/HYT.

```

```

: PROJET :- PREPARER -: MODIFIER :: CALCULER :: VOIR :: RETOUR :

```

```

Unites utilisateurs
Conditions aux limites
Gestion du temps
Enregistrement chronologique
Gestion des differents OBJETS
Creation du modele: maillages
RETOUR au menu precedant
ACCES AU SYSTEME

```

```

2D: Delaunay
Double porosite 2D
Multi-couches
3D: Axisymetrique
Macro-elements 2D3D
3D Matri./2D frac.
3D: Delaunay
Marthe/Taffetas
RETOUR au menu precedant
ACCES AU SYSTEME

```

AIDE: F1

1.4.2. Maillages double porosité (très fracturé)

Pour tenir compte d'un réseau dense de fractures dans un milieu poreux en 2D, un mailleur automatique double porosité 1D/2D a été développé en 1994 pour TAFFETAS.

1.4.3. Maillages multicouches

Partant d'un modèle 2D (2D plan, ou 2D avec Z variables, ou 3D monocouche), le mailleur multicouche permet de générer un modèle 3D composé de plusieurs couches d'éléments 3D superposées (couches de tout type : aquifère ou aquitard).

1.4.4. Maillages 3D axisymétrique

Pour la modélisation d'un puits vertical, la prise en compte de plusieurs couches hétérogènes, d'une ou de plusieurs fractures horizontales, et d'un effet de skin, peut se faire sans le recours à un modèle 3D étendu, grâce à l'utilisation d'un mailleur spécifique axisymétrique.

1.4.5. Maillage par macro-éléments 2D et 3D

L'utilisation de quelques (macro-) éléments de formes quelconques, que l'on peut subdiviser à volonté (de manière régulière ou non) est très utile pour des modèles présentant une géométrie "mécanique" comme c'est le cas à proximité des ouvrages

souterrains. Le mailleur par macro-élément est disponible en 2D et en 3D (Menjoz, 1992).

1.4.6. Maillage 3D avec des structures planes 2D

Pour la génération automatique des maillage, la généralisation du concept de double porosité en 2D/3D est proposée par TANIGUCHI et FILLION (1995).

1.4.7. Maillage 3D type tétraèdres de Delaunay

La triangulation de Delaunay (2D) est étendue en 3D (tétraèdrisation). Elle permet de traiter des problèmes de géométries tridimensionnelles complexes.

1.4.8. Conversion automatique MARTHE/TAFFETAS

Le module de transfert automatique MARTHE - ROCKFLOW (Noyer, Martin et Fillion, 1994) est maintenant utilisable pour TAFFETAS.

2. Le post-processing :les résultats

L'essentiel du POST-PROCESSING de TAFFETAS est réalisé avec le processeur déjà présenté dans le chapitre précédant. Cependant, pour la visualisation graphique des données spatialisées (en 2D ou en 3D), on utilisera systématiquement la clique EF du logiciel UNIGRID (BRGM).

2.1. POST-PROCESSING AVEC LA CLIQUE EF D'UNIGRID

La clique EF du logiciel UNIGRID permet la lecture directe d'un maillage élément fini 2D contenu dans deux fichiers :

- un fichier des noeuds du domaine, contenant les coordonnées X Y (Z) de chaque noeud suivies des valeurs des variables nodales (charge H, débits Q, concentrations C_i , température T etc.) ;
- un fichier des éléments contenant la table de connectivité pour définir les noeuds constituant chaque élément (N1,N2,N3,N4...) suivies des valeurs des variables élémentaires (perméabilité, porosité, emmagasinement ...).

Chaque fichier commence par une ligne titre :

- le fichier des noeuds contient ensuite autant de lignes que le modèle de noeuds ;
- le fichier des éléments contient ensuite autant de lignes que le modèle d'éléments.

2.1.1. Les maillages : clique MOSAIQUE (MO)

a) Dessin d'un maillage

Le choix de la clique mosaïque permet de dessiner un maillage en utilisant la couleur 0 pour le fond, indifféremment pour toutes les isovaleurs.

b) Mosaïque des paramètres élémentaires

Le même maillage peut être représenté en figurant avec une mosaïque un champ de perméabilité, de porosité, de coefficients d'emmagasinement, ou de flux élémentaires transitants etc.

2.1.2. Les cartes d'isovaleurs : cliques Iso-Surfaces et Iso-Lignes (IS et IL)

a) Isovaleurs des charges, des pressions, des concentrations, des températures, des viscosités, des densités, etc.

La clique IS (iso-surface) ou la clique IL (iso-ligne) permettent de dessiner des isovaleurs pour tous les champs nodaux (enregistrés sur demande par l'utilisateur: choix des variables et choix des pas de temps).

b) Superpositions de cartes : isosurfaces et isovaleurs

Deux cartes peuvent être superposées en utilisant d'abord une IS puis une IL. N cartes peuvent être superposées en utilisant N fois la clique IL.

2.1.3. Les trajectoires : clique habillage (HA)

Les trajectoires calculées par TAFFETAS (fichier ".LIN" comme lignes) sont des lignes de points (X,Y,Z,Temps) représentant chaque position (dans chaque tronçon pour chaque trajectoire) et sont lisibles directement en fichier habillage (norme DESSIN du BRGM).

2.1.4. Les vecteurs vitesses : clique vitesse (VT)

Les vecteurs vitesses (V_x, V_y, V_z) sont calculés aux centres (X,Y,Z) de tous les éléments du modèle (et ceci quelle que soit la méthode de calcul hydrodynamique utilisée dans TAFFETAS) puis sont écrits dans un fichier (".FLE" comme flèches) directement lisible par la clique VT d'UNIGRID.

2.1.5. Les chroniques nodales

Toutes les évolutions de chaque variable du modèle peuvent être suivies et enregistrées au cours du temps lors des simulations avec TAFFETAS. Pour ce faire, l'utilisateur définit en début de simulation, dans le fichier projet, les "historiques" qu'il désire produire. Ceux-ci sont stockés en fin de simulation sous forme de liste séquentielle de doublets (Temps, Valeurs).

2.2. LES UTILITAIRES DE TAFFETAS

2.2.1. Extractions à postériori d'historiques

L'extraction à postériori d'historiques permet de recréer la chronique en un point donné (noeud du maillage) pour une ou plusieurs grandeurs calculées (charge, pression, concentrations, température...). Cette extraction est réalisée dans les fichiers résultats qui stockent un certain nombre de données sur tout ou partie du maillage (ensemble des noeuds) pour certains pas de temps spécifiés à priori par l'utilisateur. L'extraction n'est dès lors possible que pour ces seuls pas de temps.

2.2.2. La recherche de proximité (noeud ou point quelconque)

Dans la pratique, la position d'un noeud du maillage peut parfois ne pas coïncider exactement avec un point d'observation (ceci est cependant à éviter). Un simple calcul des distances entre le point d'observation et tous les noeuds du maillage permet d'identifier le où les noeuds les plus proches de ce point.

2.2.3. Coupe 2D dans un 3D

Les outils de visualisation actuels ne permettent pas la représentation 3D d'un champ scalaire sur un maillage irrégulier (type éléments finis). La représentation des résultats se fait donc via des coupes planes dans le domaine 3D. Les plans de coupes sont soit en $X = \text{constante}$, soit en $Y = \text{constante}$ soit en $Z = \text{constante}$, soit quelconques. Lorsqu'un plan quelconque doit être utilisé, il est alors défini comme tout plan dans TAFFETAS (cf. définition des plans de fractures).

2.2.4. Coupe 1D dans un 2D

Une coupe (monodimensionnelle) suivant un axe quelconque peut être réalisée dans tout maillage 2D.

2.2.5. Opérations sur les champs (+ ; - ; * ; / ; min ; max ; masques...)

Un champ est l'ensemble des valeurs prises par une grandeur scalaire sur tous les noeuds du modèle.

2.2.6. Interpolations sur semis

A partir des valeurs d'un champ scalaire défini sur un modèle 2D aux éléments finis, l'interpolation sur un semis de même extension est automatiquement réalisée à l'aide de cette option.

2.2.7. Interpolations sur maillage éléments finis

Fonction réciproque de la précédente (mais celle-ci existe en 3D).

2.3. AIDE EN LIGNE DANS TAFFETAS

```

===== T A F F E T A S ===== software BRGM/DR/HYT
*** T A F P E T A S ***

: PROJET : PREPARER :: MODIFIER :: CALCULER :: VOIR :: RETOUR :

PROJET EXISTANT
NOUVEAU PROJET
BASE DE FICHIER
a PROPOS DE ...
RETOUR au menu precedent
ACCES AU SYSTEME

===== HELP =====
: Cette clique vous donne acces a la liste des fichiers de la :
: " BASE de FICHIERS " utilisee au cours de ce projet :
: Pour chaque fichier: presence ou absence du fichier, role du fichier :
:===== RETURN pour revenir au menu=====
    
```

2.3.1. Aide en ligne pour toutes les options des menus déroulants

Dans tout le pré-post-processeur de TAFFETAS, TOUTES LES OPTIONS disposent d'une AIDE en LIGNE, précisant au moins la fonctionnalité accessible par cette option (options de tous les menus déroulants : Menu horizontal principal et menus verticaux en cascades).

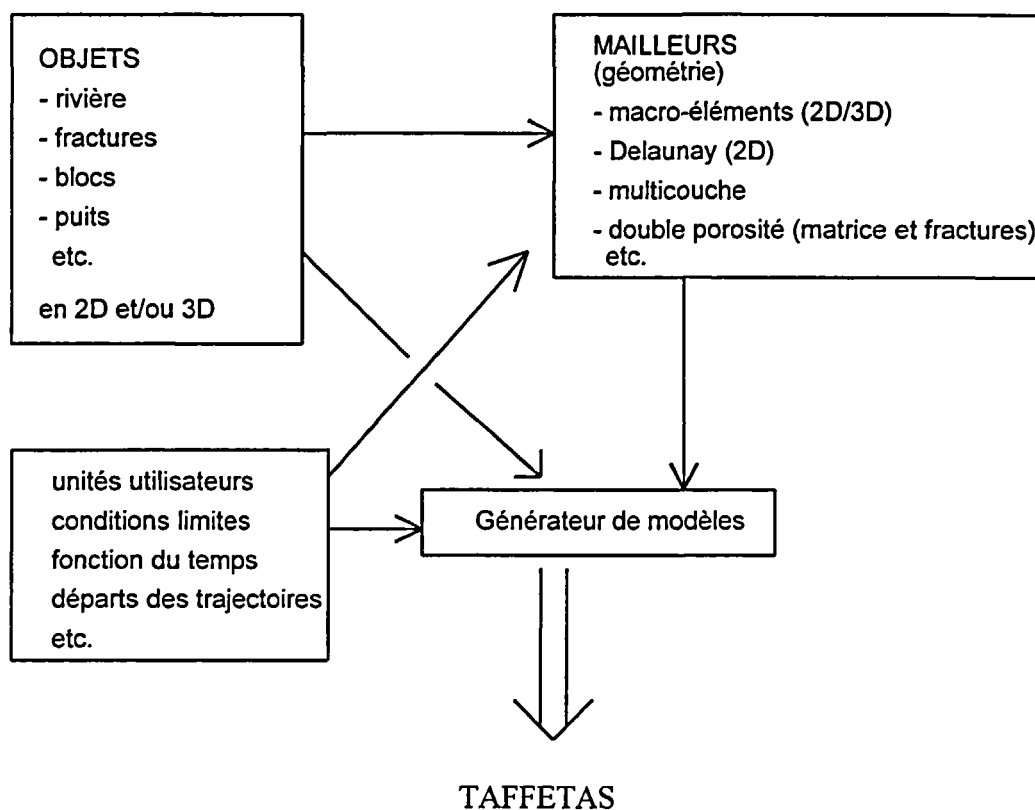
2.3.2. Aide à la construction d'un modèle : base de fichiers

L'utilisateur doit se servir de la base de fichiers comme d'un outil d'aide à la construction d'un modèle, c'est-à-dire à la fois comme d'un pense-bête pour identifier les opérations non encore effectuées (fichiers absents) lors de la création du modèle, mais aussi comme d'un garde-fou lors des modifications successives de celui-ci.

2.3.3. Accès système

L'utilisateur peut à tout moment retourner travailler temporairement sous le système d'exploitation sans quitter TAFFETAS (ceci permet de renommer des fichiers, de les déplacer, de structurer son arborescence de répertoires etc.).

Préprocessing de TAFFETAS (préparation d'un modèle)



- maillage auto-adaptatif
- calage de paramètres

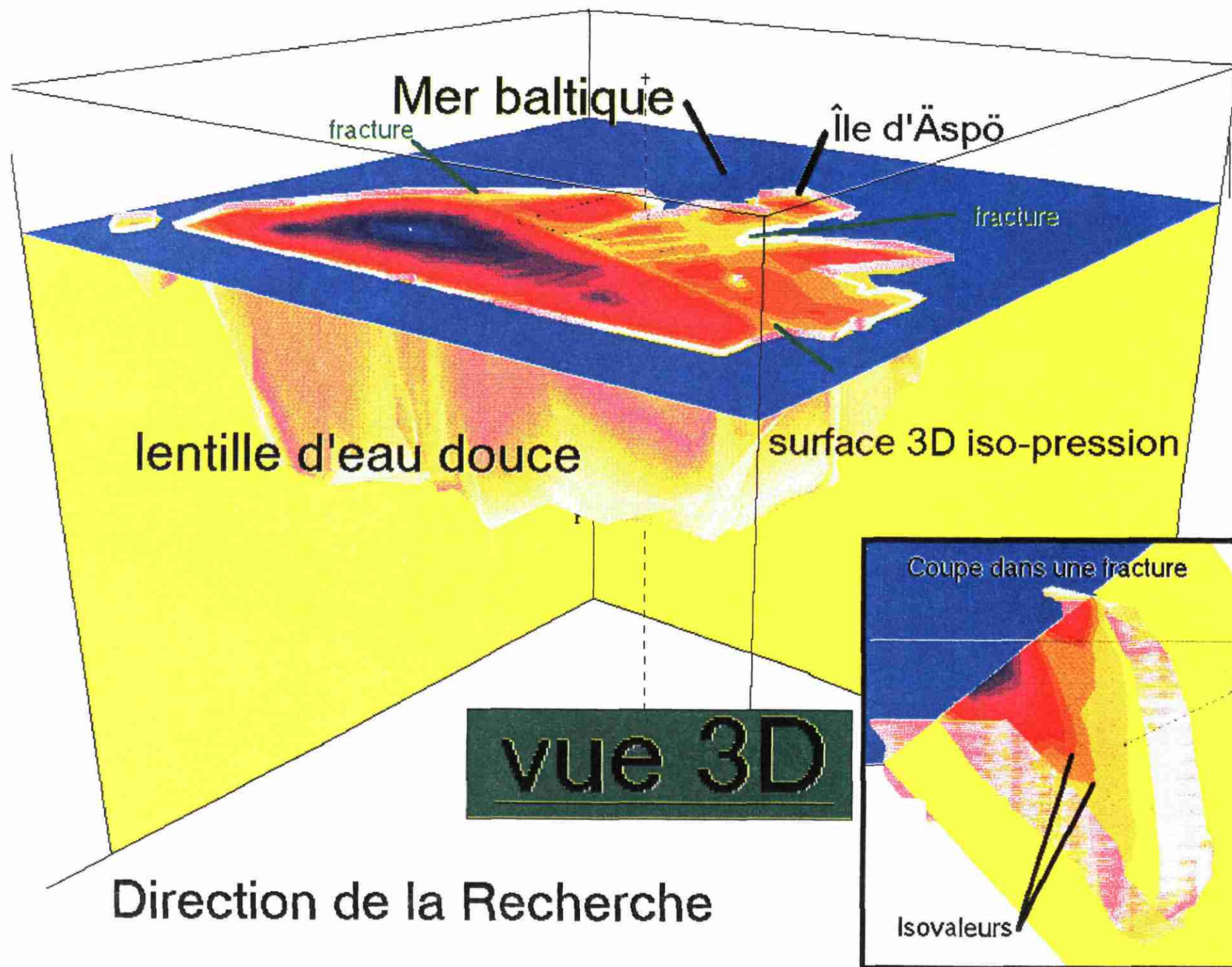
Post-Procasseur POST-TAFF développé en C + + avec la bibliothèque "phigure"

Les possibilités de visualisation 3D de résultats d'un modèle réalisé avec TAFFETAS sont :

- choix du modèle à visualiser,
- enveloppe du maillage éléments finis : maillage hexaédrique non structuré,
- parallélépipède du domaine,
- isosurfaces 3D (pleines ou filets de pêcheurs), simples ou multiples,
- deux plans de coupe, dont un fixe et un mobile (angle PHI, angle THETA, distance au centre) avec repères (actifs ou non),
- tracés des isolignes dans les deux plans et dessin d'une légende des couleurs des isolignes et isosurfaces,
- animation temporelle et/ou spatiale, sans réduction de l'interactivité,
- zooms et centrages interactifs,
- sortie Postscript et Drivers Windows.

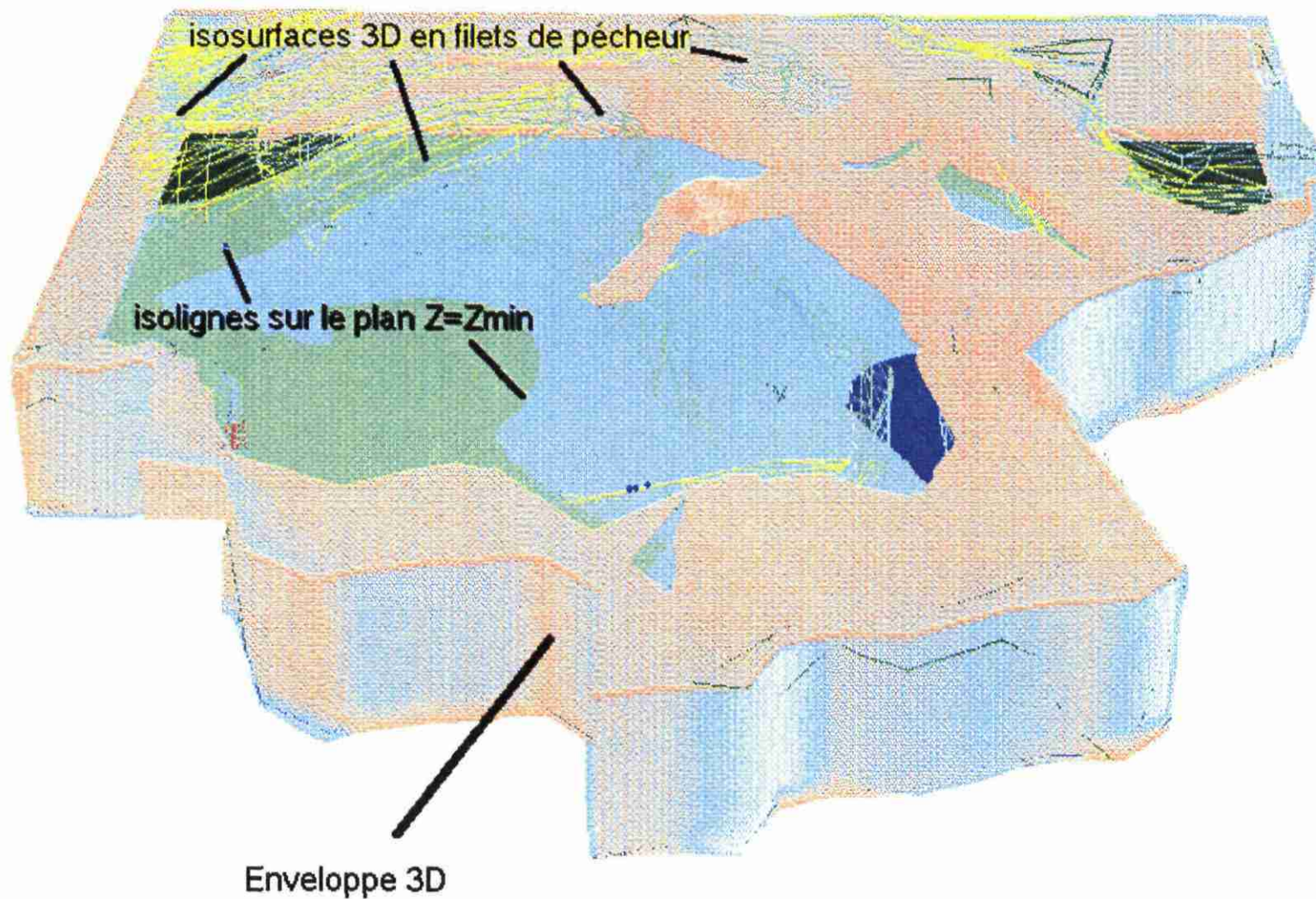
L'ensemble des possibilités sont interactives et gérées dans des fenêtres Windows 95, directement à la souris, sans arrêter les tracés 3D.

Les 4 figures suivantes illustrent quelques sorties avec POST-TAFF.



vue 3D

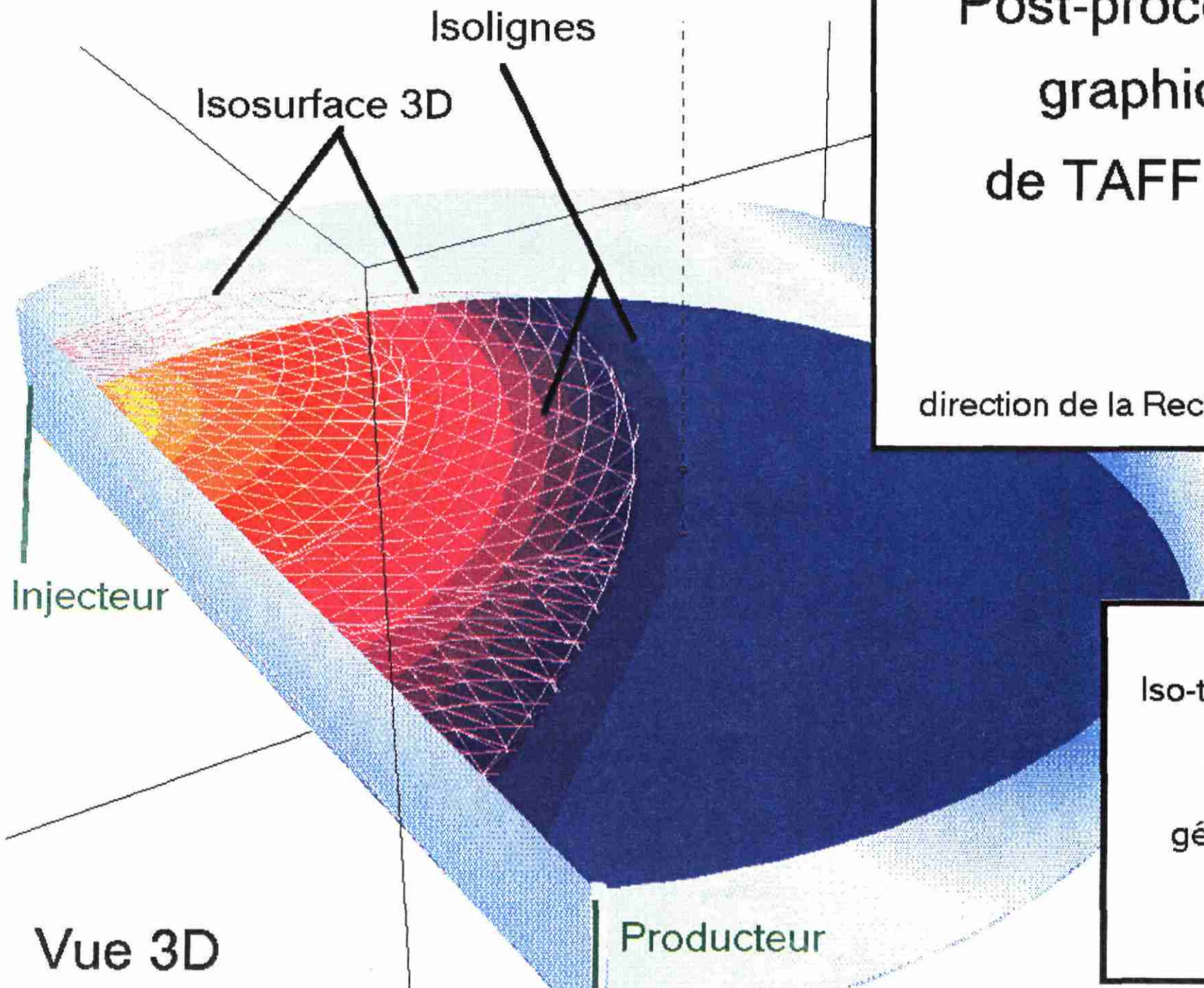
Modèle avec 8 couches d'éléments (1100 m de profondeur)
(avec 3294 noeuds)



Direction de la Recherche: TAFFETAS 1996

Post-processeur graphique de TAFFETAS

direction de la Recherche



Iso-températures
dans un
doublet
géothermique
stratifié

VOLUME 3

Données de modélisation

- **Les formats de données de modélisation**
- **La base de données dans TAFFETAS**
- **Informations sur l'implantation de TAFFETAS**
- **Bibliographie thématique**

Sommaire

1. Les formats des données de modélisation.....	4
1.1. Données du fichier PROJET.NOM	4
1.2. Données hydrodynamiques.....	10
1.2.1. Gestion des pas de temps.....	15
1.2.2. Géométrie des maillages.....	17
1.2.3. Fonctions du temps et conditions aux limites.....	18
1.2.4. Paramètres hydrodynamiques élémentaires.....	23
1.2.5. Définition des trajectoires : Points de départ.....	42
1.3. Données de transport de masse ou de chaleur	44
1.3.1. Transport d'un soluté : Formats des données (fichier.TMX)	44
1.3.2. Transport de plusieurs solutés	58
1.3.3. Transport de chaleur	59
1.4. Fichiers supplémentaires pour le couplage transport-géochimie.....	59
2. Convergence des différents solveurs disponibles dans TAFFETAS.....	61
3. Informations sur l'implémentation de TAFFETAS	62
3.1. Structure du programme	62
3.2. FORTRAN 90	62
3.3. Code des champs	63
3.4. Contenus des librairies	64
3.5. Organisation des tableaux dans TAFFETAS.....	72
3.6. La base de données dans TAFFETAS	75

4. Bibliographie thématique	76
4.1. Bibliographie concernant ROCKFLOW	76
4.2. Bibliographie concernant la méthode M.H.F.E.M.	77
4.3. Bibliographie concernant la méthode F.E.M. en transport.....	77
4.4. Bibliographie concernant la méthode R.W.....	78
4.5. Bibliographie concernant la méthode M.O.C.....	78
4.6. Bibliographie concernant le transport multicomposant.....	79
4.7. Bibliographie concernant l'écoulement d'un fluide à densité variable	79
4.8. Bibliographie concernant le couplage externe implicite	80
4.9. Bibliographie concernant la thermique.....	80
4.10. Bibliographie concernant les maillages adaptatifs	80
4.11. Bibliographie concernant le couplage chimique	81
4.12. Bibliographie concernant le multiphasique	82
4.13. Bibliographie concernant la double porosité	82
4.14. Bibliographie concernant des solutions analytiques en transport.....	82
4.15. Bibliographie concernant les méthodes de résolution	83
4.16. Bibliographie concernant le post-processing.....	83

1. Les formats des données de modélisation

1.1. DONNEES DU FICHIER PROJET.NOM

Les données contenues dans le fichier PROJET.NOM, définissent le type de simulations à réaliser dans le cadre du projet en cours. Les différents fichiers de ce projet sont présents dans le sous-répertoire courant. L'exécution de TAFFETAS et de son pré/post-processeur PROCTAFF permet de préparer puis de réaliser les simulations dont les paramètres "de base" sont définis dans PROJET.NOM.

Ligne principale

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	3 - 10	FILE_NAME	nom générique du modèle : 8 caractères obligatoirement
(2)	11 - 15	I1	choix du type de couplage 0 : pas de densité variable ni de viscosité variable (valeur par défaut : 0) 1 : couplage implicite complet (T et C_i) : densité et viscosité fonction de T et C_i 2 : couplage implicite thermique (T) seulement : densité et viscosité fonction de T seulement 3 : couplage implicite salin (C_i) seulement : densité et viscosité fonction de C_i seulement
(3)	16 - 20	I2	nombre de composants chimiques transportés < 9
(4)	21 - 25	I3	nombre maximum de pas d'adaptation automatique du maillage en hydrodynamique < 9
(5)	26 - 30	I4	nombre maximum de pas d'adaptation automatique du maillage en transport < 9
(6)	31 - 35	I5	avec (1) ou sans (0) transport de chaleur (.TMT)
(7)	36 - 40	I6	avec (1) ou sans (0) lissage du maillage en 2D
(8)	41 - 45	I7	nombre total de pas d'adaptation du maillage avant de revenir au maillage grossier initial < 99
(9)	46 - 50	I8	nombre de sorties cartographiques < 26
(10)	51 - 55	I9	avec (1) ou sans (0) fichier des historiques (.HIS)

Remarque :

- (1) Le nom générique du modèle, ou nom du problème, est le même pour tous les fichiers de données. Seule l'extension du nom de chaque fichier permet de les différencier.
- (2) Le couplage densitaire et visqueux se fait à la fois sur la température (T) et sur les concentrations (C_i) des composants chimiques transportés (salinités et autres). La viscosité μ est une fonction de T et C noté $\mu(C,T)$ et la densité ρ est une fonction de T et C noté $\rho(C,T,P)$.
- (3) Le nombre de composants chimiques transportés n'inclut pas la chaleur (transport thermique défini si $I5=1$ et si il existe un fichier .TMT).
- (4) Spécifique des simulations avec maillages adaptatifs.
- (5) Spécifique des simulations avec maillages adaptatifs.
- (6) Le fichier des données thermiques (.TMT) n'est lu que si $I5 = 1$.
- (7) Spécifique des simulations avec maillages adaptatifs en 2D.
- (8) Spécifique des simulations avec maillages adaptatifs.
- (9) Si $I8 > 0$, alors lecture de la ligne suivante dans le fichier PROJET.NOM (qui contient au maximum les 26 pas de temps pour les sorties cartographiques).
- (10) Si $I9 = 0$ alors le fichier des historiques .HIS ne sera pas lu.

Ligne des pas de temps pour les sorties cartographiques

Cette ligne est absente si $I8 = 0$ et s'il n'y a pas de paramètres complémentaires.

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
pour lesquels	1 - 3	IPGRAF(1)	liste des numéros des pas de temps (maximum 26) TAFETAS doit produire des fichiers cartographiques.
	4 - 6	IPGRAF(2)	
	etc...	IPGRAF(...)	
	76 - 78	IPGRAF(26)	

Ligne des paramètres complémentaires

Si cette ligne est absente, les valeurs par défaut sont :

$I_ADAP_ITER = 0$
 $IPART = 0$
 $N_MAX_ITER = 100$
 $I_EPSI = 2$ donc la précision $EPSI_ALL = 10^{-2}$

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
	1 - 5	IPART	Méthode de transport avec (1) ou sans (0) particules
	6 - 10	I_ADAP_ITER	type de méthode d'adaptation automatique du maillage 0 : méthode directe 1 : méthode itérative : pas pair / pas impair.

- 11 - 15 N_MAX_ITER définit le nombre maximum d'itérations pour chaque pas de temps, dans un couplage (densité, viscosité). Si N_MAX_ITER = 0 ou 1, alors le calcul est séquentiel
- 16 - 20 I_EPSI > 1 et < 9 : puissance du critère de précision pour un couplage : EPSI_ALL = 10**(-I_EPSI)

Ligne des variables par défaut

Si cette ligne est absente, les valeurs par défaut sont DEFTEM = 20 °C et DEFCON(i) = 0.D0

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
	1 - 10	DEFTEM	température par défaut
	11 - 20	DEFCON(1)	concentration par défaut : premier composant chimique
	21 - 30	DEFCON(2)	concentration par défaut : deuxième composant.
	etc...		
	71 - 80	DEFCON(7)	concentration par défaut : septième composant. de plus DEFCON(8) = DEFCON(9) = DEFCON(7)

Les 2 lignes précédentes doivent être validées si on veut faire un calcul de transport avec géochimie par couplage explicite ainsi que défini au § 3.3. du volume 1.

2 lignes complémentaires pour la géochimie

1ère ligne

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 5	ICAL_CHM	calculs chimiques (0 non, 1 oui)
(2)	6 - 10	ISPE_CHM	spéciation initiale
(3)	11 - 15	ICINE_CHM	calcul avec cinétique (0 non, 1 oui)
(4)	16-20	IMET_CHM	méthode de calcul (0 NEPTUNIX, > 0 analytique)
(5)	21 - 25	NES_CHM	nombre d'espèces chimiques de la phase solide
(6)	26 - 30	NESRES_CHM	nombre d'informations en sortie
(7)	31 - 35	ISOLEC_CHM	mode de lecture des espèces solides (0 par groupe, 1 par élément)

Remarques :

(1) Si le calcul chimique est demandé (ICAL_CHM=1), le code va tester la présence dans le répertoire de travail des 3 fichiers d'extensions NTX, PCH, SCS nécessaires aux calculs (cf § 1.1 vol. 3) et émettre un message d'erreur s'ils ne sont pas trouvés. Il vérifie aussi que le paramètre I2 (nombre de composants chimiques transportés) est > 0.

(2) La spéciation initiale (calcul des espèces chimiques en phases liquide et solide à partir des concentrations initiales en éléments en phase liquide et en espèces en phase solide) peut être effectuée.

On aura :

ISPE_CHM = 0	pas de spéciation initiale
ISPE_CHM = 9999	spéciation calculée dans tous les éléments
ISPE_CHM = N	spéciation calculée dans l'élément N et reportée dans tous les éléments (si compositions initiales uniformes).

(3) Si ICINE_CHM = 1, les calculs chimiques font intervenir une cinétique, sinon ils sont effectués à l'équilibre.

(4) Ce paramètre définit la méthode utilisée pour les calculs chimiques :

IMET_CHM = 0	simulateur généré par NEPTUNIX
IMET_CHM = 1	solution analytique "CXTFIT"
IMET_CHM = 0	solution analytique de la silice (cf exemples, volume 4, § 6).

(5) Nombre d'espèces chimiques de la phase immobile (solide, eau liée, précipités..) qui réagissent avec les éléments en solution mais ne sont pas transportées.

(6) Nombre d'"informations" que le modèle chimique calcule et restitue pour édition ; il s'agit d'espèces calculées ou de quantités dérivées (par ex. le pH).

(7) Ce drapeau définit le mode de stockage des concentrations initiales en espèces solides dans le fichier d'extension SCS (cf § 1.4 vol. 3) :

ISOLEC_CHM = 0	lecture par groupe d'éléments
ISOLEC_CHM = 1	lecture par élément.

2ème ligne

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	UVOL_CHM	pour transformer les concentrations lues, en unité de masse/m ³
(2)	11 - 20	DURSPE_CHM	durée pour la spéciation initiale (défaut = 10 ⁻¹⁰ sec)
(3)	21 - 30	EPSI_CHM	variation minimale de concentration pour les calculs chimiques (défaut = 10 ⁻¹⁰ moles/litres)
(4)	31 - 40	MOLEAU_CHM	concentration molaire de l'eau (défaut = 55.51 moles/l)
(5)	41 - 50	UTIM_CHM	pour transformer l'unité de temps utilisateur en secondes.

Remarques :

- (1) Les diverses concentrations sont lues en unité de masse (peu importe laquelle) par unité de volume utilisateur ; ce paramètre est destiné à transformer les concentrations en unité de masse par m³.

Par exemple :

les concentrations sont lues en g / cm³, alors UVOL_CHM = 10⁶

les concentrations sont lues en moles/litre, alors UVOL_CHM = 10³.

- (2) Ce paramètre est utilisé uniquement si une spéciation initiale est demandée et si les calculs chimiques font intervenir une cinétique. C'est la durée pendant laquelle est réalisée la spéciation initiale.
- (3) Ce paramètre est le seuil de variation de concentration en deçà duquel on considère qu'il n'est pas nécessaire de déclencher les calculs chimiques, lesquels pouvant demander beaucoup de temps CPU. Le test de déclenchement des calculs est fait en chaque noeud ; les calculs chimiques sont effectués en ce noeud dès que la variation de concentration d'un seul élément en solution dépasse ce seuil.
- (4) La concentration molaire de l'eau est le nombre de moles par unité de volume de solution. Dans le cas le plus fréquent où ce volume est en litres, c'est le nombre de moles d'eau par litre de solution. Par défaut, ce nombre vaut 55.51 mol/kg (peu différent de 55.51 mol/litre) ; en effet, une mole d'eau a une masse de 18 g environ (H₂O), d'où le nombre $55.51 \cong 1000/18$ moles par kg.
- (5) Ce paramètre qui donne la valeur de l'unité de temps utilisateur en secondes est destiné uniquement à la sortie des historiques.

Exemple de fichier Projet.nom (sans couplage transport-chimie)

```

C PROJECT DEFINITION file
C
C
C DATA
C the known file extensions are: .SMD or .DAT for the flow data + pathlines
C .TMD for the first component: transport data
C .TMD , .TM2 , .TM3 ... for other components
C .TMT for thermic case
C .HIS for the historic definition
C
C RESULTS
C the generated files are .RES for the listing of the results
C .CHR for the historic results
C .LIN for the pathline results
C .FLE for the velocity field results
C .ELE for the mesh results
C .NOE for the node map results
C
C Project definition:
C
C TITLE: 2 spaces + 8 letters to give the file name (without extent)
C
C and 9 integers with the format: 6(4X,I1),2(I5),(4X,I1)
C
C 1: 1 density coupling / 2 thermic only / 3 salinity only / 0 without
C 2: number of mass components (transport) < 9 (without thermic)
C 3: maximum number of steps in self adaptive flow mesh < 9
C 4: maximum number of steps in self adaptive transport mesh < 9
C 5: 1 with thermic transport / 0 without
C 6: 1 with smoothing at first time step / 0 without (only in 2D)
C 7: number of additive refinement level before unrefinement < 99
C 8: number of graphic output pictures < 26
C 9: 1 with historic file (.HIS) / 0 without
C
C
C / / / / / / / / / /
C titre I1 I2 I3 I4 I5 I6 I7 I8 I9
C / / / / / / / / / /
C namefile 0 0 0 0 0 0 0 5 1
C
C liste of the graphic output time steps (format : 26I3)
C / / / / / / / / / / / / / / / / / / / / / / / / / / / /
C 1 2 5 10 15
C
C
C 1: kind of self-adaptive method (0 or 1)
C 2: kind of transport with(1) or without(0) particles generation
C 3: maximum number of coupling iterative steps(if = 1 : Sequential
C Approach without iteration)
C 4: coupling convergence criterium defined by: 10**(-I4)
C
C
C format : (16I5)
C
C I1 I2 I3 I4
C / / / /
C 0 0 1 2
C
C
C DEFTTEM : default temperature in the whole domain
C
C DEFCON(i) : default concentration for the i-th chemical component
C
C DEFTTEM DEFCON(1) DEFCON(2) DEFCON(3) DEFCON(4) DEFCON(5) DEFCON(6) DEFCON(7)
C / / / / / / / /
C 20. 0. 0. / / / / /

```

Suite du fichier Projet.nom (si couplage chimique)

```

C
C GEOCHEMISTRY
C
C 3 new files are required with the extensions :
C   .NTX 1st parameter file for NEPTUNIX (12 parameters)
C   .PCH 2nd parameter file for NEPTUNIX (parameter number depends on model)
C   .SCS initial concentrations for solid species in elements
C   7 integer (format 715)
C
C
C   J1: 1 geochemistry and transport coupling
C   J2: initial speciation (0 no, 9999 in each element N in ekt B)
C   J3: 1 non-equilibrium chemistry
C   J4: method for chemical computation (0 NEPTUNIX, >0 analytical models)
C   J5: number of chemical SPECIES in solid phase
C   J6: number of output informations
C   J7: flag for solid species input mode (0 group mode, 1 element mode)
C J1  J2  J3  J4  J5  J6  J7
C /    /    /    /    /    /    /
C 1 9999 0    2    1    3    0
C
C   5 real (format 5F10.0)
C
C   R1: volume unit for chemical concentration (to return to MKSA)
C   R2: duration of initial speciation (def = 1.E-10 SEC.)
C   R3: minimum conc. change for chemical calculations (def=1.E-10 moles/l)
C   R4: molar concentration of water (def=55051 moles/l)
C   R5: value of user time unit in seconds
C   R1    R2    R3    R4    R5
C /      /      /      /      /
C 1.E03    0      0      0    86400.

```

1.2. DONNEES HYDRODYNAMIQUES

Le fichier des données hydrodynamiques a pour extension .DAT ou .SMD. au choix. Il est compatible avec les fichiers de données des modules SM, DM_Red et DM de ROCKFLOW.

TAFFETAS assure toujours la compatibilité ascendante vis-à-vis de ROCKFLOW.

Chaque ligne ou groupe de lignes est identifié par un nom, le format de la ligne, le nom des variables, leur signification, et par une notice (commentaire).

Les variables entières peuvent être constituées d'un nombre précédé éventuellement du signe + ou -. La plupart des ordinateurs lisent les blancs comme des zéros, c'est pourquoi il faut caler ces variables à droite du champ où on ils sont inscrits.

Les variables réelles peuvent être présentées comme suit :

- (1) On peut faire précéder (facultativement) le nombre du signe + ou -, suivi de décimales. Lorsque la décimale n'est pas donnée, il faut caler le chiffre réel à droite.
- (2) Pour utiliser la notation scientifique classique, on peut compléter l'indication fournie en (1) par l'initiale E suivie du signe (facultatif) + ou -, suivi d'un ou deux chiffres. Les variables précédées de E et les chiffres doivent être calés à droite des champs prévus à cet effet. Dans ce mode de représentation, l'expression 1.53 E-09 représente par exemple la valeur $1,53 \times 10^{(-9)}$.

On peut, pour un ensemble de données, ajouter un espace réservé aux commentaires aux endroits voulus (excepté devant la ligne de titre). Cet espace doit être précédé de la lettre "C" ou "c" ou "*" dans la première colonne et peut comporter toute une série de signes dans les colonnes 2 à 80. Ces lignes seront simplement parcourues et ne feront pas l'objet d'une interprétation. Elles ne servent qu'à mieux structurer les données d'entrée et favorisent la lisibilité du fichier de données (présentation des données).

Remarque : Pour effectuer un calcul en régime permanent, choisir un nombre de périodes de pas de temps de 1 et un coefficient d'emmagasinement de 0 (paramètres NPER et PROPS décrits ci-après).

Ligne titre

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	I - 80	TITLE	titre du modèle : 80 caractères

Remarque :

- (1) Il faut prévoir une nouvelle ligne titre pour chaque jeu de données. Les lignes correspondant à chaque jeu de données sont décrites aux sections suivantes. Pour mettre fin au déroulement du programme, il faut reporter les 4 lettres STOP dans les colonnes 1 à 4.

Lignes principales de commande

Ligne 1 (5I5, F10.0, 2I10, 2I5, F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 5	NUMNP	Nombre total de noeuds ; EQ. 0 : Fin du programme
(2)	6 -10	NEGL	Nombre total de groupes d'éléments
	16 -20	MODEX	mode d'exécution EQ. 1 : Déroulement du programme EQ 2 : Restart
(2)	21 - 25	NPER	Nombre de périodes pendant lesquelles les pas de temps sont constants GE. 0 et LE. 16
(3)	26 - 35	TSTART	Instant au début de la résolution GE. 0.0
(4)	36 - 45	LIUCU	EQ. 1 : linéaire EQ. 2 : quadratique (incomplet) EQ. 3 : cubique EQ. 4 : quadratique (complet)

(5)	46 - 55	I_MIXT	EQ. 0 : conforme EQ. 1 : mixte
(6)	56-60	IMET	méthode de résolution : EQ. 1 : Gauss (<1000 noeuds) et biconjugué si > 1000 noeuds EQ. 3 : Gradient conjugué Templates autres : Gradient Conjugué avec préconditionnement
(7)	61-65	IBOUND	traitement des conditions limites (0) ou (1)
(8)	66-75	PRECI_NUM	critère de convergence pour le gradient conjugué
	76-80	ICHPR	indice charge (1) ou pressions (2)

Remarque :

- (1) Le nombre total de noeuds (NUMNP) commande le nombre de données à lire dans la section 1.2.1.
- (2) Un groupe d'éléments consiste en une série d'éléments d'un type donné (éléments 1 D, 2 D par exemple, etc.), où les éléments sont numérotés par ordre croissant. La numérotation commence à "1" et se termine par le nombre total des éléments contenus dans ce groupe. Les paramètres suivants correspondant aux éléments d'un groupe doivent avoir la même valeur.

Type d'élément	(NPAR(1))
Degré d'intégration (nombre de points de Gauss)	(NPAR(10))
Modèle de matériau	(NPAR(15))

- (2) NPER est le nombre de périodes, sous-divisées en incréments de pas de temps. Le nombre et les incréments des pas de temps figurent en Section 1.2.1.
- (3) Le temps indiqué en début de calcul (TSTART) permet l'initialisation d'un nouveau départ (MODEX EQ.2). TSTART correspond pour un redémarrage à la fin du calcul précédent. Les conditions initiales du nouveau calcul (ou nouvelle simulation) ont été enregistrées à la fin du calcul précédent. Le temps étant incrémenté à partir de TSTART, il n'est donc pas nécessaire de décaler les fonctions du temps pour redémarrer. La variable TSTART peut, pour un nouveau calcul (ou nouvelle simulation) ne nécessitant pas de redémarrage, être différente de zéro.
- (4) LIQUCU : LInéaire/QUadratique/CUBique permet, pour un calcul conforme de définir le type d'élément, c'est-à-dire le degré des fonctions de forme élémentaires.
.EQ.2 : quadratique incomplet
.EQ.3 : cubique
.EQ.4 : quadratique complet
.EQ.1 ou 0 ou autres : linéaire (option par défaut).

Pour un calcul mixte hybride, LIUCU = 1 est par défaut, utilisé pour choisir les fonctions de base vectorielles (standards), mais LIUCU = 2,3 permet d'accéder à d'autres fonctions vectorielles.

- (5) I_MIXT : cet indice permet de choisir entre une simulation hydrodynamique avec la méthode conforme (I_MIXT = 0), et une simulation avec la méthode mixte hybride (I_MIXT = 1).
- (6) IMET : choix de la méthode de résolution.
 IMET.EQ.1 : méthode directe de GAUSS (si < 1000 noeuds) et biconjugué sinon
 IMET EQ.3 : méthode gradient conjugué (templates) non conditionné
 IMET EQ.0 ou autre : méthode itérative du gradient conjugué avec un préconditionnement de Choleski de niveau 2 par défaut mais modifiable par le paramètre NIV_FLOW.
- (7) IBOUND : choix de la méthode d'intégration des conditions limites en charge imposée dans le système matriciel.
 IBOUND.EQ.0 : Dans ce cas, le terme diagonal est multiplié par 10^{15} (par défaut) de manière à imposer la valeur fixée et introduite au second membre. Ceci a pour but de rendre négligeables les termes non-diagonaux.
 IBOUND : EQ.1 : Dans ce cas, le terme diagonal est mis à 1., et tous les termes non diagonaux sont modifiés dans la ligne et dans la colonne de la matrice. Cette méthode plus exacte est cependant plus lourde à mettre en oeuvre.
- (8) PRECI : précision numérique pour la convergence de la résolution. Compris entre 10^{-5} et 10^{-20} .

Ligne 2 : ligne vide

Ligne 3 : (3 I5)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
	6 - 10	NIV_FLOW	Ecoulement : Par défaut le niveau de préconditionnement de Choleski si IMET=0 est LEVEL_FLOW = 2 NIV_FLOW s'ajoute à LEVEL_FLOW pour le modifier. EQ. -2 : Préconditionnement niveau 0 EQ. -1 : Préconditionnement niveau 1 EQ. 0 : Préconditionnement niveau 2 EQ. +1 : Préconditionnement niveau 3 etc.
	11- 15	NIV_MASS	Transport : Par default le niveau de préconditionnement de Choleski si IMET=0 est LEVEL_MASS = 2

NIV_MASS s'ajoute à LEVEL_MASS pour le modifier.

EQ. -2 : Préconditionnement niveau 0

EQ. -1 : Préconditionnement niveau 1

EQ. 0 : Préconditionnement niveau 2

EQ. +1 : Préconditionnement niveau 3 etc.

Remarque : Il n'y a pas de préconditionnement si IMET = 3

Ligne 4 : ligne vide

Ligne 5 (I10, F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	11 - 20	THETA	Θ , dans le schéma d'intégration temporelle ; GE. 0.5 et LE 1.0, Valeur par défaut : "1.0" (schéma implicite pur)

Remarque :

(1) Pour les problèmes permanents, THETA doit être EQ. 1.0.

Pour effectuer un calcul hydrodynamique en régime permanent, il faut de plus mettre à "0" les coefficients d'emmagasinement (paramètres PROPS du § 1.2.4).

Ligne 6 (I5)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 5	NPB	Nombre de blocs de sortie pour les pressions ; EQ. 0 : exprimer les pressions pour chaque noeud GT. 0 et LE. 8 : définir les blocs sur la ligne suivante

Remarque :

(1) Pour les grands réseaux maillés, il n'est en principe pas nécessaire d'indiquer les pressions à chaque noeud. C'est pourquoi les noeuds pour lesquels on souhaite une sortie sont répartis en NPB blocs de sortie. Chaque bloc de noeuds est défini par le numéro du premier et du dernier noeud de ce bloc (voir ligne suivante). Lorsque NPB . EQ. 0, toutes les valeurs des noeuds sont exprimées.

Ligne 7 (16I5)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 5	IPNODE(1,1)	Premier noeud du bloc de sortie N°1
	6 - 10	IPNODE(2,1)	Dernier noeud du bloc de sortie N°1
	11 - 15	IPNODE(1,2)	Premier noeud du bloc de sortie N°2 ...

Remarque :

- (1) On saisit en principe deux valeurs pour chaque bloc de sortie, à savoir le premier et le dernier noeud du bloc. Tous les noeuds intermédiaires figurent dans le bloc de sortie. On peut définir 8 blocs au maximum. Lorsque NPB. EQ. 0, cette ligne doit rester vide.

1.2.1. Gestion des pas de temps**a) Nombre de lignes de données des pas de temps (16I5)**

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 5	NSPER(1)	Nombre de pas de temps dans la première période
deuxième	6 - 10	NSPER(2)	Nombre de pas de temps dans la période
	...	...	...
		NSPER(NPER)	Nombre de pas de temps dans la dernière période NPER.

b) Ligne (n) pour les incréments de pas de temps (8F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	DTPER(1)	Incrément de pas de temps dans la première période
	11 - 20	DTPER(2)	Incrément de pas de temps dans la deuxième période
	...	...	...
dernière		DTPER(NPER)	Incrément de pas de temps dans la période NPER.

Remarque :

- (1) NSPER(I) et DTPER(I) sont respectivement le nombre d'incrément de pas de temps constants et la valeur de ce pas de temps. Toutes les fonctions des conditions aux limites sont données sous forme de tableaux de $[g(t), t]$. Les charges pour le pas de résolution "n" sont calculées avec des conditions aux limites résultant d'une interpolation linéaire à l'aide des tableaux $[g(t), t]$.

```

TEST de trois noeuds 1 D
C LA PREMIERE LIGNE EST UN TITRE DE MOINS DE 80 CARACTERES -----
C
C TOUTE LIGNE COMMENÇANT PAR UN "C" est un commentaire (sauf pour le titre)
C ONT PEUT AJOUTER AUTANT DE LIGNE DE COMMENTAIRE
C QUE NECESSAIRES POUR EXPLIQUER LES DONNEES
C
C
C NUMNP : nombre total de noeuds
C NEGL : nombre de groupes de matériaux linéaires
C MODEX : indice du mode d'exécution
C 1 exécution normale
C 2 restart
C NPER : nombre de périodes de pas de temps
C TSTART: temps initial
CUMNP NEGLNENGLMODEX NPER TSTART (5I5,F10.0)
  3 1 0 1 1 0.

C THETA : facteur d'intégration du schéma temporel
C = 0. explicite pur
C = 0.5 Crank-Nicholson
C = 1. implicite pur
C THETA (I10,F10.0)
  0.

C NPB = nombre de blocs pour l'impression des vitesses
C NPB (I5)
  0
C IPNODE= indices des noeuds de début et fin pour les NPB blocs d'impression
C IPNODE (16I5)
C (1) (2) ... (NPB)

C III. TIME STEP DATA
C a. number of solution time steps card(s) (16I5)
C NSPER = table des nombres de pas de temps pour chacune des NPER périodes
C NSPER
C (1) (2) ... (NPER)
  1
C b. time step increment card(s) (8F10.0)
C DTPER = table des durées des pas de temps pour chacune des NPER périodes
C DTPER(1) DTPER(2) ... DTPER(NPER)
  10.

C
C IV. NODAL POINT DATA (2I5,3F10.0,I5)
C informations sur les noeuds
C N = numéro du noeud
C ID = indice de condition limite: 1 si charge imposée
C X = coordonnée X
C Y = coordonnée Y
C Z = coordonnée Z
C KN = pas d'incrément automatique
C


| C | N | ID | X  | Y  | Z  | KN | H_INI | S1_INI | S2_INI |
|---|---|----|----|----|----|----|-------|--------|--------|
|   | 1 |    | 0. | 0. | 0. |    |       |        |        |
|   | 2 |    | 1. | 0. | 0. |    |       |        |        |
|   | 3 |    | 2. | 0. | 0. |    |       |        |        |


C VII. BOUNDARY CONDITION CONTROL CARD (7I5)
C conditions limites
C NTF = nombre total de fonctions du temps
C NPTM = nombre maximum de points utilises pour définir l'une des fonctions
C NTEMP = nombre total de noeuds a charges imposes
C NLOAD = nombre total de noeuds a débits imposes
C NTF NPTM NTEMP NLOAD
  1 2 0 2
C VIII. DEFINITION OF TIME FUNCTIONS (2I5)
C a. control data
C NTOF = numéro de la fonction du temps
C NPTS = nombre de points utilises pour la décrire
C NTOF NPTS
  1 2

```

```

C b. (t,f(t)) data (8F10.0)
C TIMV = table des temps définissant les points de cette fonction
C RV = table des valeurs affectées à ces temps
C TIMV(1) RV(1) TIMV(2) RV(2) ... TIMV(NPTS) RV(NPTS)
0. 1. 99999999. 1.
C IX. APPLIED BOUNDARY CONDITION DATA
C 1. Specification of Nodal Point Piezometric Heads (2I5,2F10.0,I5)
C définition des charges imposées
C NOD = numéro du noeud à potentiel imposée
C NCUR = numéro de la fonction du temps définissant cette charge imposée
C FAC = facteur multiplicatif pour définir la valeur imposée pour la charge
C KN = incrément automatique
C NOD NCUR FAC KN
C 1. Specification of Concentrated Nodal Flow Input (2I5,2F10.0,I5)
C définition des débits imposés
C NOD = numéro du noeud à débit impose
C NCUR = numéro de la fonction du temps définissant ce débit impose
C FAC = facteur multiplicatif pour définir la valeur imposée pour le débit
C KN = incrément automatique
C NOD NCUR FAC KN
1 0 -1.E-2
3 0 1.E-2
C ELEMENT INPUT
C(1) (2) (3) (10) (11) (12) (14) (15) (16)
CNR1 NR2 NR3 N11 N15 N16
1 2 0 0 1 1
C b. material property cards (3F10.0)
C N A(N)
1 1.
C PROPK ISOTROPIE .....
1.E-3
C PROPS
1.E-5
C 4. Element Data Cards
C M IPS NOD1 NOD2 MTYP KG
1 1 1 2 1 0
2 1 2 3 1 0
STOP

```

1.2.2. Géométrie des maillages

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 5	N	Numéro du noeud ; GE 1 et LE. NUMNP
	11 - 20	X(N)	Coordonnées X
	21 - 30	Y(N)	Coordonnées Y
	31 - 40	Z(N)	Coordonnées Z
(2)	41 - 45	KN	Incrément de numérotation des noeuds pour générer de nouveaux noeuds par raffinement ; EQ. 0 : pas de raffinement.
(3)	46-55	HINI	Charge (ou pression) initiale de ce noeud
(4)	61-70	S1-INI	Saturation initiale pour le fluide 1
(4)	71-80	S2-INI	Saturation initiale pour le fluide 2

Remarque :

- (1) Ces données doivent être définies pour tous les noeuds (NUMNP). Les données nodales doivent être saisies directement (chaque noeud doit apparaître sur sa propre ligne) ou, le cas échéant, on peut choisir de les générer automatiquement (voir remarque 2 ci-dessous). Les numéros autorisés se situent entre "1" et NUMNP. Cette numérotation doit être continue. Le dernier noeud saisi doit être NUMNP. Après saisie de la dernière ligne pour N égal à NUMNP, plus aucune ligne ne sera lue.
- (2) Les lignes des données nodales ne doivent pas nécessairement se suivre par ordre de numérotation des noeuds ; il importe cependant que tous les noeuds soient bien définis dans l'intervalle 1, NUMNP. Les données nodales de la série

$$(N_1, N_1 + 1, N_1 + 2 \cdot KN_1, \dots, N_2)$$

peuvent être calculées à partir des informations fournies par deux (2) lignes, et ce dans l'ordre suivant :

Ligne 1 : $N_1, ID(N_1), X(N_1), \dots, KN_1$

Ligne 2 : $N_2, ID(N_2), X(N_2), \dots, KN_2$.

KN_1 est le paramètre de calcul du noeud sur la première ligne de la série. Le premier noeud calculé est $N_1+1.KN_1$, le deuxième $N_1+2.KN_1$, etc. Le calcul se poursuit jusqu'à ce que l'on ait atteint N_2-KN_1 . La différence de noeuds N_2-N_1 doit être une fraction exacte de KN_1 . Les valeurs des coordonnées font l'objet d'une interpolation linéaire.

- (3) Les charges initiales peuvent être lues dans un autre fichier si $MODEX = 2$ (Restart) dans ce cas, le nom complet du fichier (de RESTART) est lu en 12 caractères en colonnes 48 à 59 sur la première ligne de données nodales et un caractère Z majuscule est disposé en colonne 46.
- (4) Les saturations initiales S1-INI et S2-INI pour les fluides 1 et 2 ne sont définies que pour un modèle biphasique.

1.2.3. Fonctions du temps et conditions aux limites

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 5	NTTF	Nombre total de fonctions temporelles saisies dans les sections a et b suivantes
(1)	6 - 10	NPTM	Nombre maximal de points utilisés pour la description de l'une quelconque des fonctions temporelles

(2)	16 - 20	NTEMP	Nombre total de noeuds pour lesquels la charge ou la pression est imposée
(3)	31 - 35	NLOAD	Nombre total de noeuds pour lesquels les débits sont imposés.

Remarques :

- (1) Toutes les fonctions temporelles utilisées dans le système sont données sous la forme $[t, f(t)]$ en sections a et b. A l'instant t , la valeur de $f(t)$ est calculée par interpolation linéaire dans le tableau de $[f(t), t]$. NPTM est le nombre maximal de paires de $[t, f(t)]$ utilisé pour décrire l'une quelconque des fonctions NTTF. Chaque fonction peut comporter un nombre de données saisies $[t, f(t)]$ inférieur ou égal à NPTM, mais aucune fonction ne peut comporter plus de NPTM points. Il faut au minimum deux points par fonction, sinon l'interpolation dans le temps n'est pas possible.
- (2) NTEMP détermine le nombre total de pressions imposées aux noeuds, qui sont données (section 1).
- (3) NLOAD détermine le nombre total de noeuds pour lesquels les données acquises sont des débits concentrés aux noeuds (section 2).

Les fonctions NTTF des données des fonctions de temps (NTTF a été défini ci-dessus) sont indiquées par ordre croissant des numéros des fonctions de temps. Lorsque NTTF égale 0, on peut sauter la présente section.

a) Données de contrôle (2I5)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
	1 - 5	NTF	Numéro de la fonction du temps GE. 1 et LE. NTTF
	6 -10	NPTS	Nombre de points (de paires $[t, f(t)]$) utilisés comme donnée d'entrée de cette fonction du temps GE.1 et LE. NPTM

b) Données $(f(t)t)$ (8F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1- 10	TIMV(1)	Instant au point 1, t_1
	11 - 20	RV(1)	Fonction au point 1, $f(t_1)$
	21 - 30	TIMV(2)	Instant au point 2, t_2
	31 - 40	RV(2)	Fonction au point 2, $f(t_2)$
	...		...

	71 - 80	RV(4)	Fonction au point 4, $f(t_4)$ ligne suivante (si nécessaire)
(2)	1 - 10	TIMV(5)	Instant au point 5, t_5
	11 - 20	RV(5)	Fonction au point 5, $f(t_5)$
	...	...	...

Remarques :

- (1) Les valeurs temporelles aux points successifs doivent aller par ordre croissant ($TIMV(1) < TIMV(2) < TIMV(3)$, etc.) et $TIMV(1)$ doit être égal à zéro ($TIMV(1) = EQ. 0$).
La dernière valeur temporelle de la fonction ($TIMV(NPTS)$) doit être supérieure ou égale à l'instant final de la résolution. Les fonctions du temps servent à définir les variations des pressions imposées en fonction du temps (voir section 1) et celles des débits imposés en fonction du temps (voir section 2).
- (2) Dans la présente section, il convient de fournir autant de lignes que l'exige la définition des points NPTS (quatre points par ligne).

• Les charges ou pressions imposées

Lorsque $NTEMP = EQ. 0$, on peut sauter cette section ; sinon, il convient de fournir ici les lignes permettant de spécifier toutes les pressions imposées par $NTEMP$ ($NTEMP$ a été défini à la section 1.2.3).

Modèle conforme : pressions nodales

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
	1 - 5	NOD	Numéro du noeud à la pression imposée ; GE.1 et LE.NUMNP
	6 - 10	NCUR	Numéro de la fonction temporelle décrivant la variation de cette pression imposée en fonction du temps ; GE.1 et LE.NTTF Si $NCUR = EQ. 0$: $f(t) = FAC$
	11 - 20	FAC	Multiplicateur de fonction $f(t)$ servant à imposer la pression à l'instant t ;
(1)	31 - 35	KN	Incrément de génération des noeuds ; $EQ. 0$: aucune génération.

Modèle mixte : pressions par faces

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
	6-10	NCUR	Numéro de la fonction temporelle $f(t)$
	11-20	FAC	Multiplicateur de la fonction $f(t)$ du temps pour imposer la pression à l'instant t
(1)	21-25	NOD ₁	2 ou 4 noeuds définissant une face d'un élément ou de plusieurs, sur laquelle la pression est imposée.
	26-30	NOD ₂	
	31-35	NOD ₃	
	36-40	NOD ₄	

Remarque :

- (1) Les numéros des noeuds ne doivent pas nécessairement suivre l'ordre croissant : il importe cependant de bien indiquer toutes les pressions à définir aux noeuds. Les données nodales pour la série
 $(NOD_1, NOD_1+1 \cdot KN_1, NOD_1+2 \cdot KN_1, \dots, NOD_2)$

peuvent être calculées à partir des informations fournies par deux lignes successives, dans l'ordre suivant :

Ligne 1 : NOD₁, NCUR₁, FAC₁, KN₁

Ligne 2 : NOD₂, NCUR₂, FAC₂, KN₂

KN₁ est le paramètre de calcul du noeud indiqué par ordre croissant sur la première ligne. Le premier noeud calculé est NOD₁+KN₁, le second NOD₁+2KN₁ etc. Le calcul se poursuit jusqu'au numéro de noeud NOD₂-KN₁. On notera que la différence NOD₂-NOD₁ doit être une fraction exacte de KN₁. Pour les noeuds ainsi calculés, le numéro des fonctions temporelles est celui indiqué pour NOD₁. La fonction NCUR₁ est donc affectée à tous les noeuds entre NOD₁ et NOD₂. Les multiplicateurs de fonction (FAC) font l'objet d'une interpolation linéaire entre NOD₁ et NOD₂.

• Les débits imposés

Lorsque NLOAD.EQ. 0, on peut sauter cette section ; sinon il convient de fournir ici les lignes permettant de préciser tous les termes nodaux NLOAD imposés (NLOAD a été défini à la section 1.2.3).

Modèle conforme : débits nodaux

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
	1 - 5	NOD	Numéro de noeud sous lequel sont répertoriés les termes de débits nodaux ; GE.1 et LE.NUMNP
	6 - 10	NCUR	Numéro de la fonction de temps décrivant la variation des termes nodaux dans le temps $f(t)$; GE.1 et LE.NTTF Si NCUR EQ.0 : $f(t) = FAC$
	11 - 20	FAC	Multiplicateur de la fonction $f(t)$ servant à imposer le débit à l'instant t ;
(1)	31 - 35	KN	Incrément de génération des noeuds ; EQ.0 : aucune génération

Remarque :

- (1) Les numéros des noeuds ne doivent pas nécessairement suivre l'ordre croissant : il importe cependant de bien indiquer tous les débits à définir aux noeuds. Les données nodaux pour la série

$$(NOD_1, NOD_1+1 \cdot KN_1, NOD_1+2 \cdot KN_1, \dots, NOD_1)$$

peuvent être calculées à partir des informations fournies par deux lignes successives, dans l'ordre suivant :

Ligne 1 : $NOD_1, NCUR_1, FAC_1, KN_1$

Ligne 2 : $NOD_1, NCUR_1, FAC_1, KN_1$

KN_1 est le paramètre de calcul du noeud indiqué par ordre croissant sur la première ligne. Le premier noeud calculé est NOD_1+KN_1 , le second NOD_1+2KN_1 etc. Le calcul se poursuit jusqu'au numéro de noeud NOD_2-KN_1 . On notera que la différence NOD_2-NOD_1 doit être une fraction exacte de KN_1 . Pour les noeuds ainsi calculés, le numéro des fonctions temporelles est celui indiqué pour NOD_1 . Les multiplicateurs de fonction (FAC) font l'objet d'une interpolation linéaire entre NOD_1 et NOD_2 . Attention, ce sont des débits nodaux.

Modèle mixte. Premier type : débits par faces

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
	6-10	NCUR	Numéro de la fonction temporelle $f(t)$
	11-20	FAC	Multiplicateur de la fonction $f(t)$ du temps pour imposer le débit par face à l'instant t
	21-25	NOD ₁	2 ou 4 noeuds définissant une face d'un
	26-30	NOD ₂	élément ou de plusieurs, sur laquelle le débit
	31-35	NOD ₃	est imposé.
	36-40	NOD ₄	

Modèle mixte. Second type : débits par éléments

Lorsque NFLUEL. EQ. 0, on peut sauter cette section ; sinon il convient de fournir ici les lignes permettant de préciser tous les termes élémentaires NFLUEL imposés (NFLUEL a été défini à la section 1.2.3).

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
	6-10	NCUR	Numéro de la fonction temporelle $f(t)$
	11-20	FAC	Multiplicateur de la fonction $f(t)$ du temps pour imposer le débit dans l'élément concerné, à l'instant t
	21-25	NELFLU	numéro de l'élément dans lequel on veut imposer ce débit

1.2.4. Paramètres hydrodynamiques élémentaires

Les éléments finis sont saisis par groupes d'éléments de même type. Chaque groupe nécessite un ensemble de données. Nous avons reporté ci-dessous à titre d'exemple la composition type d'un fichier d'entrée adapté à l'analyse d'éléments 1D et 2D.

Ligne titre

Lignes principales de commande

Données nodales (géométrie) et Conditions initiales

Données des pressions imposées et des débits imposés

Groupes d'éléments hydrauliques 1D

Groupes d'éléments hydrauliques 2D

Le nombre nécessaire d'ensemble de données pour les groupes d'éléments, tels que définis aux sections 1.2.4.1 à 1.2.4.3, doit correspondre au nombre total de groupes.

a) Eléments monodimensionnels

Les éléments hydrauliques monodimensionnels sont des éléments à deux noeuds que l'on peut orienter au choix dans le système global de coordonnées X-Y-Z. L'élément ne conduit qu'un débit axial. Les indications suivantes sont nécessaires pour chaque groupe d'éléments constitué d'éléments hydrauliques monodimensionnels (1D) :

- Section 1** Ligne de commande pour le groupe d'éléments
 Cette ligne définit la nature des éléments hydrauliques 1D de ce groupe : linéarité ou non des éléments, nombre d'éléments, etc.
- Section 2** Ligne de données des caractéristiques des matériaux
 Les rapports entre perméabilité et gradient de pression de tous les éléments de ce groupe ne doivent être décrits que par un modèle unique. On peut cependant indiquer un nombre infini de caractéristiques du matériau (chacune définissant les différentes constantes du matériau pour le modèle spécifique appliqué à ce groupe).
- Section 3** Lignes de données pour les éléments
 Dans cette section, les éléments de ce groupe sont définis en indiquant leurs noeuds, leurs sections, etc.

1. Ligne de commande pour groupe d'éléments (2014)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 4	NPAR(1)	Entrer numéro "1" = monodimensionnel
	5 - 8	NPAR(2)	Nombre des éléments hydrauliques 1D de ce groupe ; GE.1
(2)	9 - 12	NPAR(3)	Type d'analyse ; EQ. 0 : analyse linéaire EQ. 1 : analyse non linéaire
(3)	57 - 60	NPAR(15)	Numéro du modèle de matériau ; GE.1 et LE.2 ; Valeur par défaut : "1" EQ. 1 : perméabilité isotrope constante et coefficient d'emmagasinement spécifique constant EQ. 2 : perméabilité isotrope non constante et coefficient d'emmagasinement spécifique constant
(4)	61 - 64	NPAR(16)	Nombre de sous-groupes matériaux (mêmes caractéristiques) ; GE.1 ; Valeur par défaut : "1"

Remarque :

- (1) Le numéro des éléments hydrauliques 1D commencent par un et se terminent par le nombre total des éléments de ce groupe, NPAR(2). Les données élémentaires figurent à la section 3 ci-dessous.
- (2) Le paramètre NPAR(3) détermine s'il s'agit d'un groupe d'éléments linéaires ou non. Un groupe d'éléments doit être non linéaire lorsque la perméabilité est fonction du nombre de Reynolds ou de la pression (donc lorsque NPAR(15). EQ.2).
- (3) Dans chaque groupe d'éléments, on ne peut appliquer qu'un modèle de matériau, ce type de modèle est défini par la valeur NPAR(15). Les constantes de matériau qui correspondent au modèle de ce groupe d'éléments sont données à la section 2 ci-dessous.
- (4) La variable NPAR(16) définit le nombre de sous-groupes de caractéristiques du matériau données en section 2 ci-après.

2. Lignes de données pour les caractéristiques des matériaux

Les NPAR(16) sous-groupes doivent être saisis dans la même section. Bien que la ligne "a" (ligne du numéro de matériau) soit identique pour tous les modèles de matériau, les lignes "b" (lignes des caractéristiques du matériau) sont fonction du numéro correspondant au modèle de matériau (NPAR(15)).

a. Ligne du numéro de matériau (15, F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 5	N	Numéro du matériau
	6 - 15	AREA(N)	GE.1 et LE. NPAR(16) Surface de la section de l'élément 1D

Remarque :

- (1) C'est le même modèle de matériau qui sert à déterminer la section unitaire de tous les éléments de ce sous-groupe.

b. Lignes des caractéristiques de matériaux

- Pour le MODELE "1" (NPAR(15).EQ.1) :

Ligne de perméabilité (F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	PROPK(1,N)	Perméabilité (m/s)

Ligne des coefficients d'emmagasinement spécifiques (F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	PROPS(1,N)	Coefficient d'emmagasinement spécifique S_0 (m^{-1})
	11 - 15	ICONT	inutile en 1D

Remarque :

- (1) Le MODELE "1" est un modèle préexistant, défini par un paramètre (k), permettant de préciser la perméabilité et par un paramètre (S_0) indiquant le coefficient d'emmagasinement spécifique.

- Pour le MODELE "2" (NPAR(15).EQ.2) :

Ligne de perméabilité (3F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	PROPK(1,N)	Constante a dans l'exponentielle pour k
(1)	11 - 20	PROPK(2,N)	Constante b dans l'exponentielle pour k
(1)	21 - 30	PROPK(3,N)	constante α dans l'exponentielle pour $grad p$

Ligne de coefficient d'emmagasinement spécifique (F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	PROPS(1,N)	Coefficient d'emmagasinement spécifique S_0
	11 - 15	ICONT	inutile en 1D

Remarque (non programmé en 1996) :

- (1) Le MODELE "2" est un modèle préexistant, défini par trois paramètres (a, b, α) permettant de spécifier la perméabilité et par un paramètre (S_0), indiquant le coefficient d'emmagasinement spécifique S_0 . Il repose sur une loi d'écoulement non linéaire où

$$\underline{v} = - \underline{K} \cdot (\text{grad } p)^a$$

avec :

$$\underline{K} = \begin{bmatrix} k_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & k_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & k_{zz} \end{bmatrix}, k_{ii} = 10^{-\left(a+b\left|\frac{\partial i}{\partial i}\right|\right)}$$

3. Lignes de données pour les éléments (6/5)

Les éléments NPAR(2) doivent être indiqués ou calculés dans cette section par ordre croissant en commençant par "1".

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 5	M	Numéro de l'élément hydraulique 1D ; GE.1 et LE. NPAR(2)
	6 -10	IPS	Flag contrôlant l'impression des vitesses de filtration ; EQ.0 : pas d'impression EQ.1 : vitesse de filtration exprimée
	11 -15	NOD(1)	Numéro global du noeud élémentaire 1 ; GE.1 et LE.NUMNP
	16 - 20	NOD(2)	Numéro global du noeud élémentaire 2 ; GE.1 et LE.NUMNP
	21 - 25	MTYP	Numéro du sous-groupe de matériaux ; GE.1 et LE. NPAR(16)
(1)	26 - 30	KG	Incrément permettant d'obtenir les numéros des noeuds raffinés EQ.0 : pas de raffinement

Remarque :

- (1) Le numéro des éléments doit être indiqué par ordre croissant en commençant par un (1) et en terminant par NPAR(2). S'il n'est pas permis de répéter les numéros d'éléments, il est en revanche possible d'en sauter. Lorsqu'on veut omettre les lignes (M+1,M+2,...,M+J), on incrémente (incrément KG) sur la ligne M les numéros des noeuds NOD1 et NOD2 pour générer les éléments manquants. Il n'est pas possible de calculer le dernier élément du groupe.

b) Éléments bidimensionnels

Les éléments hydrauliques bidimensionnels (2D) sont des éléments plans à quatre sommets orientables à volonté dans le système global des coordonnées X-Y-Z. Chaque noeud de l'élément a pour degré de liberté sa pression nodale. Il est nécessaire de fournir, pour chaque groupe d'éléments composé d'éléments 2D, les indications suivantes :

- Section 1 Ligne de commande du groupe d'éléments
Cette ligne définit le type d'éléments hydrauliques 2D de ce groupe : linéarité ou non des éléments, nombre d'éléments, etc.
- Section 2 Ligne de données des caractéristiques des matériaux
On peut indiquer un nombre infini de caractéristiques de matériaux (chacune définissant les différentes constantes du matériau pour le modèle spécifique appliqué).
- Section 3 Lignes de données pour les éléments
Dans cette section, les éléments de ce groupe sont définis en indiquant leurs noeuds, leur épaisseur, etc.

1. Ligne de commande pour le groupe d'éléments (2014)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 4	NPAR(1)	Indiquer numéro "2" = bidimensionnel
	5 - 8	NPAR(2)	Nombre d'éléments 2D de ce groupe ; GE.1
(2)	9 - 12	NPAR(3)	Type d'analyse ; EQ.0 : analyse linéaire EQ.1 : analyse non linéaire
(3)	37 - 40	NPAR(10)	Degré d'intégration numérique utilisé dans la formulation gaussienne GE.2 et LE.3 ; valeur par défaut : "2"
(4)	53 - 56	NPAR(14)	définit le type de sortie pour les vitesses de Darcy
	57 - 60	NPAR(15)	Numéro du modèle de matériau ; GE 1 et LE 7 ; Valeur par défaut : "1" EQ.1 : perméabilité isotrope constante et coefficient d'emmagasinement spécifique constant EQ.2 : perméabilité orthotrope constante et coefficient d'emmagasinement spécifique constant

			EQ.3 : perméabilité isotrope non constante et coefficient d'emmagasinement spécifique constant
			EQ.4 : écoulement parallèle, distribution des épaisseurs (ouvertures) des fractures suivant une loi normale
			EQ.5 : écoulement parallèle, distribution des épaisseurs (ouvertures) des fractures suivant une loi log-normale
			EQ.6 : écoulement non parallèle, distribution des épaisseurs (ouvertures) des fractures suivant une loi normale
			EQ.7 : écoulement non parallèle, distribution des épaisseurs (ouvertures) des fractures suivant une loi log-normale
(5)	61 - 64	NPAR(16)	Nombre de sous-groupes de matériaux (mêmes caractéristiques) ; GE.1 ; Valeur par défaut : "1"

Remarque :

- (1) Les numéros des éléments hydrauliques 2D commencent par un et se terminent par le nombre total d'éléments de ce groupe, NPAR(2). Les données élémentaires figurent à la section 3 ci-dessous.
- (2) Le paramètre NPAR(3) détermine s'il s'agit d'un groupe d'éléments linéaires ou non. Le groupe d'éléments doit être non linéaire lorsque la perméabilité est fonction du nombre de Reynolds ou de la pression (donc lorsque NPAR(15). GE.3).
- (3) Un degré d'intégration "2" suffit pour les éléments à angle droit. Lorsque l'élément est déformé, il faut un degré d'intégration supérieur.
- (4) Dans chaque groupe d'éléments, on ne peut appliquer qu'un modèle de matériau, ce type de modèle est défini par la valeur NPAR(15). Les constantes de matériau qui correspondent au modèle de ce groupe d'éléments sont données à la section 2 ci-dessous.
- (5) La variable NPAR(16) définit le nombre de sous-groupes de caractéristiques du matériau donnés en section 2 ci-après.

2. Lignes de données pour les caractéristiques des matériaux

Les NPAR(16) sous-groupes doivent être saisis dans la même section. Bien que la ligne "a" (ligne du numéro de matériau) soit identique pour tous les modèles de matériau, les lignes "b" (lignes des caractéristiques du matériau) sont fonction du numéro correspondant au modèle de matériau (NPAR(15)).

a. Ligne du numéro de matériau (15)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 5	N	Numéro du matériau GE.1 et LE. NPAR(16)

b. Lignes des caractéristiques de matériaux

- Pour le MODELE "1" (NPAR(15).EQ.1) :

Ligne de perméabilité (F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 -10	PROPK(1,N)	Perméabilité (m/s)

Ligne du coefficient d'emmagasinement spécifique (F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	PROPS(1,N)	Coefficient d'emmagasinement spécifique S_0 (en m^{-1})
	11 - 15	ICONT	0 : par défaut type I de définition des éléments (lignes a et b du § 4: données pour les éléments) 1 : type II : une seule ligne de données par élément

Remarque :

- (1) Le MODELE "1" est un modèle préexistant, défini par un paramètre (k), permettant de préciser la perméabilité et par un paramètre (S_0) indiquant le coefficient d'emmagasinement spécifique.

- Pour le MODELE "2" (NPAR(15).EQ.2) :

Ligne de perméabilité (2F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	PROPK(1,N)	Perméabilité k_a du matériau dans la direction de a
(1)	11 - 20	PROPK(2,N)	Perméabilité k_b du matériau dans la direction de b

Ligne de coefficient d'emmagasinement spécifique (F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	PROPS(1,N)	Coefficient d'emmagasinement spécifique S_0
	11 - 15	ICONT	0 : par défaut type I de définition des éléments (lignes a et b du § 4: données pour les éléments)
			1 : type II : une seule ligne de données par élément

Remarque :

- (1) Le MODELE "2" est un modèle préexistant, défini par deux paramètres (k_a , k_b) permettant de spécifier la perméabilité et par un paramètre (S_0), indiquant le coefficient d'emmagasinement spécifique S_0 . Les paramètres (k_a , k_b) sont définis dans un système de coordonnées du matériau (a,b). Les axes a et b sont les axes principaux du matériau et l'angle β entre les axes a et X sera saisi individuellement pour chaque élément à la section 3 ci-après.

- Pour le MODELE "3" (NPAR(15).EQ.3) :

Ligne de perméabilité (3F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	PROPK(1,N)	Constante a dans l'exponentielle pour k
(1)	11 - 20	PROPK(2,N)	Constante b dans l'exponentielle pour k
(1)	21 - 30	PROPK(3,N)	Constante α dans l'exponentielle pour (grad p)

Ligne de coefficient d'emmagasinement spécifique (F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	PROPS(1,N)	Coefficient d'emmagasinement spécifique S_0
	11 - 15	ICONT	0 : par défaut type I de définition des éléments (lignes a et b du § 4 : données pour les éléments) 1 : type II : une seule ligne de données par élément

Remarque :

- (1) Le MODELE "3" est un modèle préexistant, défini par trois paramètres (a, b, α) permettant de spécifier la perméabilité et par un paramètre (S_0), indiquant le coefficient d'emmagasinement spécifique S_0 . Il repose sur une loi d'écoulement exprimée comme suit :

$$\underline{v} = - \underline{K} \cdot (\text{grad } p)^\alpha$$

où

$$\underline{K} = \begin{bmatrix} k_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & k_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & k_{zz} \end{bmatrix}, k_{ii} = 10^{-\left(a+b\left|\frac{\partial h}{\partial i}\right|\right)}$$

3. Lignes de données pour les vitesses de Darcy

Cette ligne est inutile si NPAR(14) = 0

Si non, la table des points de sortie des vitesses calculées doit être définie :

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
	1 - 5	ITABLE(1)	position 1 dans l'élément pour le calcul de la vitesse
... etc ...	41 - 45	ITABLE(9)	position 9 dans l'élément pour le calcul de la vitesse

4. Lignes de données pour les éléments

Les éléments NPAR(2) doivent être indiqués ou calculés dans cette section par ordre croissant en commençant par un "1".

Type I si ICONT=0 : Il faut préparer deux lignes pour chacun des éléments saisis.

Ligne 1 (5I5, 2F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 5	M	Numéro de l'élément hydraulique 2D ; GE. 1 et LE.NPAR(2)
	16 - 20	MTYP	Numéro du sous-groupe de matériaux ; GE.1 et LE. NPAR(16)
(1)	21 - 25	KG	Incrément permettant d'obtenir les numéros des noeuds raffinés ; EQ.0 : pas de raffinement
	26 - 35	BETA	Angle β du matériau (en degrés), appliqué en relation avec le Modèle "2".
(2)	36 - 45	THIC	Epaisseur ; GT.0.0

Ligne 2 (4I5)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(3)	1 - 5	NOD(1)	Numéro de noeud global du noeud élémentaire 1 ; GE.1 et LE. NUMNP
(3)	6 - 10	NOD(2)	Numéro de noeud global du noeud élémentaire 2 ; GE.1 et LE.NUMNP
(3)	11 - 15	NOD(3)	Numéro de noeud global du noeud élémentaire 3 ; GE.1 et LE.NUMNP
(3)	16 - 20	NOD(4)	Numéro de noeud global du noeud élémentaire 4 ; GE.1 et LE.NUMNP

Remarque :

- (1) Les éléments doivent être indiqués par ordre croissant des numéros en commençant par un et en terminant par NPAR(2). S'il n'est pas permis de répéter les numéros d'éléments, il est en revanche possible d'en sauter. Lorsqu'on veut omettre les lignes (M+1,M+2,...,M+J), on incrémente (incrément KG) sur la ligne M les numéros des noeuds NOD(1) à NOD(4) pour générer les éléments J manquants. Il n'est pas possible de calculer le dernier élément du groupe, il faut le définir complètement.
- (2) L'épaisseur des éléments doit être strictement positive (GT.0.0.).

- (3) Règles de numérotation des noeuds : Les éléments quadrilatéraux peuvent être dégénérés en des éléments triangulaires si on confond les noeuds 2 et 3. Les éléments à 4 noeuds servent à produire un triangle à gradients constants. On obtient cet élément dégénéré en appliquant le même numéro global aux deux noeuds angulaires de l'élément. **Il n'est pas permis d'identifier les noeuds locaux 1 et 2 ou 1 et 4 au même noeud global.**

Type II si ICONT=1 : Il ne faut préparer qu'une seule ligne pour chacun des éléments saisis.

Ligne de format (12I5, 2F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
	1 - 5	NOD(1)	Numéro de noeud global du noeud élémentaire 1 ; GE.1 et LE.NUMNP
	6 - 10	NOD(2)	Numéro de noeud global du noeud élémentaire 2 ; GE.1 et LE.NUMNP
	11 - 15	NOD(3)	Numéro de noeud global du noeud élémentaire 3 ; GE.1 et LE.NUMNP
	16 - 20	NOD(4)	Numéro de noeud global du noeud élémentaire 4 ; GE.1 et LE.NUMNP
si l'élément est initialement défini sous sa forme quadratique ou cubique ...	21 - 24	NOD(5)	Numéro de noeud global du noeud élémentaire 5 ; GE.1 et LE.NUMNP
... etc ...	57 - 60	NOD(12)	Numéro de noeud global du noeud élémentaire 12 ; GE.1 et LE.NUMNP
	61 - 70	BETA	Angle β du matériau (en degrés), appliqué en relation avec le Modèle "2".
	71 - 80	THIC	Epaisseur ; GT.0.0

c) Eléments tridimensionnels

Les éléments hydrauliques tridimensionnels (3D) sont des éléments à huit sommets orientables à volonté dans le système global des coordonnées X-Y-Z. Chaque noeud de l'élément a pour degré de liberté sa pression nodale.

Il est nécessaire de fournir, pour chaque groupe d'éléments composé d'éléments 3D, les indications suivantes :

- Section 1 Ligne de commande du groupe d'éléments.
Cette ligne définit le type d'éléments hydrauliques 3D de ce groupe, linéarité ou non des éléments, nombre d'éléments, etc.
- Section 2 Ligne de données des caractéristiques des matériaux.
On peut cependant indiquer un nombre infini de caractéristiques du matériau (chacune définissant les différentes constantes du matériau pour le modèle spécifique appliqué).
- Section 3 Lignes de données pour les éléments.
Dans cette section, les éléments de ce groupe sont définis en indiquant leurs noeuds, etc.

1. Ligne de commande pour le groupe d'éléments (2014)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 4	NPAR(1)	Indiquer numéro "3" = tridimensionnel
	5 - 8	NPAR(2)	Nombre d'éléments 3D de ce groupe ; GE.1
(2)	9 - 12	NPAR(3)	Type d'analyse ; EQ.0 : analyse linéaire EQ.1 : analyse non linéaire
(3)	37 - 40	NPAR(10)	Degré d'intégration numérique utilisé dans la formulation gaussienne GE.2 et LE.3 ; Valeur par défaut : "2"
(4)	53 - 56	NPAR(14)	defini le type de sortie pour les vitesses de Darcy
	57 - 60	NPAR(15)	Numéro du modèle de matériau ; GE 1 et LE 3 ; Valeur par défaut : "1" EQ.1 : perméabilité isotrope constante et coefficient d'emmagasinement spécifique constant

- EQ.2 : perméabilité orthotrope constante et coefficient d'emmagasinement spécifique constant
 EQ.3 : perméabilité isotrope non constante et coefficient d'emmagasinement spécifique constant
- (5) 61 - 64 NPAR(16) Nombre de sous-groupes de matériaux (mêmes caractéristiques) ;
 Valeur par défaut : "1"

Remarque :

- (1) Les numéros des éléments hydrauliques 3D commencent par un et se terminent par le nombre total d'éléments de ce groupe, NPAR(2). Les données élémentaires figurent à la section 3 ci-dessous.
- (2) Le paramètre NPAR(3) détermine s'il s'agit d'un groupe d'éléments linéaires ou non. Le groupe d'éléments doit être non linéaire lorsque la perméabilité est fonction de la pression (donc lorsque NPAR(15). EQ.3).
- (3) Un degré d'intégration "2" suffit pour les éléments à angle droit. Lorsque l'élément est déformé, il faut un degré d'intégration supérieur.
- (4) Dans chaque groupe d'éléments, on ne peut appliquer qu'un modèle de matériau, ce type de modèle est défini par la valeur NPAR(15). Les constantes de matériau qui correspondent au modèle de ce groupe d'éléments sont données à la section 2 ci-dessous.
- (5) La variable NPAR(16) définit le nombre d'ensembles de caractéristiques du matériau donnés en section 2 ci-après.

2. Lignes de données des caractéristiques des matériaux

Les ensembles de lignes NPAR(16) doivent être saisies dans la même section. Bien que la ligne "a" (ligne du numéro de matériau) soit identique pour tous les modèles de matériau, les lignes "b" (lignes des caractéristiques du matériau) sont fonction du numéro du modèle de matériau (NPAR(15)).

a. Ligne du numéro de matériau (15)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 5	N	Numéro du matériau GE.1 et LE. NPAR(16)

b. Lignes des caractéristiques de matériaux

- Pour le MODELE "1" (NPAR(15).EQ.1) :

Ligne de perméabilité (F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	PROPK(1,N)	Perméabilité (m/s)

Ligne des coefficients d'emmagasinement spécifiques (F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	PROPS(1,N)	Coefficient d'emmagasinement S_0 (en m^{-1})
	11 - 15	ICONT	0 : par défaut type I de définition des éléments (lignes a et b du § 4 : données pour les éléments) 1 : type II : une seule ligne de données par élément

Remarque :

- (1) Le MODELE "1" est un modèle préexistant, défini par une constante de paramètre (k), permettant de préciser la perméabilité et par une constante de paramètre (S_0) indiquant le coefficient d'emmaganisement spécifique.

- Pour le MODELE "2" (NPAR(15).EQ.2) :

Ligne de perméabilité (3F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	PROPK(1,N)	Perméabilité k_a du matériau dans la direction de a
(1)	11 - 20	PROPK(2,N)	Perméabilité k_b du matériau dans la direction de b
(1)	21 - 30	PROPK(3,N)	Perméabilité k_c du matériau dans la direction de c

Remarque :

- (1) Le MODELE "2" est un modèle préexistant, défini par trois constantes de paramètre (k_a , k_b , k_c) permettant de spécifier la perméabilité et par une constante de paramètre (S_0), indiquant le coefficient d'emmagasinement spécifique S_0 . Les constantes (k_a , k_b , k_c) sont définies dans un système de coordonnées du matériau (a, b, c) Les axes a, b et c sont les axes principaux du matériau définis ci-dessous.

Ligne d'orientation des axes pour ce matériau (4I5)

Lorsqu'une ligne vide est saisie, on suppose que tous les axes de ce matériau (a,b,c) recouvrent le système global de coordonnées cartésiennes X-Y-Z.

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 5	M	Numéro d'identification ; EQ.0 : direction globale EQ.1 : direction non globale
	6 - 10	NI	Numérotation nodale du point i
	11 - 15	NJ	Numérotation nodale du point j
	16 - 20	NK	Numérotation nodale du point k

Remarque :

- (1) Les orientations des axes orthotropes du matériau sont spécifiées par les trois numéros nodaux NI, NJ, NK. $\underline{f_1}$, $\underline{f_2}$ et $\underline{f_3}$ représentent les trois vecteurs orthogonaux qui définissent les axes de l'orthotropie du matériau pour k_a , k_b , et k_c . En reportant i, j et k pour les noeuds NI, NJ et NK, on obtient $\underline{f_1}$, $\underline{f_2}$ et $\underline{f_3}$

Ligne du coefficient d'emmagasinement spécifique (F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	PROPS(1,N)	Coefficient d'emmagasinement S_0
	11 - 15	ICONT	0 : par défaut type I de définition des éléments (lignes a et b du § 4: données pour les éléments) 1 : type II : une seule ligne de données par élément

Remarque :

- (1) Le MODELE "2" est un modèle préexistant, défini par trois constantes de paramètre ($\underline{f_1}$, $\underline{f_2}$ et $\underline{f_3}$), permettant de préciser la perméabilité et par une constante de paramètre (S_0) indiquant le coefficient d'emmaganissement spécifique.

- Pour le MODELE "3" (NPAR(15).EQ.3) :

Ligne de perméabilité (3F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	PROPK(1,N)	Constante a dans l'exponentielle pour k
(1)	11 - 20	PROPK(2,N)	Constante b dans l'exponentielle pour k
(1)	21 - 30	PROPK(3,N)	constante α dans l'exponentielle pour (grad p)

Ligne de coefficient d'emmagasinement spécifique (F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 10	PROPS(1,N)	Coefficient d'emmagasinement spécifique S_0
	11 - 15	ICONT	0 : par défaut type I de définition des éléments (lignes a et b du § 4: données pour les éléments) 1 : type II : une seule ligne de données par élément

Remarque :

- (1) Le MODELE "3" est un modèle préexistant, défini par trois constantes de paramètre (a,b, α) permettant de spécifier la perméabilité et par une constante de paramètre (S_0), indiquant le coefficient d'emmagasinement spécifique S_0 . Il repose sur une loi d'écoulement exprimée comme suit :

$$v = - \underline{K} \cdot (\text{grad } p)^\alpha$$

où

$$\underline{K} = \begin{bmatrix} k_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & k_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & k_{zz} \end{bmatrix}, k_{ii} = 10^{-\left(a+b\left|\frac{\partial h}{\partial x_i}\right|\right)}$$

3. Lignes de données pour les vitesses de Darcy

Cette ligne est inutile si NPAR(14) = 0

Si non, la table des points de sortie des vitesses calculées doit être définie :

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
	1 - 5	ITABLE(1)	position 1 dans l'élément pour le calcul de la vitesse
... etc ...			
	76 - 80	ITABLE(16)	position 16 dans l'élément pour le calcul de la vitesse

4. Lignes de données pour les éléments

Les éléments NPAR(2) doivent être indiqués ou calculés dans cette section par ordre croissant en commençant par un "1".

Type I si ICONT=0 : Il faut préparer deux lignes pour chacun des éléments saisis.

Ligne I (5I5, 2F10.0)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(1)	1 - 5	M	Numéro de l'élément hydraulique 3D ; GE. 1 et LE.NPAR(2)
	21 - 25	MTYP	Numéro de l'ensemble des caractéristiques du matériau ; GE.1 et LE. NPAR(16)
(1)	31 - 35	KG	Incrément permettant de calculer les noeuds des éléments manquants lors du raffinement ; EQ.0 : pas de raffinement.

Ligne 2 (8I5)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
(2)	1 - 5	NOD(1)	Numéro de noeud global du noeud élémentaire 1 ; GE.1 et LE. NUMNP
(2)	6 - 10	NOD(2)	Numéro de noeud global du noeud élémentaire 2 ; GE.1 et LE.NUMNP
(2)	11 - 15	NOD(3)	Numéro global de noeud du noeud élémentaire 3 ; GE.1 et LE.NUMNP
(2)	16 - 20	NOD(4)	Numéro global de noeud du noeud élémentaire 4 ; GE.1 et LE.NUMNP
(2)	21 - 25	NOD(5)	Numéro global de noeud du noeud élémentaire 5 ; GE.1 et LE.NUMNP
(2)	26 - 30	NOD(6)	Numéro global de noeud du noeud élémentaire 6 ; GE.1 et LE.NUMNP
(2)	31 - 35	NOD(7)	Numéro global de noeud du noeud élémentaire 7 ; GE.1 et LE.NUMNP
(2)	36 - 40	NOD(8)	Numéro global de noeud du noeud élémentaire 8 ; GE.1 et LE.NUMNP

Remarque :

- (1) Les éléments doivent être indiqués par ordre croissant des numéros en commençant par un et en terminant par NPAR(2). S'il n'est pas permis de répéter les numéros d'éléments, il est en revanche possible d'en sauter. Lorsqu'on ne définit pas les lignes correspondantes aux éléments (M+1,M+2,...,M+J), celles-ci sont calculées en appliquant le modèle MTYP de la ligne de l'élément M et en incrémentant (avec la valeur "KG") les numéros des noeuds des éléments successifs. La valeur "KG" utilisée pour cette incrémentation est lue sur la ligne M et les noeuds apparaissant sur cette ligne élémentaire M sont incrémentés. Il n'est pas possible de calculer le dernier élément du groupe, il faut le définir complètement.
- (2) Les éléments hexaédriques peuvent servir à produire des éléments prismatiques ou tétraédriques si on replie un côté ou une face de l'élément. On obtient ces éléments dégénérés en utilisant le même noeud global pour deux, trois ou quatre noeuds angulaires de l'élément.

Type II si ICONT=1 : Il ne faut préparer qu'une seule ligne pour chacun des éléments saisis.

Ligne de format (16I5)

Remarque	Colonne	Variable	Entrée
	1 - 5	NOD(1)	Numéro de noeud global du noeud élémentaire 1 ; GE.1 et LE.NUMNP
	6 - 10	NOD(2)	Numéro de noeud global du noeud élémentaire 2 ; GE.1 et LE.NUMNP
	11 - 15	NOD(3)	Numéro global de noeud du noeud élémentaire 3 ; GE.1 et LE.NUMNP
	16 - 20	NOD(4)	Numéro global de noeud du noeud élémentaire 4 ; GE.1 et LE.NUMNP
	21 - 25	NOD(5)	Numéro global de noeud du noeud élémentaire 5 ; GE.1 et LE.NUMNP
	26 - 30	NOD(6)	Numéro global de noeud du noeud élémentaire 6 ; GE.1 et LE.NUMNP
	31 - 35	NOD(7)	Numéro global de noeud du noeud élémentaire 7 ; GE.1 et LE.NUMNP

... etc ...

76- 80	NOD(16)	Numéro global de noeud du noeud élémentaire 16 ; GE.1 et LE.NUMNP
--------	---------	---

pour les deux types I et II, si les éléments sont initialement définis comme quadratiques ou cubiques, une autre ligne similaire de 16 noeuds (avec les noeuds 17 à 32) est nécessaire.

1.2.5. Définition des trajectoires : Points de départ

Le format d'entrée pour définir des points de départ de trajectoires calculées avec TAFFETAS est de deux types : soit une définition locale (système de coordonnées de l'élément de référence) soit une définition globale dans le système de coordonnées du modèle (système de l'utilisateur).

Dans les deux cas, chaque ligne de donnée du fichier .DAT ou .SMD (hydrodynamique) définit un et un seul point de départ pour une trajectoire. Toutes les trajectoires demandées sont donc définies par une liste de lignes de données à la fin de ce fichier.

a) Définitions locales

Il est parfois plus commode et plus précis de définir la position de départ, directement dans le système des coordonnées locales (ξ , η , ζ) de l'élément de référence, pour un élément donné.

Dans ce cas, la ligne de définition du point de départ comprend le numero de l'élément, et les coordonnées locales du points ($-1.<\xi<1.$, $-1.<\eta<1.$, $-1.<\zeta<1.$)

b) Définitions globales

En général, la position du point (X, Y, Z) de départ d'une trajectoire est simplement définie par ses coordonnées en 2D ou en 3D dans le modèle. Dans ce cas, la ligne de définition du point de départ comprend directement les coordonnées réelles du points (X, Y, Z) et, pour les modèles à double porosité, la dimension (2 ou 3) de l'élément cible.

Pour définir le point de départ (X, Y, Z) d'une trajectoire que l'on désire calculée à l'aide de TAFFETAS, il est nécessaire d'identifier la valeur des coordonnées locales (ξ , η , ζ) du point correspondant dans la transformation de l'élément contenant (X, Y, Z) vers l'élément de référence. Cependant, seule la transformation inverse est analytiquement définie. C'est pourquoi, il est nécessaire d'utiliser une procédure itérative qui converge vers l'identification de (ξ , η , ζ).

La procédure implémentée comporte donc les étapes suivantes :

- identification de l'élément E contenant le point P (X_p , Y_p , Z_p) en testant systématiquement les éléments :
 - Pour chaque face de chaque élément, on se pose la question d'algèbre vectoriel, suivante :
" Est-ce que (X_p , Y_p , Z_p) est situé du même côté de cette face que le centre de gravité de l'élément ?"
 - Après 6 réponses positives pour un élément 3D (6 faces de l'hexaèdre), ou après 4 réponses positives pour un élément 2D (4 côtés), l'élément E est identifié.
- recherche du point (ξ_p , η_p , ζ_p) dans l'élément E :
 - construction analytique de la transformation $(\xi, \eta, \zeta) \xrightarrow{t_E} (X, Y, Z)$
 - recherche de (ξ_p , η_p , ζ_p) par minimisation dans l'espace tridimensionnel de la distance algébrique entre (X_p , Y_p , Z_p) et $t_E (, ,)$:

$$(\xi_p, \eta_p, \zeta_p) = (\xi, \eta, \zeta) / \text{Min} \left[(X_p - t_E(\xi))^2 + (Y_p - t_E(\eta))^2 + (Z_p - t_E(\zeta))^2 \right]$$

La méthode utilisée pour minimiser cette fonction multidimensionnelle est celle des directions conjuguées de Powell (H. Press, 1989) qui présente l'avantage de ne pas nécessiter le calcul des dérivées de cette fonction suivant chaque dimension.

c) Pas de temps de départ en régime hydrodynamique transitoire

Pour retarder le départ de trajectoires en régime transitoire, on précisera de plus, pour chaque point de départ, la date du départ. De ce fait, plusieurs trajectoires peuvent être lancées à partir d'un même point, mais à des instants différents.

1.3. DONNEES DE TRANSPORT DE MASSE OU DE CHALEUR

1.3.1. Transport d'un soluté : Formats des données (fichier.TMX)

Le format d'entrée pour TAFFETAS est compatible avec ceux utilisés dans les modules TM, DM_Red et DM de ROCKFLOW.

Chaque type de données est défini par une "ligne". Chacune des lignes est présentée dans les paragraphes suivants :

A tout moment, il est possible de commenter un fichier de données (.TMD, .TM2, .TM3, etc., .TMT) en insérant des lignes de commentaires commençant par un "C" ou un "c" ou une "*" en première colonne (attention le signe * provoque l'impression écran du commentaire en cours d'exécution).

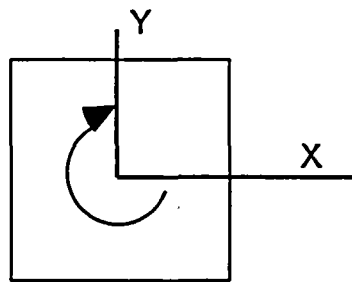
Ligne titre

Remarque	colonne	variable	entrée
	1-80	HED (80)	chaîne de 80 caractères : titre du problème, rappelé sur tous les fichiers résultats

Paramètres principaux de contrôle du problème

Remarque	colonne	variable	entrées
	1-5	I_FLAG	1 si pas de temps constants et 2 si pas de temps variables
	6-15	TSTART	temps au début de la résolution du problème de transport
(1)	16-20	NBCURV	nombre de fonctions du temps
(2)	21-25	RSTART	nouvelle simulation (0)
(3)	26-30	I-ADV-COR	indice de contrôle du correcteur (0: sans, 1:avec) pour l'advection
(4)	31-35	CHCK	indice de contrôle de la simulation: 0: normale 1: arrêt après lecture des données
(5)	36-40	VM	modèle de vitesse
(6)	46-55	TINT	Pas de temps pour les sorties graphiques
	56-60	N_PAR_ELE	nombre de particules par éléments dans le schéma équiréparti triangulaire (2D) ou tétraédrique (3D)
	61-65	LEISMANN	0: schéma de pondération temporelle Crank Nicolson 1: schéma modifié pour avoir une matrice symétrique: Leismann et Frind 1989
	66-70	I_TRACK	0: par défaut : méthode MOC 1: méthode Random Walk (Particle Tracking)

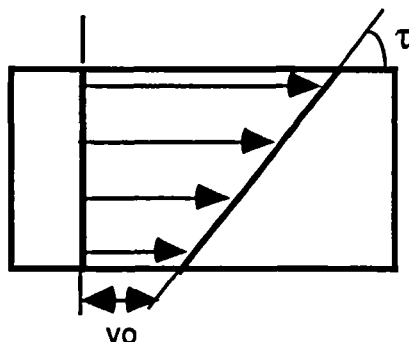
- (1) Nombre de courbes fonctions du temps nécessaires pour définir les conditions limites transitoires (exemple : pompages et injections).
- (2) Choix du type de simulation :
 RSTART : 0 : simulation normale
 RSTART : 1 : RESTART pour des simulations enchaînées dans le temps (au temps TSTART).
- (3) I-ADV-COR : indice de contrôle du terme correcteur de l'advection (0 : avec correction 1 : sans correction)
- (4) CHCK= 0 Simulation normale.
 Sinon, arrêt du calcul
- (5) • VM = 0 : le champ de vitesse résulte du calcul hydrodynamique précédent.
 • VM = 1 : le champ de vitesse est calculé analytiquement pour un écoulement en rotation autour d'un noeud donné.



ligne complémentaire :

colonne	variable	entrée
1-10	OMEGA	vitesse de rotation
11-15	NCENTRE	numéro du noeud central pour la rotation

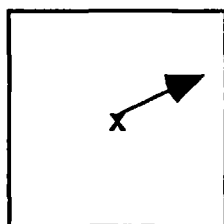
- VM = 2 : le champ de vitesse est calculé analytiquement pour un écoulement parallèle à X et croissant suivant Y :



Ligne complémentaire :

colonne	variable	entrée
1-10	V0	vitesse minimale (base de la progression linéaire)
11-20	TAU	Angle en degré définissant la progression des vitesses

- VM = 3 : vitesse constante dans tout le domaine modélisé.



Ligne complémentaire :

colonne	variable	entrée
1-10	VX	définition du vecteur vitesse constant dans tout le domaine
11-20	VY	
21-30	VZ	

- VM = 4 : vitesses calculées multipliées par C_X , C_Y , C_Z :

$$VX = VX * CX$$

$$VY = VY * CY$$

$$VZ = VZ * CZ$$

Ligne complémentaire :

colonne	variable	entrée
1-10	CX	Coefficients multiplicateurs des trois composantes de la vitesse
11-20	CY	
21-30	CZ	

- (6) TINT : Seuls les champs de concentration calculés aux instants TSTART + n * TINT pour tout "n" entier (n = 0,1, 2, ...) seront stockés sur le fichier des résultats (ceci permet de raffiner en temps sans produire des fichiers résultats énormes).
TINT 0. Par défaut, tous les pas de temps sont sauvegardés sur fichier.

Les pas de temps sont contrôlés par l'hydrodynamique. Les lignes A et B de définition des pas de temps (module TM de ROCKFLOW) ne sont donc plus utilisées, mais elles sont toujours lues pour rester compatibles avec ROCKFLOW :

Si I_FLAG = 1 : Ligne A

colonne	variable	entrée
1-5	N_DT	N_DT (> 0) est le nombre de pas de temps
6-15	DT	Incrément du pas de temps (DT > 0).

Si I_FLAG = 2 : Ligne B

B-1

colonne	variable	entrée
1-5	NPER	Nombre de périodes successives présentant des sous-divisions temporelles à pas constants.

B-2

colonne	variable	entrée
1-5	NSPER(1)	Nombre de pas de temps dans la première période
6-10	NSPER(2)	Nombre de pas de temps dans la deuxième période
...	NSPER(3)	Nombre de pas de temps dans la (NPER)ème période

B-3

colonne	variable	entrée
1-10	DTPER(1)	Incrément du pas de temps de la première période
11-20	DTPER(2)	Incrément du pas de temps de la deuxième période
...	DTPER(NPER)	Incrément du pas de temps de la "NPER"ème période

a) Définition des fonctions temporelles

Si NBCURV est nul, ne pas tenir compte de cette section.

Sinon, définir NBCURV fois les lignes 1, 2 et 3 ci-dessous : le triplet de ligne (1, 2, 3) définit une fonction du temps $f(t)$ pour les différentes conditions aux limites.

Ligne 1

colonne	variable	entrée
1-5	NPTS	Nombre de points pour définir cette fonction du temps

Ligne 2

colonne	variable	entrée
1-10	T_1	NPTS abscisses de cette fonction du temps
11-20	T_2	
...	T_I_CURV	

Ligne 3

colonne	variable	entrée
1-10	FT_1	NPTS ordonnées de cette fonction du temps
11-20	FT_2	
...	FT_I_CURV	

b) Simulation des conditions aux limites : ligne de contrôle

colonne	variable	entrée
1-5	NC(*)	Nombre de noeuds pour lesquels la concentration initiale (en début de période simulée) n'est pas égale à CDEF (hormis les noeuds à concentration imposée en fonction du temps : conditions limites). La concentration initiale des autres noeuds (NODE-NC-NR) est CDEF. En absence de concentrations initiales, NC = 0.
6-10	NR	Nombre de noeuds sur lesquels une condition limite du type concentration fonction du temps est imposée.
11-15	NQ	Nombre de noeuds à flux massique imposé.
16-25	THALB	Période de demi-vie pour les solutés radioactifs. Pour les solutés conservatifs, THALB = 0.0.
26-35	CDEF	Concentration initiale par défaut.

(*) Possibilités complémentaires pour des cas simples :

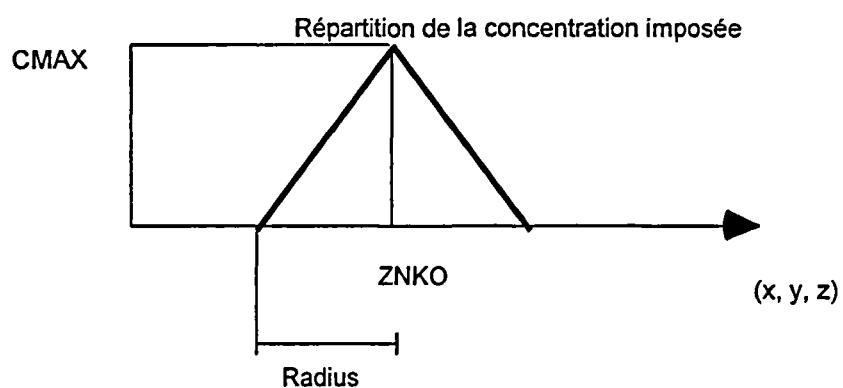
- NC = -1 concentration imposée suivant un schéma triangulaire.

Ligne A

colonne	variable	entrée
1-5	ZKNO	Numéro du noeud central (sommet du triangle)

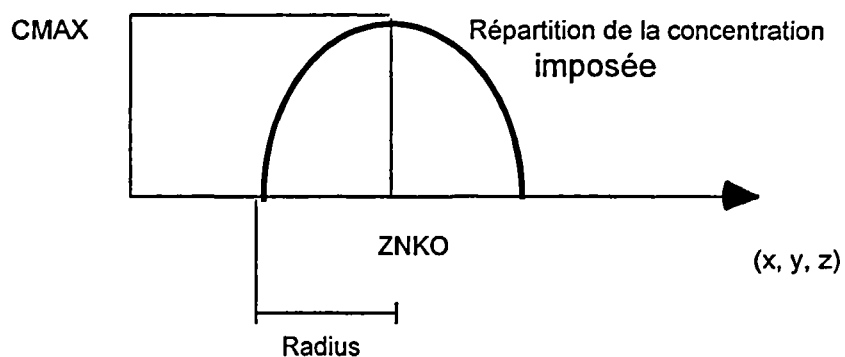
Ligne B

colonne	variable	entrée
1-10	CMAX	Concentration maximale au noeud ZKNO.
11-20	RADIUS	Demi-base du triangle.



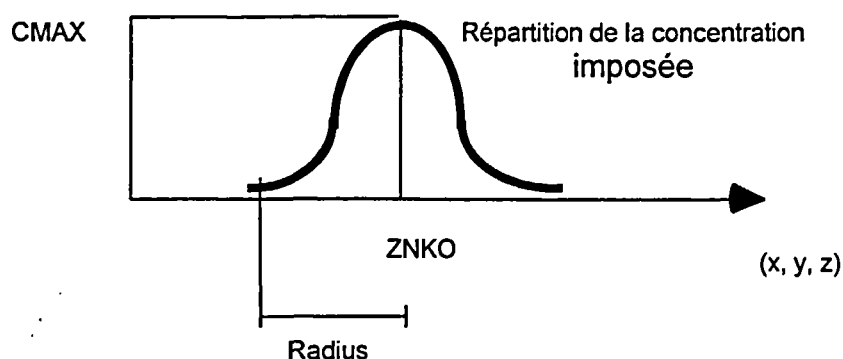
- NC = -2 concentration imposée suivant un schéma cubique

Lignes A et B : idem



- NC = -3 concentration imposée suivant un schéma Gauss normal

Lignes A et B : idem



- NC = -4 concentration imposée suivant un schéma Gauss normal avec diffusion pendant un Δt

Lignes A : idem

Ligne B

colonne	variable	entrée
1-10	CMAX	Concentration maximale au noeud ZKNO.
11-20	RADIUS	Demi-base
21-30	DIFFUSION	diffusion
31-40	DELTA_T	pas de temps : Δt

- NC = -5 concentration imposée suivant un schéma linéaire sphérique en 3D

Lignes A : idem

Ligne B

colonne	variable	entrée
1-10	CMAX	Concentration maximale au noeud ZKNO.
11-20	RADIUS	Demi-base

Conditions initiales

si NC = nombre total de noeud, alors possibilité de RESTART (RSTART=1).

sinon répéter NC fois la définition d'une condition initiale comme présentée ci-dessous :

• **si modèle conforme :**

colonne	variable	remarques	entrée
1-5	KN	(1)	Numéro du noeud à concentration initiale imposée
6-15	C0-INI		Concentration initiale au noeud KN
16-20	INCREMENT	(2)	Incrément de génération automatique de conditions limites de ce type entre deux noeuds définis. $KW_{i+1} = KN_i + INKR$ La concentration initiale est une concentration interpolée linéairement entre les deux noeuds connus

Remarques :

(1) si $KN < 0$ alors la concentration initiale est divisée par le volume d'influence du noeud

(2) si $INCREMENT > 0$ alors on ajoute une ligne de données avec

colonne	variable	remarques	entrée
1-5	KN2		Numéro du noeud à concentration initiale imposée
6-15	C2		Concentration initiale au noeud KN2

pour pouvoir générer automatiquement toutes les concentrations des noeuds compris entre KN et KN2 avec un pas de INCREMENT. Ces concentrations sont interpolées linéairement entre C0_INI et C2.

• **si modèle mixte :**

colonne	variable	remarques	entrée
1-10	C		Concentration initiale imposée à définir sur une face
11-15	N1		numéros des 2 ou 4 noeuds
16-20	N2		définissant la face sur laquelle la concentration est initialisée.
21-25	N3		
26-30	N4		

Conditions aux limites (en concentration)

Répéter NR fois la définition d'une concentration imposée comme décrit ci-dessous :

• **si modèle conforme :**

colonne	variable		entrée
1-5	KN		Numéro du noeud dont la concentration est imposée en fonction du temps.
6-10	N_CURVE		Numéro de la fonction du temps à prendre en compte. La concentration en fonction du temps est le produit du facteur C par l'ordonnée de cette fonction N_CURVE du temps.
11-20	C		Facteur de multiplication pour définir la concentration au noeud KN
21-25	INCREMENT	(1)	Incrément de génération automatique de conditions limites de ce type entre deux noeuds définis. $KW_{i+1} = KN_i + INKR$ La concentration imposée est une concentration interpolée linéairement entre les deux noeuds connus

Remarque :

(1) si INCREMENT > 0 alors on ajoute une ligne de données avec

colonne	variable	remarques	entrée
1-5	KN2		Numéro du noeud à concentration initiale imposée
11-20	C2		Concentration initiale au noeud KN2

pour pouvoir générer automatiquement toutes les concentrations des noeuds compris entre KN et KN2 avec un pas de INCREMENT. Ces concentrations sont interpolées linéairement entre C0_INI et C2.

• **si modèle mixte :**

colonne	variable	entrée
1-5	N_CURVE	Numéro de la fonction du temps à prendre en compte. La concentration en fonction du temps est le produit du facteur C par l'ordonnée de cette fonction N_CURVE du temps.
6-15	C	Facteur de multiplication pour définir la concentration imposée sur la face considérée
16-20	N1	numéros des 2 ou 4 noeuds définissant la face sur laquelle la concentration est imposée.
21-25	N2	
26-30	N3	
31-35	N4	
36-40	INCREMENT	Incrément de génération automatique de conditions limites de ce type entre deux faces. La concentration imposée est une concentration interpolée linéairement entre les deux faces connues

Flux massiques

Répéter NQ fois la définition d'un flux massique imposé comme décrit ci-dessous :

• **si modèle conforme :**

colonne	variable	entrée
1-5	KN	Numéro du noeud à débit non nul sur lequel est imposé un flux de masse.
6-10	N_CURVE	numéro de la fonction du temps.
11-20	Q	flux volumique nodal
21-30	CT	Concentration en soluté dans le flux volumique nodal (concentration imposée en KN)
31-35	INCREMENT (1)	Incrément de génération automatique des conditions limites de ce type entre deux noeuds définis. Si INCREMENT est supérieur à 0, CT est alors interpolé linéairement. $KN_{i+1} = KN_i + INKT$

Remarque :

(1) si INCREMENT > 0 alors on ajoute une ligne de données avec

colonne	variable	remarques	entrée
1-5	KN2		Numéro du noeud à concentration initiale imposée
11-20	C2		Concentration initiale au noeud KN2

pour pouvoir générer automatiquement toutes les concentrations des noeuds compris entre KN et KN2 avec un pas de INCREMENT. Ces concentrations sont interpolées linéairement entre C0_INI et C2.

• **si modèle mixte :**

colonne	variable	entrée
6-10	N_CURVE	numéro de la fonction du temps.
11-20	Q	flux volumique par cette face
21-30	CT	Concentration en soluté dans le flux volumique transitant par cette face (concentration imposée en KN)
31-35	N1	numéros des 2 ou 4 noeuds définissant la face au travers de laquelle le flux Q transitant à une concentration CT imposée.
36-40	N2	
41-45	N3	
46-50	N4	

c) Définition des matériaux

Un matériau est un groupe d'éléments présentant les mêmes propriétés hydrogéologiques (hydraulique et transport de soluté ou thermique).

• **Eléments 1D**

colonne	variable	entrée (TMD)	entrée (TMT)
1-10	POROSI	Porosité: ω	$\rho_w C_w$
11-15	ITYP	Type de modèle (*).	Type de modèle (*).
16-25	DISPER 1	Diffusion moléculaire D_m	λ_a
26-35	DISPER 2	Dispersion longitudinale α_L	(longitudinale) β_L
36-45	COE_KD	Coefficient de partage K_D	
46-55	TORTUO	Tortuosité (par défaut = 1).	
66-75	RHO_C_THERM		$\rho_{equi} C_{equi}$ du matériaux

• **Éléments 2D et 3D**

colonne	variable	entrée (TMD)	entrée (TMT)
1-10	POROSI	Porosité: ω	$\rho_w C_w$
11-15	ITYP	Type de modèle (*).	Type de modèle (*).
16-25	DISPER 1	Diffusion moléculaire D_m	λ_a
26-35	DISPER 2	Dispersion longitudinale α_L	(longitudinale) β_L
36-45	DISPER 3	Dispersion transversale α_T	(transversale) β_L
46-55	COE_KD	Coefficient de partage K_D	
56-65	TORTUO	Tortuosité (par défaut = 1).	
66-75	RHO_C_THERM		$\rho_{equi} C_{equi}$ du matériaux

(*) les trois types de modèles de transport sont :

ITYP = 1 diffusion pure
 $D = DISPER1$
 $DISPER2 = 0$
 $DISPER3 = 0$

ITYP = 2 dispersion pure
 $DISPER1 = 0$
 $DISPER2 = \alpha_L$
 $DISPER3 = \alpha_T$

ITYP = 3 diffusion et dispersion (modèle COMPLET de SCHEIDEGGER 1+2).

1.3.2. Transport de plusieurs solutés

Pour réaliser le transport de plusieurs solutés, il faut :

1. Générer les fichiers de data .TMD (pour le premier composant) et .TM2 .TM3 etc ... (respectivement pour les composants 2 3 etc...) identiques au fichier .TMD présenté au paragraphe 1.3.1. précédant.
2. Définir le nombre de composants à prendre en compte dans le fichier projet (clique PROJET puis MODIFICATION d'un projet).

Et c'est tout !

N.B. : les concentrations sont en unité de masse (quelconque) par m^3 .

1.3.3. Transport de chaleur

Pour réaliser un transport de chaleur, il faut :

1. Générer le fichier de data .TMT (T pour thermique ou température) identique au fichier .TMD présenté au paragraphe 1.3.1. précédant, aux équivalences près des paramètres élémentaires (diffusivité thermique, etc...) et en considérant comme variable la température et non plus une concentration.
2. Imposer la prise en compte de la thermique grace au paramètre de contrôle du fichier projet PROJET.NOM, créé puis modifié à l'aide des cliques 'PROJET' puis 'MODIFICATION d'un projet' dans le pré-processeur.

Et c'est tout !

1.4. FICHIERS SUPPLEMENTAIRES POUR LE COUPLAGE TRANSPORT-GEOCHIMIE

Les concentrations en éléments dans la phase liquide sont décrites dans les fichiers de transport de type NOMPROJ.TMx où $x = D, 2, 3, \dots, N$ pour N composants (cf § 1.3.1 et 1.3.2) ; il faut simplement veiller à ce que les valeurs soient entrées en unité de masse (quelconque) par m^3 .

Les concentrations initiales en espèces dans la phase solide sont lues dans le fichier NOMPROJ.SCS de la façon suivante :

- si le paramètre ISOLEC_CHM = 0 dans le fichier PROJET.NOM (cf § 1.1), on lit 10 valeurs de concentration par groupe d'éléments (format 10F10.0, une valeur par espèce, une ligne par groupe) ;
- sinon, on lit une ligne de 10 valeurs par élément.

Ce fichier doit commencer par une ligne titre débutant par un astérisque.

Le fichier NOMPROJ.NTX contient des paramètres propres au simulateur NEPTUNIX, il est livré par le créateur du simulateur et comporte toujours 12 lignes de paramètres (un par ligne) ; il faut le faire précéder d'une ligne titre débutant par un astérisque. Ce fichier est ignoré par les simulateurs analytiques.

Le fichier NOMPROJ.PCH contient des paramètres propres au problème chimique traité, il est également livré par le créateur du simulateur et comporte un nombre variable de lignes de paramètres (un paramètre par ligne) ; il faut également le faire précéder d'une ligne titre débutant par un astérisque.

Exemple de fichier .PCH

* PARAMETRES INTRINSEQUES NEPTUNIX POUR LE CIMENT

1	NXHMIN_CHM	=	1E-8
2	NXHMAX_CHM	=	1E-2
3	NXHDEM_CHM	=	1E-3
4	NXTMIN_CHM	=	0.
5	NXTMAX_CHM	=	10.
6	NXEREL_CHM	=	1E-03
7	PERIODE_CHM	=	0E+00
8	EXACTE_CHM	=	0
9	INIT_CHM	=	0
10	EXEX_CHM	=	1
11	IEQ	=	1
12	INUTILISE	=	0.

Exemple de fichier .NTX

* PARAMETES CHIMIQUES SPECIFIQUES NEPTUNIX POUR LE CIMENT

13	CONSD1_CHM	=	0.1
14	CONSP1_CHM	=	0.1
15	CONSD2_CHM	=	5E-3
16	CONSP2_CHM	=	5E-3
17	DEBS1_CHM	=	0.45
18	DEBS2_CHM	=	0.45
19	DEBL_CHM	=	3E-03
20	ARP_CHM	=	5.
21	EPS99_CHM....	=	...1E-10
22	MINI_CHM	=	1E-35

2. Convergence des différents solveurs disponibles dans TAFFETAS

(Méthodes de résolution itérative des matrices creuses)

- **Le solveur par défaut est :**

IMET = 0 qui est une méthode itérative du gradient conjugué avec un préconditionnement de Choleski par défaut de niveau 2 (NIV_FLOW = 0).

Qualité de la convergence : contrôler que le préconditionnement n'altère pas la matrice. Pour ce faire, vérifier dans le fichier .RES l'absence de message de type :

"pivot nul ou négatif ligne NNN. le pivot précédant est pris à la place".

Dans le cas contraire, diminuer le niveau de préconditionnement pour ne plus avoir de tels messages (NIV_FLOW = -1 ou NIV_FLOW = -2). Si les messages persistent avec NIV_FLOW = -2, alors il y a obligatoirement une erreur dans votre maillage. (voir alors des messages du type "matrice locale 2D ou 3D non inversible" résultant souvent d'une numérotation croisée des noeuds sommets de l'élément).

- **Les autres solveurs itératifs**

IMET = 1 (si plus de 1000 noeuds) qui est une méthode de gradient biconjugué stabilisé ;

IMET = 3 qui est une autre méthode des gradients conjugués (sans préconditionnement).

Qualité de la convergence : contrôler que la précision requise est atteinte. Dans le cas contraire, le message suivant apparaît :

"erreur dans { BIGGSTAB : précision : info = 1"
CONJGRAD

3. Informations sur l'implémentation de TAFFETAS

3.1. STRUCTURE DU PROGRAMME

TAFFETAS est constitué de 15 librairies thématiques (16 si couplage transport-chimie) :

- FLOWlib pour les écoulements,
- MASSlib pour le transport CFEM,
- MHMlib pour le transport MOC avec MHFEM,
- RWPTlib pour le transport avec Random Walk,
- PATHlib pour les trajectoires,
- MULPlib pour le multi-phasique,
- SOLVlib pour les solveurs de systèmes linéaires,
- COUPlib pour les couplages implicite,
- CONDLlib pour le conditionnement des matrices,
- OPTlib pour le calage automatique des paramètres,
- ADAPlib pour les maillages auto-adaptatifs,
- CHIMlib pour le couplage avec la chimie,
- READlib : lecture de toutes les données,
- UTILlib contenant les utilitaires,
- TAFFlib la routine principale,

et un petit programme principal : TAFF.F90.

La 16ème librairie qui est dénommée d'après le problème traité (ex. CIMENT) contient des modules d'interfaçage avec NEPTUNIX pour le problème chimique considéré (programme dédié).

3.2. FORTRAN 90

Les principaux atouts du FORTRAN 90 comme langage de programmation sont :

- l'allocation dynamique de la mémoire,
- des noms de variables jusqu'à 32 caractères,
- des paramètres facultatifs en appel des routines et une définition externe des interfaces des modules,
- plusieurs ordres par lignes, et pas de limitation à la 72ème colonne,
- la mise en commentaire des fins de lignes,
- l'interrogation directe des paramètres d'état du système : fichier ouvert ou non, tableau alloué ou non, paramètre présent ou non ... etc.

Les compilateurs disponibles actuellement sont :

- le LF90 de LAHEY sous DOS (PC),
- le F90 de digital sur station OPEN-VMS alpha,
- le F90 de digital sur station UNIX (ferme de 6 alphas de DR/HGT).

3.3. CODE DES CHAMPS

Les différents codes de champs utilisés dans le programme pour identifier les champs sont:

- | | |
|-----------------------------------|---|
| • 0 : charge | 100 : moyenne des charges, |
| • 1 : première concentration | 99 : moyenne des concentrations, |
| • 2 : pression | 97 : moyenne des pressions, |
| • 3 : température | 98 : moyenne des températures, |
| • 4 : densité | 96 : moyenne des densités, |
| • 5 : flux nodaux | 95 : moyenne des flux nodaux, |
| • 6 : bilans résiduels nodaux | 94 : moyenne des bilans résiduels nodaux, |
| • 7 : flux massiques | 93 : moyenne des flux massiques, |
| • 8 : viscosité | 92 : moyenne des viscosités, |
| • 11 à 18 : autres concentrations | 101 à 108 : moyenne des concentrations. |

Ces codes sont utilisés dans le fichier de définition des historiques (de type .HIS) tel que celui donné en exemple ci-après :

```

Exemple de fichier .HIS
C
C list of the nodes to follow (historic)
C
C flow
C
C 1 0
C 17 0
C
C 818 0
C 834 0
C
C transport heat
C
C 1 3
C 17 3
C
C 818 3
C 834 3
C
C bilan au puit en masse
C
C numb. K1 K2 DK K1 K2 DK K1 K2 DK K1 K2 DK
C / / / / / / / / / / / / /
C
C pressure
C 100 1 1 17 1
C 100 1 18 34 1
C 100 1 35 51 1
C 100 1 818 834 1
C
C mass
C 99 1 818 834 1
C
C heat
C 98 1 1 17 1
C 98 1 18 34 1
C 98 1 35 51 1
C 98 1 818 834 1
    
```

Dans cet exemple, on lit :

- soit un champ "simple" (0 pour charge, 3 pour température) précédé du numéro de noeud (1, 17, 818, 834 en lignes 1 à 8 de l'exemple) ;
- soit un champ "moyenné" (par exemple la 9e ligne de donnée indique qu'on veut la moyenne des charges (100) sur les noeuds 1 à 17).

3.4. CONTENUS DES LIBRAIRIES

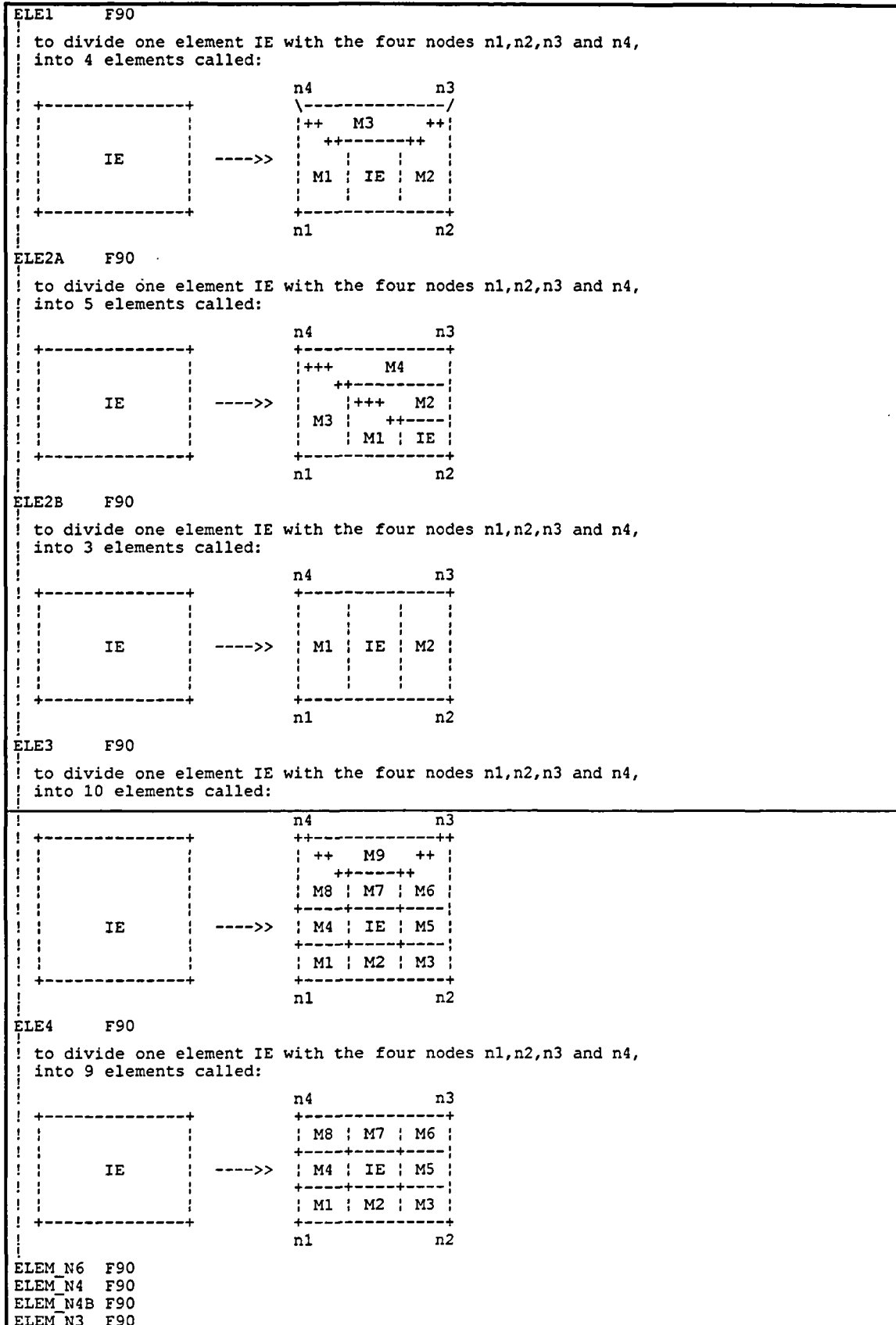
Les 15 bibliothèques constituant le code de TAFFETAS contiennent les routines suivantes :

The directory <code>taff_lib</code> contains the FORTRAN 90 code file concerning the main TAFFETAS program	
TAFFETAS F90 : main module with	
	* table allocations
	* main time loop
	* main iterative PICARD loop for the unlinear processes
	* self-adaptive loop for the meshes
the library <code>COUP_LIB</code> contains the F90 files concerning the COUPLED phenomena:	
DENSITY.F90	: the DENSITY computation as a function of temperature and salinity
VISCOSI.F90	: the VISCOSITY computation as a function of pressure, temperature and salinity
CONVERGE.F90	: the CONVERGENCE criteria evaluation during the iterative process of coupling
COUPCOMP.F90	: the COUPled COMPUted fields
The directory <code>FLOW_LIB</code> contains the FORTRAN 90 code files concerning the FLOW simulations	
MAKEFLOW F90	MAKE FLOW: MAKE the FLOW modelling
Conforming method	
BUIELE F90	BUILD the ELEmentary matrix in the conform method
BUILCONF F90	BUILD CONFORME MATRIX: BUILD the CONFORME MATRIX by calling BUIELE
BRHSSOLV F90	BUILD RHS AND SOLVE is used :
	TO BUILD THE Right Hand Side ---> subroutine BUIELE
	TO TREAT THE H boundary conditions ---> subroutine BOUN_H_1 or BOUN H 2
	TO TREAT THE Q boundary conditions ---> subroutine BOUN Q
	TO DO THE EQUATION SYSTEM RESOLUTION ---> subroutine GAUSSM or GCSOLV

Mixed Hybrid method		
BUIMIX F90	BUILD MIXTE MATRIX: BUILD the MIXTE hibrised MATRIX in BB	
BUIRHSMI F90	BUILD_RHS_MIXTE: BUILD the Right Hand Side for the MIXTE method and solve the matrix system	
	is used :	
	TO TREAT THE H boundary conditions	
	TO TREAT THE Q boundary conditions	
	TO DO THE EQUATION SYSTEM RESOLUTION ---> subroutine GAUSSM or GCSOLV	
ASSEMBMI F90	ASSEMBLING MIXTE: ASSEMBLING the MIXTE matrix	
	matrix 'ASSEMBlage' for MIXte hybride method	
HEAMEFLU F90	HEAD_MEAN_AND_FLUX: compute the element MEAN HEAD and the faces FLUX	
	boundary conditions	
BOUN Q F90	BOUNDary conditions of fixed flux Q	
BOUN H 1 F90	BOUNDary conditions of fixed Head method 1	
BOUN_H_2 F90	BOUNDary conditions of fixed Head method 2	
	velocity treatments	
VELOCOUT F90	VELOC1 OUTPUT:	
VELO2OUT F90	VELOC2 OUTPUT:	
VEL_FIEL F90	VEL_FIEL_LOCAL: each flux FLUNEI is divided by the side area to compute a velocity (in FLUNEI)	
VEL_FIE2 F90	VEL_FIE2 LOCAL:	
VEL_FIE3 F90	VEL_FIE3 LOCAL:	
The directory MASS_LIB contains the FORTRAN 90 code files concerning the CONFORMING FINITE ELEMENT TRANSPORT METHOD		
MAKETRAN F90	MAKE TRANSPORT: to MAKE the TRANSPORT modelling (conforming F.E.)	
BUI_TRAN F90	BUILD TRANSPORT: to BUILD the TRANSPORT elementary matrix	
BOUN C 2 F90	BOUN C 2: BOUNDary conditions of fixed Concentration: method 2	
VELO2D F90	VELO 2D: compute the VELOCity in a 2D element	
VELO3D F90	VELO 3D: compute the VELOCity in a 3D element	
ANALVELO F90	ANALYTIC_VELOC: to read the ANALYTICAL VELOCITY definition	
The directory mhmc_lib contains the FORTRAN 90 code files concerning the mixed and hybrid M.O.C.		
MAKE_MOC F90	: to make M.O.C. transport	
GENE_MOC F90	: to generate the particles to GENERate all the particles in the MOC or regenerate someones as a function of previous TRACOL computed trace face concentrations	
MOVE_MOC F90	: to move all the particles (advection only) in the MOC transport	
ELEMCONC F90	: to compute the element mean concentration ELEM_CONC to compute the element concentration after the particle advection then initialise TRACOL (by face) and CONINI (by element)	
MIXTCONC F90	: to do the mixte transport (dispersion and diffusion): the results are the concentrations MIXT_CONC to compute the diffusion and dispersion by MIXTe hybrid method with the trace faces unknown	
BUIMICON F90	: to build the mixt concentration : CONC BUILD MIXTE	
ASSMICON F90	: to assemble the mixte matrix : CONC_ASSEMBLING_MIXTE matrix 'ASSEMBlage' for MIXte hybride method : transport concentration ELEMENT MATRIX IN SPARSE STORAGE DEFINITION at the end there are: IPCMAX values in AK NFACEs+1 index values in IPL IPCMAX index values in IPC for a position "a","b" in the matrix: the non zero values of line "a" are in AK(IPL(a)+1) to AK(IPL(a+1)) with column b = IPC()	
CONCMEAN F90	: to compute the mean concentration by side : CONC MEAN : Conc Mean on the element and FLux through each face	

The directory mulp_lib contains the FORTRAN 90 code files concerning the MULti-Phases flow process	
MULT PHA F90	: not yet implemented
RHAND F90	
RHAND2P F90	
SATKR2 F90	
SATUR F90	
SOLVE F90	
HCNCTINF F90	
KOEFF F90	
KOEFF2P F90	
KRELATIF F90	
OPENFILE F90	
PROUT F90	
FLOW F90	
FLOWPATH F90	
FLOWRATE F90	
CAPAKR2 F90	
ASSEM F90	
STRUC F90	
READ F90	
The directory OPTI_LIB contains the FORTRAN 90 code files concerning the automatic parameter calibration	
OPTI TAF F90	OPTimisation of parameters in TAffetas: automatic calibration
SOLVER F90	open OPTIPARA.USE and call TAffETA2
ECRIFI F90	write in file
CRITER F90	criteria of Newton's method
The directory path_lib contains the FORTRAN 90 code files concerning the pathlines computations	
PATHLINE F90	PATHLINES: pathlines computation
END POSI F90	END POSITION COMPUTING: out or end position computing
OUT TIME F90	OUT TIME COMPUTING: out time computing
TRAN_L_G F90	TRANSFO_LOCAL_IN_GLOBAL: transformation local (reference) ----> global (reference)
CHANGLOC F90	CHANGE LOCAL COORDINATES:
LOOK_OUT F90	LOOK FOR OUT SIDE: look for the current particle the out side number in the current element
LOCAL VE F90	LOCAL VELOCITY:
the library READ_LIB contains the FORTRAN 90 files concerning the READING of data files	
READATFL F90	READ DATA FLOW: to READ the DATA of the FLOW model
INIGRI F90	INITIALISATION of flow model with specific data file
NEWGRI F90	NEW regular GRId flow model
READTIME F90	READ DATA TIME: to READ the general DATA and the time modelling DATA
READDATT F90	READ DATA TRANSPORT: to READ the DATA of the TRANSPORT model
READPATH F90	READ PATHLINES: to read the pathlines
The directory rwpt_lib contains the FORTRAN 90 code files concerning the Random Walk Particle Tracking	
RAN WALK F90	RANDOM WALK:
PARTRACK F90	PARTICLES TRACKING:
FACECONC F90	FACE CONC: FACES CONCentration
RANDNORM F90	RAND NORM: GENERATE A RANDOM NUMNBER BETWEEN -6 AND +6 with a NORMAL DISTRIBUTION, with a first moment of 0. and a second of 1

The directory SOLV_LIB contains the FORTRAN 90 code sources for the solution of linear algebraic equation systems		
GAUSSM	F90	TO DO THE EQUATION SYSTEM RESOLUTION : method = Gauss' pivoting this is a very COARSE METHOD with LIMITING STORAGE
GCSOLV	F90	solve a linear system using a preconditionned conjugate gradient algorithm
BICGSTAB	F90	Bi-conjugate stabilized solver for the unsymmetrical sparse matrix
BICG LIB	F90	Iterative template routine
PSOLVE	F90	to perform the preconditioner solve routine for the linear system
PRECON	F90	preconditionner
MATVEC	F90	matrix-vector product: $y := \alpha * A * x + \beta * y$
The directory COND_LIB contains the FORTRAN 90 code files concerning the CONDITIONNING of matrix		
Conforming method		
PHFOSC	F90	PHFORM: form function PHI and associated gradient
CONDCONF	F90	CONDITION CONFORM SPARSE MATRIX: CONDITIONning the CONFORMing SPARSE MATRIX
CRENELFA	F90	CREate connectivity table NELFAC element/faces
MIXed Hybrid method		
PHFOVE	F90	FORVEC: FORM VECTORIAL function in the vector FORMVE
CONDITMI	F90	CONDITION MIXTE SPARSE MATRIX: CONDITIONning the MIXTE SPARSE MATRIX conditionning in sparse structure with 2 pointers
CREMIX	F90	to CREate the MIXte faces of the elements
MIXT2D3D	F90	MIXT2D3D to link the 2D and 3D elements for mixed hybrid method
general finite element		
VOL_PATC	F90	volume of a 2D triangular patch along a side in 2D or volume of a 3D tetraedric patch along a side in 3D
SIZELE	F90	SIZE of each kind of ELEMENT = number of nodes
The library ADAP_LIB contains the following FORTRAN 90 source files:		
AUTOGENE.F90	AUTO_GENER_NODES_QC: AUTOMATIC GEneration of nodes for partial quadratic ,partial cubic and complete quadratic element	
EXISTN .F90	test if a Node EXISTe, and else added it in the model	
ADDELE2D.F90	method 1: added new elements (and new nodes) in 2D only	
ADD2LE2D F90	method 2: added new elements (and new nodes) in 1D and 2D only (without 3D case)	
ADDEDNOD F90	test if a Node EXISTe, and else added it in the model	
COMPADDE.F90	to complete the added new elements (and new nodes) in 2D only	
CRITADAP F90	CRITER_ADAPTIV: compute the maximum gradient of VARIAB by element in GRAELE compute the maximum decil for neighbour gradient DECMX	
CRI2ADAP F90	CRITE2_ADAPTIV: compute the maximum gradient of VARIAB by element in GRAELE compute the maximum decil for neighbour gradient DECMX	
LAPLAC2D F90	smoothing of the 2-dimensionnal elements in a mesh	



69

3.5. ORGANISATION DES TABLEAUX DANS TAFFETAS

Les tableaux dans le source de code TAFFETAS sont :

nom	:	type	:	affectation	:	taille	:	organisation
AK	:	DOUBLE PRECISION	:		:	NONOMX	:	matrice triangle
BB	:	DOUBLE PRECISION	:		:	NONOMX+36*NELEMX:	:	creux inferieure
	:		:	si mixte hybride = matrice BB	:		:	
	:		:	si non matrice de sauvegarde des matrices elementaires	:		:	
	:		:	(elements conformes) lors du transport de ...	:		:	
BK	:	DOUBLE PRECISION	:		:	NONOMX	:	matrice triangle
	:		:		:		:	creux superieure
CENFAC	:	DOUBLE PRECISION	:	facial	:	NFACMX*3	:	3 coordonnees du
	:		:		:		:	centre de la face
CFIX	:	DOUBLE PRECISION	:	noeud OU face:	:	MAX (NODEMX,NFACMX)*NCOMPOMX	:	concentration imposée
	:		:		:		:	nodemx fois pour le composant 1
	:		:		:		:	+ nodemx fois pour le composant 2
	:		:		:		:	etc ...
CMAS_PARH	:	DOUBLE PRECISION	:	particules	:	NPARTMX	:	vecteur de la
	:		:	de chaleur	:		:	temperature
CMAS_PART	:	DOUBLE PRECISION	:	particules	:	NPARTMX*NCOMPOMX:	:	vecteur des
	:		:	de masse	:		:	masses
CONINI	:	DOUBLE PRECISION	:	nodale	:	NODEMX*NCOMPOMX	:	concentration
	:		:		:		:	initiale
	:		:		:		:	nodemx fois pour le composant 1
	:		:		:		:	+ nodemx fois pour le composant 2
	:		:		:		:	etc ...
CO_COM	:	DOUBLE PRECISION	:	nodale	:	NODEMX*NCOMPOMX	:	concentration
	:		:		:		:	calculee
	:		:		:		:	nodemx fois pour le composant 1
	:		:		:		:	+ nodemx fois pour le composant 2
	:		:		:		:	etc ...
DEBITS	:	DOUBLE PRECISION	:	nodale	:	NODEMX	:	debit
DENSIT	:	DOUBLE PRECISION	:	nodale	:	NODEMX	:	densite
DISPER	:	DOUBLE PRECISION	:	elementaire	:	NELEMX*3	:	3 valeurs
	:		:		:		:	1 : diffusion molec.
	:		:		:		:	2 : disper. longitu.
	:		:		:		:	3 : disper. transve.
DISPET	:	DOUBLE PRECISION	:	elementaire	:	NELEMX*3	:	idem thermique
DTPER	:	DOUBLE PRECISION	:	pas de temps:	:	MAXPER	:	periodes de temps
	:		:		:		:	= pas de calcul
DTPER_TRA	:	DOUBLE PRECISION	:	pas de temps:	:	MAXPER	:	periodes de temps
	:		:		:		:	idem (transport)
EMAGEL	:	DOUBLE PRECISION	:	elementaire	:	NELEMX	:	emmagasinement
FACVOL	:	DOUBLE PRECISION	:	facial	:	NFACMX*2	:	volume des 2
	:		:		:		:	patches par face
	:		:		:		:	(2 volumes)
FLUELE	:	DOUBLE PRECISION	:	elementaire	:	NELEMX	:	flux dans l'elem.
FLUELEQ	:	DOUBLE PRECISION	:	elementaire	:	NELEMX	:	flux massique elem.
FLUFAC	:	DOUBLE PRECISION	:	facial	:	NFACMX	:	flux face: fluide
FLUCAC	:	DOUBLE PRECISION	:	facial	:	NFACMX	:	flux face: masse
FLUTAC	:	DOUBLE PRECISION	:	facial	:	NFACMX	:	flux face:chaleur
FLUNEI	:	DOUBLE PRECISION	:	elementaire	:	NELEMX*6	:	6 flux a travers
	:		:		:		:	les 6 faces de
	:		:		:		:	l'element
GAUSPT	:	DOUBLE PRECISION	:	///	:	(3,2)	:	points de gauss
GRAELE	:	DOUBLE PRECISION	:	elementaire	:	NELEMX*(NCOMPOMX+1)*NEDGMX	:	: gradient elementaire
	:		:		:		:	Self-adaptive method
HEAINI	:	DOUBLE PRECISION	:	nodale	:	NODEMX	:	charge initiale
HEACOM	:	DOUBLE PRECISION	:	nodale	:	NODEMX	:	charge calculee
HFIX	:	DOUBLE PRECISION	:	noeud OU face:	:	NODEMX / NFACMX:	:	charge imposee
HISTOR	:	DOUBLE PRECISION	:	noeud OU face:	:	NHISMX,NTHIMX	:	ou chroniques
IEL_PARH	:	INTEGER	:	particules	:	NPARTMX	:	element contenant
	:		:	de chaleur	:		:	la particule

IEL_PART	: INTEGER	: particules	: NPARTMX	: element contenant
	:	: de masse	:	: la particule
IFACEL	: INTEGER	: facial	: NFACMX*2	: connectivite :
	:	:	:	: faces--> elements
	:	:	:	: (2 elements)
IFLUEL	: INTEGER	: elementaire	: NELEMX	: numero des fonctions
	:	:	:	: du temps pour FLUELE
IGROEL	: INTEGER	: elementaire	: NELEMX	: numero du groupe
	:	:	:	: d'element
INI_NELE	: INTEGER	: elementaire	: NELEMX*NOELMX	: liste initiale des
	:	:	:	: noeuds (si adaptatif)
IPC	: INTEGER	:	: NONOMX	: pointeur colonne
IPGRAF	: INTEGER	: pas de temps	: NPGRAF	: sorties grafiques
IPL	: INTEGER	:	: NODEMX+1	: pointeur ligne
IPNODE	: INTEGER	: ///	: 16*2	: controle outputs
ITYPEL	: INTEGER	: elementaire	: NELEMX	: type d'element
	:	:	:	: 1:1D/ 2:2D/ 3:3D
JCFIX	: INTEGER	:noeud OU face:	MAX(NODEMX,NFACMX)*NCOMPOMX	
	:	:	:	: indices des noeuds à concentr. imposée
	:	:	:	: nodemx fois pour le composant 1
	:	:	:	: + nodemx fois pour le composant 2
	:	:	:	: etc ...
JHEFIX	: INTEGER	: facial	: NFACMX*4	: 4 noeuds pour
	:	:	:	: definir une face
	:	:	:	: a charge imposee
JHFIX	: INTEGER	:noeud OU face:	MAX(NODEMX,NFACMX)	
	:	:	:	: indice des noeuds à charge imposée
	:	:	:	: nodemx fois pour le composant 1
	:	:	:	: + nodemx fois pour le composant 2
	:	:	:	: etc ...
JQCFIX	: INTEGER	:noeud OU face:	MAX(NODEMX,NFACMX)*NCOMPOMX	
	:	:	:	: indices des noeuds à débit massique
	:	:	:	: nodemx fois pour le composant 1
	:	:	:	: + nodemx fois pour le composant 2
	:	:	:	: etc ...
JQEFIX	: INTEGER	: facial	: NFACMX*4	: 4 noeuds pour
	:	:	:	: definir une face
	:	:	:	: a debit impose
JQFIX	: INTEGER	:noeud OU face:	MAX(NODEMX,NFACMX)	
	:	:	:	: indices des noeuds à débit imposé
	:	:	:	: nodemx fois pour le composant 1
	:	:	:	: + nodemx fois pour le composant 2
	:	:	:	: etc ...
LAPFIX	: INTEGER	: nodale	: NODEMX	: indice mobilite
	:	:	:	: process Laplace
	:	:	:	: Self-adaptive method
NELE	: INTEGER	: elementaire	: NELEMX*NOELMX	: liste des noeuds
NELFAC	: INTEGER	: elementaire	: NELEMX*6	: connectivite :
	:	:	:	: elements--> faces
NOEFAC	: INTEGER	: facial	: NFACMX*4	: connectivite :
	:	:	:	: faces--> noeuds
	:	:	:	: (4 noeuds)
NSPER	: INTEGER	: pas de temps	: MAXPER	: definition des
NSPER_TRA	: INTEGER	: pas de temps	: MAXPER	: definition des
PERMEL	: DOUBLE PRECISION	: elementaire	: NELEMX*9	: tenseur de
	:	:	:	: permeabilite
	:	:	:	: (9 valeurs)
POROSI	: DOUBLE PRECISION	: elementaire	: NELEMX	: porosite
QCFIX	: DOUBLE PRECISION	:noeud OU face:	MAX(NODEMX,NFACMX)*NCOMPOMX	
	:	:	:	: débits massiques imposés
	:	:	:	: nodemx fois pour le composant 1
	:	:	:	: + nodemx fois pour le composant 2
	:	:	:	: etc ...
QFIX	: DOUBLE PRECISION	:noeud OU face:	NODEMX / NFACMX:	debit impose
RELATIV_VIS	: DOUBLE PRECISION	: nodale	: NODEMX	: visco. relative
RELATIV_DEN	: DOUBLE PRECISION	: nodale	: NODEMX	: densite relative
RHO_C_THERM	: DOUBLE PRECISION	: elementaire	: NELEMX	: rho*C :thermique
	:	:	:	: rho: densite
	:	:	:	: C: capacite
	:	:	:	: calorifique
RHS	: DOUBLE PRECISION	:	: NODEMX*NCOMPOMX:	membres de
	:	:	:	: droites
TEMCOM	: DOUBLE PRECISION	: nodale	: NODEMX	: temperature
	:	:	:	: initiale
TEMINI	: DOUBLE PRECISION	: nodale	: NODEMX	: temperature
	:	:	:	: calculee

THICEL	: DOUBLE PRECISION	: elementaire	: NELEMX	1D : section transversal
:	:	:	:	2D : epaisseur
TIMFUN	: DOUBLE PRECISION	: fonction temps	: MXTIFU*MXPTFU*2	: interpolation
TIMFUN_TRA	: DOUBLE PRECISION	: fonction temps	: MXTIFU*MXPTFU*2	: des conditions
:	:	:	:	limites, temporelles
TRACOL	: DOUBLE PRECISION	: facial	: NFACMX*NCOMPOMX	: old TRACON
:	:	:	:	: nfacmx fois pour le composant 1
:	:	:	:	: + nfacmx fois pour le composant 2
:	:	:	:	: etc ...
TRACON	: DOUBLE PRECISION	: facial	: NFACMX*NCOMPOMX	: trace de concent.
TRAPOL	: DOUBLE PRECISION	: facial	: NFACMX	: old TRAPRE
TRAPRE	: DOUBLE PRECISION	: facial	: NFACMX	: trace de pression
TRATEM	: DOUBLE PRECISION	: facial	: NFACMX	: trace de tempera.
TRATOL	: DOUBLE PRECISION	: facial	: NFACMX	: old TRATEM
VISCOS	: DOUBLE PRECISION	: nodale	: NODEMX	: viscosite
VOLUME	: DOUBLE PRECISION	: elementaire	: NELEMX	: volume de l'elem.
XCOORD	: DOUBLE PRECISION	: nodale	: NODEMX	: Abscisse
XYZ_PARH	: DOUBLE PRECISION	: particules	: NPARTMX*3	: 3 coordonnees
:	:	: de chaleur	:	: dans l'element
:	:	:	:	: de reference
XYZ_PART	: DOUBLE PRECISION	: particules	: NPARTMX*3	: 3 coordonnees
:	:	: de masse	:	: dans l'element
:	:	:	:	: de reference
XYZ_PATHLINES	: DOUBLE PRECISION	: trajectoires	: NPATHMX * 4	: 3 coordonnees
:	:	:	:	: et numero (int.)
:	:	:	:	: de l'element la
:	:	:	:	: contenant
YCOORD	: DOUBLE PRECISION	: nodale	: NODEMX	: Ordonnee
ZCOORD	: DOUBLE PRECISION	: nodale	: NODEMX	: Cote
THISTO	: DOUBLE PRECISION	: pas de temps	: NTHIMX	: historiques

3.6. LA BASE DE DONNEES DANS TAFFETAS

BASE DES FICHIERS (ordre alphabétique des extensions) :

AXI	Fichier des données utilisateur du module AXISYMETRIQUE.	
BMA	Définition des blocs 3D pour generer un modele 3D.	
BLO	Définition des blocs vides (3D ou 2D).	
BUI	Fichier de maillage double porosité 3D méthode TANIGUCHI/FILLION 1996.	
CHR	Fichier des historiques calculés.	
C_L	Fichier des différentes conditions limites définies.	
DAT	Fichier d'entrée pour le MODELE TAFFETAS	xxxxxxxx.DAT / SMD
DE2	Fichier de maillage méthode DELAUNAY en 2D.	
DE3	Fichier de maillage méthode DELAUNAY en 3D.	
ELE	Eléments et paramètres élémentaires du modèle TAFFETAS.	
ELF	Eléments et paramètres élément. du modèle	format UNIGRID
EXT	Extraction des résultats du .RES pour les chroniques CHR.	
F2D	Définition des fractures en 2D : lignes brisées.	
FLE	Vecteurs vitesses calculés aux centres des éléments (FLEches dans UNIGRID)	
FRA	Triangulation de polygones plans: contour des fractures 3D.	
HAB	Habillage : Traces des fractures (plan Zmax)	format UNIGRID
H3S	Habillage : 3D vue des faces supérieurs	format UNIGRID
H3F	Habillage : 3D vue des faces du fond	format UNIGRID
HIS	Définition des historiques (positions et types) désirées dans .CHR	
ISA	Extraction du .RES (résultat SM) voir	.CHR format ISAPE
LIN	Trajectoires demandées (LIgNes d'habillage dans UNIGRID)	
MA2	Fichier de maillage par macro-éléments en 2D.	
MA3	Fichier de maillage par macro-éléments en 3D.	
MAT	Définition des blocs de matrices hétérogènes 2D ou 3D.	
MA3	Fichier de maillage multicouche a partir d'un 2D.	
NOE	Noeuds et paramètres nodaux du modèle :	format UNIGRID
NOS	Noeuds et paramètres nodaux du modèle TAFFETAS.	
NOM	Fichier 'PROJET.NOM' définissant chaque projet/simulation.	
OPT	Fichier de données pour optimisation automatique.	
PLA	Définition des fractures planes du modèle double porosité.	
PRO	Points X Y Z (+ 10 char.)/ recherche noeuds plus proches.	
P2D	Définition des puits en 2D : points fixes.	
P3D	Définition des puits en 3D : lignes fixes.	
RES	Fichier de résultat pour le MODELE TAFFETAS :	xxxxxxxx.RES
RIV	Fichier des rivières: points X,Y,Z,H_fixe, fonction du temps.	
SMD	Fichier d'entrée pour le MODELE TAFFETAS :	xxxxxxxx.SMD / DAT
TIM	Fichier des paramètres temporels : périodes et pas de temps.	
UNT	Fichier des unités choisies pour les grandeurs physiques.	

4. Bibliographie thématique

4.1. BIBLIOGRAPHIE CONCERNANT ROCKFLOW

FILLION E., MENJOZ A., SAUTY J.P. (1993) - ROCKFLOW : Mise en oeuvre sur quelques exemples types du module de calcul des écoulements (SM), tests systématiques Rapport BRGM R 37179 EAU 4S 93.

FILLION E., NOYER M.L. (1993) - ROCKFLOW : Théorie et mode d'emploi du module de calcul des écoulements SM Rapport BRGM R 37181 EAU 4S 93.

FILLION E. (1993) - ROCKFLOW : Théorie et mode d'emploi du module de calcul du transport par éléments finis, TM Rapport BRGM R 37182 EAU 4S 93.

FILLION E. (1993) - ROCKFLOW : Description des meilleurs éléments finis associés au code ROCKFLOW Rapport BRGM R 37176 EAU 4S 93.

NOYER M.L., FILLION E. (1993) - ROCKFLOW : Théorie et mode d'emploi du module de calcul des écoulements d'un fluide à densité variable, DM Rapport BRGM R 37183 EAU 4S 93.

NOYER M.L., MARTIN J.C., FILLION E. (1994) - Passage automatique du modèle à différences finies MARTHE au modèle à éléments finis ROCKFLOW 6A0 RP ANT 94-010.

NOYER M.L. (1995) - ROCKFLOW : Théorie et mode d'emploi du module de calcul des écoulements d'un fluide à densité imposée : DM_Red.

ROSSIGNOL O., FILLION E. (1992) - Contribution à un mailleur 3D par la technique des Octrees modifiés Rapport de MIM R 37177 EAU 4S 93.

SAUTY J.P. (1993) - Projet EG42, Modélisation des écoulements et du transport dans un massif fracturé à matrice poreuse : Note de synthèse Rapport BRGM R 37173 GCH SGN 93.

SCHREINER R., FILLION E. (1993) - Contribution à un mailleur multi-horizons (technique des octrees). Rapport de DESS R 37178 EAU 4S 93.

4.2. BIBLIOGRAPHIE CONCERNANT LA METHODE M.H.F.E.M.

ACKERER Ph., DIAW B., MOSE R. and SIEGEL P. (1994) - Unsaturated-Saturated Groundwater Flow Modelling by Mixed Hybrid Finite Element in Computational Methods in Water Resources X. Pages 383-390. Kluwer Academic Publishers.

CHAVENT G. and ROBERTS J.E. (1991) - A unified physical presentation of mixed, mixed hybrid finite elementss and standard finite difference approximations for the determination of velocities in waterflow problems Adv. Water Resources, Vol 14 n°6 329-348.

DURLOFSKY L.J. (1994) - Accuracy of mixed element approximations to Darcy velocity and related quantities in Water Resources Research Vol. 30, No 4, pp. 965-973.

MOSE R., SIEGEL P., ACKERER Ph. and CHAVENT G. (1994) - Application of the mixed hybrid finite element approximation in a groundwater flow model: Luxury or necessity ? in Water Resources Research Vol. 30, No 11, pp. 3001-3014.

SAUTER F. and VAN EIJKEREN J. Septembre (1992) - A comparison between conforming and mixed hybrid finite element in CWM- MEMO 09/92.

SIEGEL P. DEA (1992) - Modélisation de l'hydrodynamique d'une nappe d'eaux souterraines par la méthode des éléments finis mixtes hybrides : application au cas bidimensionnel utilisant une discrétisation triangulaire de l'espace.

WENLIANG ZHAO and CHUNHONG XIE (1994) - New iterative schemes for mixed finite-element models of groundwater unsteady flows in Computational Methods in Water Resources X., pp. 139-145. Kluwer Academic Publishers.

4.3. BIBLIOGRAPHIE CONCERNANT LA METHODE F.E.M. EN TRANSPORT

FILLION E. (1991) - Application de la méthode des éléments finis pour simuler les écoulements dans un massif fracturé à double porosité, au voisinage d'un ouvrage souterrain. Mise en oeuvre du module SM du logiciel ROCKFLOW. Rapport ANDRA n° 620 RP BRGM 91-019, 134 p.

KRÖHN K.P. (1990) - ROCKFLOW: Strömung und transport in klüftigen Gestein. TM, Transport Modell. Rapport Institut für Strömungsmechanik, Uni., Hannover.

LEISMANN H.M. and FRIND E.O. (1989) - A Symmetric-Matrix Time Integration Scheme for the Efficient Solution of Advection-Dispersion Problems Water Resour. Res. Vol 25 n°6, pp. 1133-1139.

4.4. BIBLIOGRAPHIE CONCERNANT LA METHODE R.W.

CORDES C. and KINZELBACH W. (1992) - Continuous velocity fields and path lines in linear, bi-and trilinear finite elements in Water Resources Research.

KINZELBACH W. (1987) - Random walk simulation of pollutant transport in groundwater. *In* : Nato-Advanced Research Workshop on "Advances in analytical and numerical groundwater quality modelling", LNE, Lisbon, Portugal, June 2-6.

KINZELBACH W. et ACKERER P. (1986) - Modélisation de la propagation d'un contaminant dans un champ d'écoulement transitoire. *Hydrogéologie*, n° 2, pp. 197-206.

POLLOCK D.W. (1988) - Semi-analytical computation of path lines for finite-difference models. *Groundwater*, Vol. 36, n°6, Nov-Dec.

PRICKETT T.A., NAYMIK T.G. and LONNQUIST C.G. (1981) - A 'random walk' solute transport model for selected groundwater quality evaluation. *Illinois State Water Survey Bulletin*. 65, 103S.

TROSCH J. and VON KENEL A. - Particle Tracking in Three-Dimensional Groundwater Modelling in Computational Methods in Subsurface Hydrology.

SEGUIN J.J. (1992) - TRICTRAC : Logiciel de simulation tridimensionnelle du transport hydrodispersif dans les eaux souterraines. Rapport ANDRA N° 620 RP BRG 92-002, 68 p.

4.5. BIBLIOGRAPHIE CONCERNANT LA METHODE M.O.C.

LAINE C. (1986) - Simulation des transferts de soluté en nappe par la méthode des caractéristiques - test du logiciel M.O.C. Rapport 86 SGN 450 EAU du BRGM.

KONIKOW D., BREDEHOEST J. (1978) - Techniques of Water Resources Investigation. Computer model of two-dimensional solute transport and dispersion in groundwater (Book 7), chapter 2, Washington.

NEUMAN S.P. (1984) - Advective Eulerian - Lagrangian finite element method for advection dispersion. in Intern. Jour. Num. Meth. Engin. Vol. 20, pp. 321-337.

CADI R. and NEUMAN S.P. - Three-Dimensional Adaptive Eulerian-Lagrangian Finite Element Method for Advection-Dispersion.

4.6. BIBLIOGRAPHIE CONCERNANT LE TRANSPORT MULTICOMPOSANT

KIRKNER J.D. and REEVES H. (1988) - Multi-component Mass Transport With Homogeneous and Heterogeneous Chemical Reactions: Effect of Chemistry on the Choice of Numerical Algorithm. 1 Theory in Water Resources Research Vol. 24, No 10, pp. 1719-1729.

LIU C.W. and NARASIMHAN T.N. (1989) - Redox-Controlled Multiple-Species Reactive Chemical Transport. 1. Model Development. Water Resour. Res., Vol. 25 n°5, pp. 869-882.

REEVES H. and KIRKNER J.D. (1988) - Multi-component Mass Transport With Homogeneous and Heterogeneous Chemical Reactions: Effect of Chemistry on the Choice of Numerical Algorithm. 2 Numerical Results in Water Resources Research Vol. 24, No 10, pp. 1729-1739.

RUBIN J. (1983) - Transport of Reacting Solutes in Porous Media: Relation Between Mathematical Nature of Problem Formulation and Chemical Nature of Reactions in Water Resources Research Vol. 19, No 5, pp. 1231-1252.

YEY G.T. and TRIPATHI V.S. (1991) - A model for Simulating Transport of Reactive Multispecies Components: Model Development and Demonstration" Water Resour. Res., Vol. 27, No 12, pp. 3075-3094.

4.7. BIBLIOGRAPHIE CONCERNANT L'ECOULEMENT D'UN FLUIDE A DENSITE VARIABLE

FAN Y. and KAHAWITA R. (1994) - A numerical study of variable density flow and mixing in porous media in Water Resources Research Vol 30, No 10, pp. 2707-2716.

EVANS D. and RAFFENSPERGER P. (1992) - On the Stream Function for Variable-Density Groundwater Flow in Water Resources Research Vol 28, No 8, pp. 2141-2145.

SHINCARIOL R.A., SCHWARTZ F.W. and MENDOZA C.A. (1994) - On the generation of instabilities in variable density flow in Water Resources Research Vol. 30, No 4, pp. 913-927.

SENGER R.K. and FOGG G.E. (1990) - Stream Functions and Equivalent Freshwater Heads for Modeling Regional Flow of Variable-Density Groundwater 1 Review of Theory and Verification in Water Resources Research Vol. 26, No 9, pp. 2089-2096.

SENGER R.K. and FOGG G.E. (1990) - Stream Functions and Equivalent Freshwater Heads for Modeling Regional Flow of Variable-Density Groundwater 2 Application and

Implications for Modeling Strategy in Water Resources Research Vol 26, No 9, pp. 2097-2106.

PANDAY S., HYUAKORN P.S., ROBERTSON J.B. and McGURC B. (1993) - A density-dependent flow and transport analysis of the effects of groundwater development in a freshwater lens of limited areal extend: The Geneva area (Florida, USA) case study in Journal of Contaminant Hydrology, 12, pp. 329-354.

4.8. BIBLIOGRAPHIE CONCERNANT LE COUPLAGE EXTERNE IMPLICITE

PUTTI M. and PANICONI C. (1995) - Picard and Newton linearization for the coupled model of saltwater intrusion in aquifers in Advances in Water Resources, Vol. 18, No 3, pp. 159-170.

PANICONI C. and PUTTTI M. (1994) - A comparison of Picard and Newton iteration in the numerical solution of multidimensional variably saturated flow problems in Water Resources Research, Vol. 30, No 12, pp. 3357-3374.

4.9. BIBLIOGRAPHIE CONCERNANT LA THERMIQUE

MARSILY G. (de) (1986) - Quantitative Hydrogeology. Groundwater hydrology for engineers. Academic press Inc. London.

4.10. BIBLIOGRAPHIE CONCERNANT LES MAILLAGES ADAPTATIFS

BABUSKA I. and DORR M.R. (1981) - Error estimates for the combined h and p versions of the finite element method, Numer. Math., Vol 37, pp. 257-277.

BABUSKA I., SZABO B.A. and KATZ I.N. (1981) - The p-version of the finite element method, SIAM J. Numer. Anal., Vol 18, n° 3, pp. 515-545.

BURTON K.L. and PEPPER D.W. (1994) - Use of adaptive finite elements for compressible flow AIAA J. Thermophysics and Heat Transfer. Technical Notes Vol. 7, No 4, pp. 744-746.

GOTTARDY G. and VENUTELLI M. (1994) - One-dimensional Moving Finite-Element Model of Solute Transport, Ground Water, Vol. 32, No 4, pp. 645-649.

GUO B. and BABUSKA I. (1986) - The h-p version of the finite element method. Part 1: The basic Approximation results, Comp. Mech. Part 1: 21-41.

NEUMAN S. P. (1984) - Adaptive Eulerian-Lagrangian finite element method for advection-dispersion. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol 20, pp. 321-337.

O'NEILL K. (1981) - Highly Efficient, Oscillation Free Solution of the Transport Equation Over Long Times and Large Spaces. *Water Resour. Res.*, Vol. 17, No 6, pp. 1665-1675.

PEPPER D.W. and STEPHENSON D.E. (1995) - An Adaptive Finite-Element Model for Calculating Subsurface Transport of Contaminant ". *Ground Water*, Vol. 33, No 3, pp. 486-496.

PROBERTE J. , HASSAN O. , MORGAN K. and PERAIRE J. (1992) - Adaptive Explicit and Implicit Finite Element Methods for Transient Thermal Analysis *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 35, pp. 655-670.

TROMPERT R. (1993) - Local-uniform-grid refinement and transport in heterogeneous porous media *Advances in Water Resources*, Vol. 16, pp. 293-304.

WOLFSBERG A. V. and FREYBERG D.L. (1994) - Efficient simulation of single species and multispecies transport in groundwater with local adaptive grid refinement " *Water Resour. Res.*, Vol. 30, No 11, pp. 2979-2991.

YEH G.T. (1990) - A Lagrangian-Eulerian Method With Zoomable Hidden Fine-Mesh Approach to Solving Advection-Dispersion Equations " *Water Resour. Res.*, Vol. 26, No 6, pp. 1133-1144.

4.11. BIBLIOGRAPHIE CONCERNANT LE COUPLAGE CHIMIQUE

FABRIOL R., SAUTY J.P. et OUZOUNIAN G. (1993) - Coupling geochemistry with a particle tracking transport model *J. of Contaminant Hydrology* 13., pp. 117-129.

CHEMVAL project - Report on stages 3 and 4: Testing of coupled chemical transport models. Commission of European communities. EUR 13675.

NOYER M.L. (1995) - Couplage transport-chimie dans le logiciel MARTHE par la méthode Random Walk. Réalisation d'un prototype. Rapport BRGM R 38338 HYT/DR/95.

PARKER J.C. (1985) - CXTFIT: Determining transport parameters from laboratory and field tracer experiments. *International Ground Water*.

THIERY D. (1995) - Modélisation des écoulements avec interactions chimiques avec le logiciel MARTHE. Version 5.5. Rapport BRGM R 38463 HYT/DR/95.

4.12. BIBLIOGRAPHIE CONCERNANT LE MULTIPHASIQUE

HELMIG R. and NATKE U. (1993) - MM, Ein Modell zur simulation von Mehrphasenprozessen in porösen und geklüftet - porösen Medien, Rapport Institut für Strömungsmechanik, Hannover, et Institut für Wasserbau, Stuttgart.

HELMIG R. and ZIELKE W. (1991) - Mehrphasenprozesse in geklüftet - porösen Medien. Stand der Forschung Uni. Hannover.

4.13. BIBLIOGRAPHIE CONCERNANT LA DOUBLE POROSITE

BARENBLATT G.I., ENTOV V.M., and RYZHIK V.M. (1990) - Theory of Fluid Flows Through Natural Rocks, Kluwer Academic, Hingham..

BEAR J. (1979) - Hydraulics of Groundwater. Mac Graw Hill - New York.

FILLION E. and NOYER M.-L. (1996) - Flow Modelling in a Dual Porosity Domain with Automatic Mesh Generation and Parameter Calibration: Application to the Äspö Site. Journal of Hydrology, 180, pp 1-19.

GUVANASEN V. (1984) - Flow simulation in a fractured rock mass. Proceedings of the Int. Groundwater Symp. on Groundwater Resources Utilization and Contaminant Hydrogeology, I.A.H. Quebec, pp. 403-412.

HUYAKORN P.S. and PINDER G.F. (1983) - Computational Methods in Subsurface Flow Academic Press, New York.

LOUIS C. and PARNOT M. (1972) - Three-dimensional investigation of flow, conditions at Grand Maison dam site. Percolation through fissured Rock, paper T4-f, Proceeding of a symposium held in Stuttgart.

TANIGUCHI T. and FILLION E. (1996) - Numerical experiments for flow analysis in 3D fractured rock with porous matrix. Advances in Water Resources, Vol. 19, No2, pp. 97-107.

4.14. BIBLIOGRAPHIE CONCERNANT DES SOLUTIONS ANALYTIQUES EN TRANSPORT

CLEARY R. W. (1978) - Analytical models for groundwater pollution and hydrology Rep 78-WR-15 Dep. of Civ. Eng., Princeton Univ., Princeton, N.J.

CLEARY R. W. and UNGS M.J. (1970) - Water Resources programs Rep 70-WR-15 Princeton Univ., Princeton, N.J.

HUNT B. (1978) - Dispersive Sources in Uniform Groundwater Flow Journal of the Hydraulics division, ASCE, Vol. 104, No1, pp. 75-85.

SEGUIN J.J., MARTIN J.C. and SAUTY J.P. (1991) - Etude des phénomènes de transport au voisinage d'un site : Double approche, analytique et numérique Rep. BRGM 621-RP-BRG-91-008.

4.15. BIBLIOGRAPHIE CONCERNANT LES METHODES DE RESOLUTION

BARRETT R., BERRY M., CHAN T.F., DEMMEL J., DONATO J., DONGARRA J., EIJKHOUT V., POZO R., ROMINE C. AND VAN DER VORST H. (1994) - TEMPLATES: for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods SIAM Philadelphia.

DHATT G. and TOUZOT G. (1992) - Une présentation de la méthode des éléments finis Deuxième Edition Maloine S.A. Paris.

GOLUB G.H. and ORTEGA J.M. (1992) - Scientific Computing and Differential Equations: An Introduction to Numerical Methods Academic Press, INC. Harcourt Brace & company, Publishers.

VAN DER VORST H. (1992) - Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems SIAM J. Sci. Statist. Comput., Vol 13, pp. 631-644.

PRESS W.H., FLANNERY B.P., TEUKOLSKY S.A. and VETTERLING W.T., Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing (FORTRAN Version) Cambridge University Press.

4.16. BIBLIOGRAPHIE CONCERNANT LE POST-PROCESSING

MARTIN J.C. : "UNIGRID : manuel d'utilisation" 1990.

VOLUME 4

Exemples d'applications de TAFFETAS

Sommaire

1. Modélisations Hydrodynamiques	4
1.1. Simulation hydrodynamique 2D en régime permanent (barrières très peu perméables)	4
1.2. Simulation hydrodynamique 2D en régime transitoire	11
1.3. Simulation hydrodynamique multicouche (test HYDROCOIN 6)	15
1.4. Simulation hydrodynamique 3D (Site de NEUVY-BOIN).....	23
1.5. Simulation hydrodynamique en domaine fracturé	27
1.5.1. Simulation 2D en domaine à double porosité (site de TAYMA : Arabie Saoudite).....	27
1.5.2. Simulation 3D en domaine à double porosité (site d'ÄSPÖ : Suède)	30
1.6. Différentes méthodes de simulations hydrodynamiques	32
1.6.1. Simulation par la méthode des éléments finis conformes	32
1.6.2. Simulation par la méthode des éléments mixtes hybrides.....	32
1.6.3. Comparaison sur un exemple : Pompage dans un écoulement régional	32
1.7. Champ de vitesses et tracés de trajectoires.....	35
1.7.1. Simulation 2D.....	35
1.7.2. Simulation 3D : (benchmark SAUTY-KINZELBACH).....	39
2. Modélisation de transport de masse ou de chaleur	41
2.1. Transport d'un soluté.....	41
2.1.1. Exemples 1D : Injection continue et injection instantanée	44
2.1.2. exemples 2D : solution de CLEARY	46
2.1.3. Exemples 3D : Diffusion dans la matrice depuis une fracture	48
2.1.4. Simulation 3D : (benchmark SAUTY-KINZELBACH) :	50
transport de masse	50
2.2. Transport de plusieurs solutés : Exemple de traçage multiple	53
2.3. Transport de chaleur (doublets géothermiques)	55
2.4. Différentes méthodes de transport.....	60

2.4.1. Méthode des éléments finis conformes (EFC)	61
2.4.2. Méthode des particules (Random Walk : RW).....	62
2.4.3. Méthode des caractéristiques (MOC).....	62
3. Couplages : écoulements et transferts (de masse et de chaleur)	63
3.1. Viscosité	63
3.2. Densité.....	65
4. Maillages auto-adaptatifs	67
4.1. Ecoulements	67
4.2. Transferts de masse ou de chaleur.....	70
4.3. Ecoulements et Transferts (de masse ou de chaleur).....	72
5. Calage automatique des paramètres.....	74
5.1. Données.....	74
5.2. Exemples	75
6. Couplages transport géochimie.....	76
6.1. Test de la silice	
6.1.1. Le modèle chimique.....	76
6.1.2. Simulations.....	77
6.2. Test du ciment	81
6.2.1. Le modèle chimique.....	81
6.2.2. Simulations.....	82
6.3. Test du CXTFIT	85
6.3.1. Le modèle chimique.....	85
6.3.2. Simulations.....	86
Conclusion.....	77
Liste des figures	78

1. Modélisations hydrodynamiques

Les exemples présentés recouvrent des simulations hydrodynamiques monodimensionnelles (1D), bidimensionnelles (2D), tridimensionnelles (3D) et couplées 1D/2D/3D pour les simulations spécifiques en domaines de double porosité.

Ces simulations intéressent aussi bien des modélisations en régime permanent, qu'en régime transitoire.

Les modèles construits pour TAFFETAS peuvent être traités suivant deux types de méthodes :

- soit comme des modèles en éléments finis conformes (linéaires, quadratiques incomplets, cubiques et quadratiques complets) ;
- soit comme des modèles en éléments finis mixtes hybrides.

Ces deux types de modèles sont indifféremment utilisables dans TAFFETAS et font l'objet de plusieurs comparaisons à l'aide des applications présentées dans les paragraphes suivants.

1.1. SIMULATION HYDRODYNAMIQUE 2D EN REGIME PERMANENT (BARRIERES TRES PEU PERMEABLES)

Le premier exemple présenté concerne un test de symétrie des écoulements autour de deux barrières très peu perméables, proposé par Ph. Ackerer (1995).

Exemple numéro : 1.1						FIGURES: 1 et 2
répertoire des fichiers de données : .DATA.ACKERERS						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom :	type :					
LINE2BAR	linéaire		X			
QUAD2BAR	quadrat.		X			
MIXT2BAR	mixte		X			
nombre de noeuds : 676		régime permanent				
nombre d'éléments 1D :						
2D : 625						
3D :						
Objectif: Calcul des trajectoires. Comparaison des trois méthodes						
remarques:						
• définition des conditions limites par faces pour la méthode mixte hybride • les points de départ des trajectoires sont donnés à la fin du fichier .DAT ou .SMD						

```

exemple de 2 barrières très peu perméables: éléments 2D (250+250+75+10+40 = 625)
CUMNP NEGLNENGLMODEX NPER      TSTART      LIQUCU MIXT_HYBR SOLV BOUN      PRECIS
C      676      5      0      1      1      0.      1      (I10,F10.0)

C      THETA      (I10,F10.0)
      1.
C NPB      (IS)
      0
C IPNODE      (I6I5)
C (1) (2) ... (NPB)
C NSPER
C (1) (2) ... (NPER)
      1
C DTPER(1) DTPER(2) ... DTPER(NPER)
      10.
C  N  ID      X      Y      Z      KN      H_ini
      1      0.      0.      0.      0      0.
      2      4.      0.      0.      1      0.
      26     100.     0.      0.      0      0.
.... etc ....
      626      4.      96.     0.      1      0.
      650     100.     96.     0.      0      0.
      651      0.     100.     0.      0      0.
      652      4.     100.     0.      1      0.
      676     100.     100.     0.      0      0.
CNTTF NPTM      NTEMP      NLOAD
      1      2      50      0
C NTF NPTS
C TIMV(1)      RV(1)      TIMV(2)      RV(2) ...      ... TIMV(NPTS) RV(NPTS)
      1      2
      0.      1. 999999999.      1.
C NOD NCUR      FAC IN1 IN2 IN3 IN4 --> specific mixte hybrid method
      0      100.     27      1
      0      99.     52     26
      0      100.     53     27
      0      99.     78     52
      0      100.     79     53
      0      99.    104     78
      0      100.    105     79
      0      99.    130    104
      0      100.    131    105
      0      99.    156    130
      0      100.    157    131
      0      99.    182    156
      0      100.    183    157
      0      99.    208    182
      0      100.    209    183
      0      99.    234    208
      0      100.    235    209
      0      99.    260    234
      0      100.    261    235
      0      99.    286    260
      0      100.    287    261
      0      99.    312    286
      0      100.    313    287
      0      99.    338    312
      0      100.    339    313
      0      99.    364    338
      0      100.    365    339
      0      99.    390    364
      0      100.    391    365
      0      99.    416    390
      0      100.    417    391
      0      99.    442    416
      0      100.    443    417
      0      99.    468    442
      0      100.    469    443

```

```

0      99. 494 468
0      100. 495 469
0      99. 520 494
0      100. 521 495
0      99. 546 520
0      100. 547 521
0      99. 572 546
0      100. 573 547
0      99. 598 572
0      100. 599 573
0      99. 624 598
0      100. 625 599
0      99. 650 624
0      100. 651 625
0      99. 676 650
C NOD NCUR      FAC  IN1 IN2  KN
C      0  9.61E-04  24  25
C XI. TWO-DIMENSIONAL CONDUCTION ELEMENTS
C NPAR
C(1) (2) (3)              (10) (11) (12)      (14) (15) (16)
  2 250  0                  2                  1  1  1
C  N
  1
CROPK(1,N) PROPK(2,N) PROPK(3,N)
1.15741E-5
C PROPS(N)
  0.E+0
C ITABLE
CN,1) (N,2) ...          ... (N,9)
  9
C
  1      1      1  26      0.      1.
  1      2      28 27      0.      1.
  25      1      1  0      0.      1.
  625 626 652 651
C
  26      1      1  26      0.      1.
  2      3      29 28      0.      1.
  50      1      1  0      0.      1.
  626 627 653 652
... etc ...
  201      1      1  26      0.      1.
  9      10      36 35      0.      1.
  225      1      1  0      0.      1.
  633 634 660 659
C
  226      1      1  26      0.      1.
  10      11      37 36      0.      1.
  250      1      1  0      0.      1.
  634 635 661 660
C XI. TWO-DIMENSIONAL CONDUCTION ELEMENTS
C NPAR
C(1) (2) (3)              (10) (11) (12)      (14) (15) (16)
  2 250  0                  2                  1  1  1
C  N
  1
CROPK(1,N) PROPK(2,N) PROPK(3,N)
1.15741E-5
C PROPS(N)
  0.E+0
C ITABLE
CN,1) (N,2) ...          ... (N,9)
  9
C
  1      1      1  26      0.      1.
  16      17      43 42      0.      1.
  25      1      1  0      0.      1.
  640 641 667 666
C
  26      1      1  26      0.      1.
  17      18      44 43      0.      1.
  50      1      1  0      0.      1.

```

```

641 642 668 667
C
... etc ...
226      1      1      26      0.      1.
25      26      52      51
250      1      1      0      0.      1.
649 650 676 675
C XI. TWO-DIMENSIONAL CONDUCTION ELEMENTS
C NPAR
C(1) (2) (3) (10) (11) (12) (14) (15) (16)
2 75 0 2 1 1 1
C N
1
CROPK(1,N) PROPK(2,N) PROPK(3,N)
1.15741E-5
C PROPS(N)
0.E+0
C ITABLE
CN,1) (N,2) ... (N,9)
9
C M IPS MTYP KG BETA THIC
1 1 1 26 0. 1.
12 13 39 38
25 1 1 0 0. 1.
636 637 663 662
C
26 1 1 26 0. 1.
13 14 40 39
50 1 1 0 0. 1.
637 638 664 663
C
51 1 1 26 0. 1.
14 15 41 40
75 1 1 0 0. 1.
638 639 665 664
C XI. TWO-DIMENSIONAL CONDUCTION ELEMENTS
C NPAR
C(1) (2) (3) (10) (11) (12) (14) (15) (16)
2 10 0 2 1 1 1
C N
1
CROPK(1,N) PROPK(2,N) PROPK(3,N)
1.15741E-5
C PROPS(N)
0.E+0
C ITABLE
CN,1) (N,2) ... (N,9)
9
C
1 1 1 26 0. 1.
15 16 42 41
5 1 1 0 0. 1.
119 120 146 145
C
6 1 1 26 0. 1.
531 532 558 557
10 1 1 0 0. 1.
635 636 662 661
C XI. TWO-DIMENSIONAL CONDUCTION ELEMENTS
C NPAR
C(1) (2) (3) (10) (11) (12) (14) (15) (16)
2 40 0 2 1 1 1
C N
1
CROPK(1,N) PROPK(2,N) PROPK(3,N)
1.1574E-10
C PROPS(N)
0.E+0
C ITABLE
CN,1) (N,2) ... (N,9)
9
C M IPS MTYP KG BETA THIC

```

	1		1	1	26	0.	1.
	11	12	38	37			
	20		1	1	0	0.	1.
	505	506	532	531			
C							
	21		1	1	26	0.	1.
	145	146	172	171			
	40		1	1	0	0.	1.
	639	640	666	665			
C							
C	PATHLINES						
C							
	1	-1.00		0.3			
	3	-1.00		0.0			
	6	-1.00		-1.0			
	11	-1.00		-1.0			
	16	-1.00		-1.0			
	21	-1.00		-1.0			
	23	-1.00		0.0			
	25	-1.00	0.865809				
STOP							

L'objectif de ce premier exemple est de comparer la qualité des trajectoires calculées avec TAFFETAS à partir des écoulements simulés à l'aide de plusieurs méthodes numériques différentes, disponibles dans TAFFETAS.

Les trois méthodes utilisées sont, de la plus classique à la plus originale (en éléments finis) :

- la méthode des éléments conformes linéaires ;
- la méthode des éléments conformes quadratiques ;
- la méthode des éléments mixtes et hybrides.

Les trois champs de charge qui en résultent, sont pratiquement identiques, mais les trajectoires qui, elles reflètent plus la qualité des flux calculés sont très nettement différentes.

Les trajectoires en éléments conformes (méthode de Pollock approchée) sont clairement erronées puisqu'elles traversent les parois supposées étanches et sont très dissymétriques malgré la symétrie imposée du problème par rapport aux diagonales. Ceci reste vrai pour les éléments quadratiques (fig. 2).

Seules les trajectoires en éléments mixtes hybrides sont correctes (fig. 1).

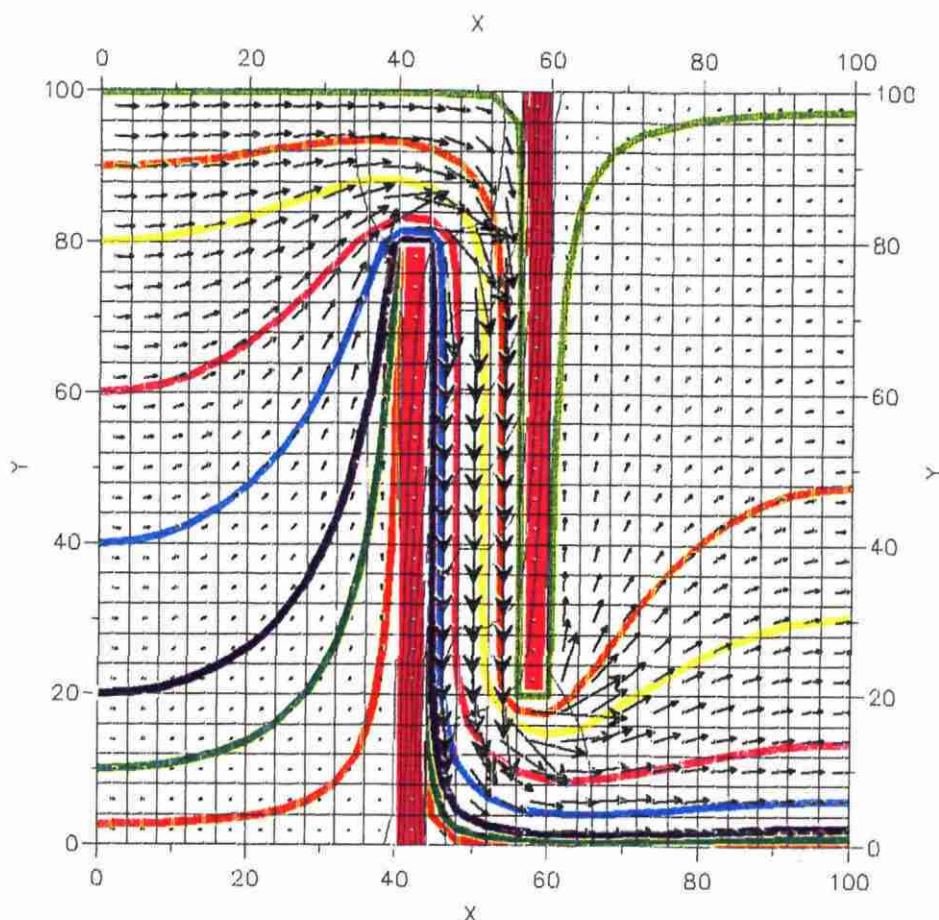
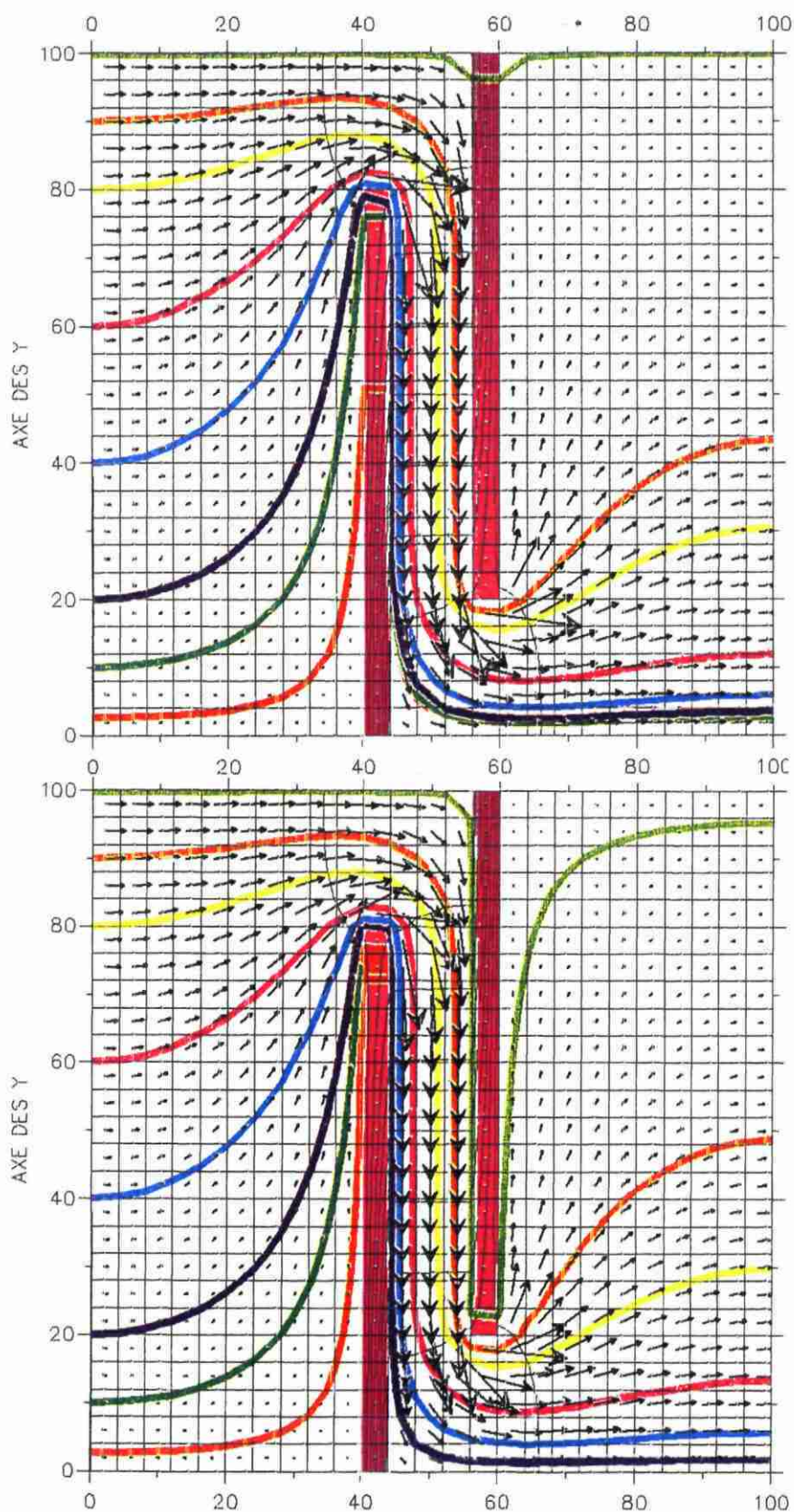


Fig. 1 - Trajectoires en rotation autour de deux barrières (Test de symétrie des écoulements).

Modèle 2D en régime permanent, constitué de 676 noeuds et 625 éléments 2D.

Méthode de calcul de l'hydrodynamique : Eléments finis mixtes hybrides.

La perméabilité dans les deux parois étanches est 10^5 fois plus faible que dans l'aquifère. On constate que les trajectoires (fig. 1) contournent parfaitement les deux parois étanches. La vérification de la symétrie des flux et des trajectoires est dans ce cas une bonne évaluation des résultats. Pour vérifier la symétrie, la trajectoire rouge, dont le point de départ (en $X = 0.m$) est parfaitement défini, est suivie jusqu'à son terme (en $X = 100.m$). L'ordonnée du point de sortie de cette trajectoire rouge est utilisée pour définir le point de départ, par symétrie depuis l'angle opposé du maillage, de la trajectoire vert clair. Dès lors, on vérifie que les 2 trajectoires (rouge et vert clair) sont parfaitement symétriques.



Eléments linéaires
conformes.

Eléments quadratiques
conformes.

Fig. 2 - Trajectoires en rotation autour de deux barrières (Test de symétrie des écoulements).

Modèle 2D en régime permanent, constitué de 676 noeuds et 625 éléments 2D.
Méthode de calcul de l'hydrodynamique : Eléments finis conformes (linéaires et quadratiques).

1.2. SIMULATION HYDRODYNAMIQUE 2D EN REGIME TRANSITOIRE

Cet exemple est l'étude de la propagation d'un signal en pression, sinusoïdal en fonction du temps. Une telle propagation monodimensionnelle dans un aquifère est marquée par un amortissement de l'amplitude de l'onde, et un déphasage dans le temps en fonction de la distance parcourue.

Exemple numéro : 1.2.a						FIGURE: 3
répertoire des fichiers de données : .DATA.SINUSOID						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom :	type :					
LINBAR16	linéaire		X			
MIXLIN16	mixte		X			
nombre de noeuds : 164		régime transitoire				
nombre d'éléments 1D :						
2D :						
3D : 40						
Objectif: Calcul de la propagation d'une onde sinusoïdale de pression hydraulique: modèle avec écoulements monodirectionnels.						
remarques:						

Autre exemple (même répertoire) : SM_SINUS.DAT cas 2D (axisymétrie).

Exemple numéro : 1.2.b						FIGURE:
répertoire des fichiers de données : .DATA.SINUSOID						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom :	type :					
SM_SINUS	linéaire		X			
nombre de noeuds : 60		régime transitoire				
nombre d'éléments 1D :						
2D :						
3D : 29						
Objectif: Calcul de la propagation d'une onde sinusoïdale de pression hydraulique: cas axisymétrique						
remarques:						
- définition des conditions limites en fonction du temps: fonction sinusoïdale discrétisée en 72 pas de temps de 1 s. - génération automatique des éléments.						

Fichier SM_SINUS.DAT :

```

exemple CAS TRANSITOIRE sur maillage avec 60 NOEUDS
C I. HEADING CARD (12A6)
C II. MASTER CONTROL CARDS
CUMNP NEGLNENGLMODEX NPER TSTART LIQUCU (5I5,F10.0)
  60 1 0 1 1 0. 1
C
C
C
C THETA (I10,F10.0)
  1.
C NPB (I5)
  1
C IPNODE (if NPB<>0 else no data on this line) (16I5)
C (1) (2) ... (NPB)
  1 41
C III. TIME STEP DATA
C a. number of solution time steps card(s) (16I5)
C NSPER
C (1) (2) ... (NPER)
  36
C b. time step increment card(s) (8F10.0)
C DTPER(1) DTPER(2) ... DTPER(NPER)
  1.
C IV. NODAL POINT DATA (2I5,3F10.0,I5)
C N ID X Y Z KN HEAINI
  1 1 0.100000 0.000000 0.000000 0 0.0
  2 0 0.123730 0.000000 0.000000 0 0.0
  3 0 0.153091 0.000000 0.000000 0 0.0
  4 0 0.189419 0.000000 0.000000 0 0.0
  5 0 0.234367 0.000000 0.000000 0 0.0
  6 0 0.289982 0.000000 0.000000 0 0.0
  7 0 0.358794 0.000000 0.000000 0 0.0
... etc ...
 52 0 8.715716 0.762526 0.000000 0 0.0
 53 0 10.783940 0.943472 0.000000 0 0.0
 54 0 13.342940 1.167356 0.000000 0 0.0
 55 0 16.509190 1.444367 0.000000 0 0.0
 56 0 20.426780 1.787112 0.000000 0 0.0
 57 0 25.274020 2.211190 0.000000 0 0.0
 58 0 31.271480 2.735900 0.000000 0 0.0
 59 0 38.692140 3.385123 0.000000 0 0.0
 60 0 47.873700 4.188406 0.000000 0 0.0
C VII. BOUNDARY CONDITION CONTROL CARD (7I5)
CNTTF NPTM NTEMP NLOAD
  1 37 2 0
C VIII. DEFINITION OF TIME FUNCTIONS
C a. control data (2I5)
C NTF NPTS
  1 37
C b. (t,f(t)) data (8F10.0)
C TIMV(1) RV(1) TIMV(2) RV(2) ... TIMV(NPTS) RV(NPTS)
  0. 0. 1. 0.5 2. 0.866 3. 1.
  4. 0.866 5. 0.5 6. 0. 7. -0.5
  8. -0.866 9. -1. 10. -0.866 11. -0.5
 12. 0. 13. 0.5 14. 0.866 15. 1.
 16. 0.866 17. 0.5 18. 0. 19. -0.5
 20. -0.866 21. -1. 22. -0.866 23. -0.5
 24. 0. 25. 0.5 26. 0.866 27. 1.
 28. 0.866 29. 0.5 30. 0. 31. -0.5
 32. -0.866 33. -1. 34. -0.866 35. -0.5
 36. 0.
C IX. APPLIED BOUNDARY CONDITION DATA
C 1. Specification of Nodal Point Piezometric Heads (2I5,2F10.0,I5)
C NOD NCUR FAC KN
  1 1 1. 0
 31 1 1. 0

```

```

C 1. Specification of Concentrated Nodal Flow Input (2I5,2F10.0,I5)
C NOD NCUR FAC KN
C ELEMENT INPUT
C XI. TWO-DIMENSIONAL CONDUCTION ELEMENTS
C NPAR
C (1) (2) (3) (10) (11) (12) (14) (15) (16)
  2 29 0 2 1 1 1
C N
  1
CROPK(1,N) PROPK(2,N) PROPK(3,N)
  1.E-4
C PROPS(N)
  1.5E-3
C ITABLE
CN,1) (N,2) ... (N,9)
  9
C M IPS MTYP KG BETA THIC
  1 1 1 1 0. 1.
CNOD1 NOD2 NOD3 NOD4
  1 2 32 31
C
  29 1 1 0 0. 1.
  29 30 60 59
STOP

```

Discrétisation temporelle dans le fichier précédant

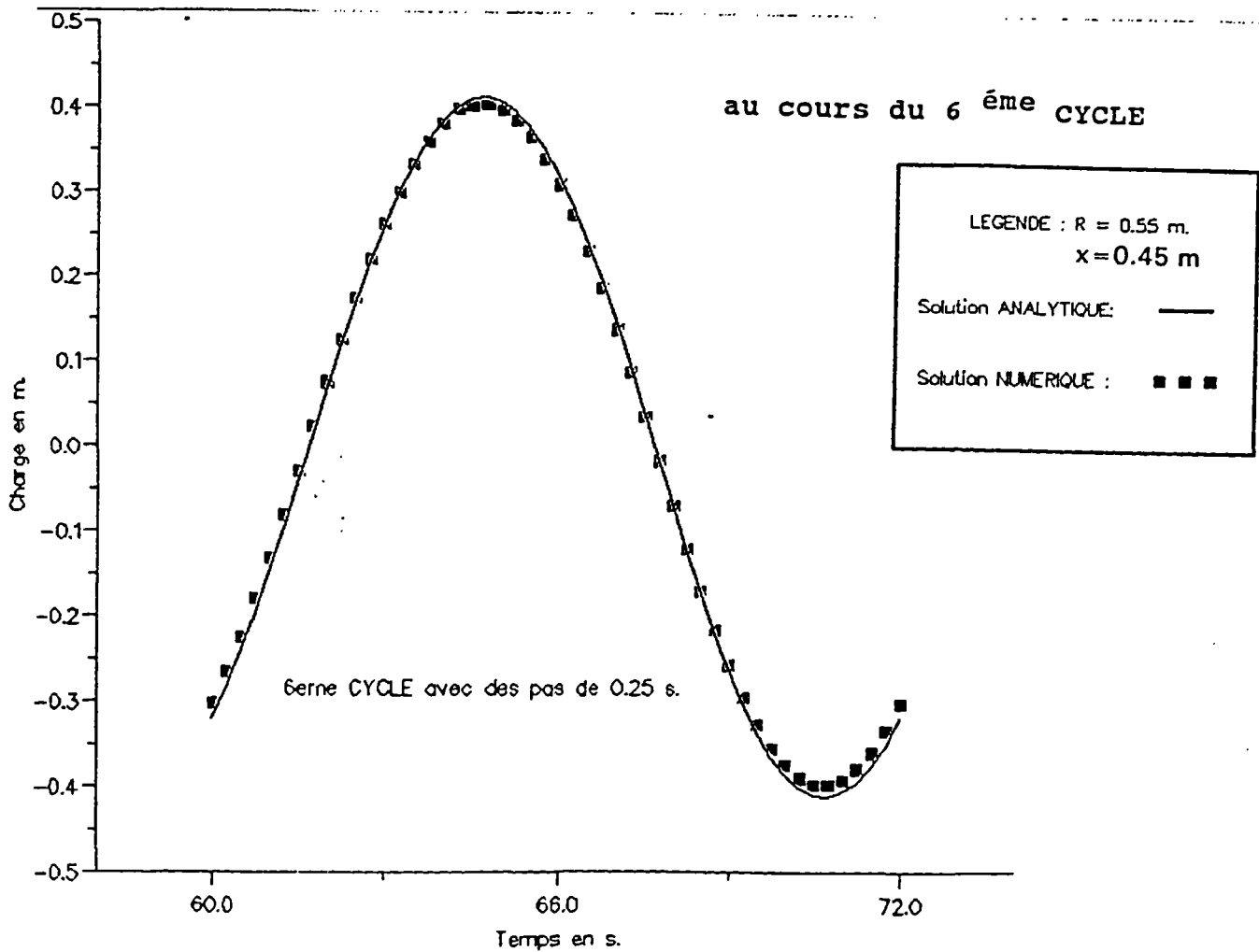
Dans ce fichier, la fonction du temps est discrétisée avec un pas de temps de 1 s. (fonction (TIMV, RV)). La périodicité de cette fonction est de 12 s. Le calcul se déroule sur 3 périodes (36 x 1 s).

Rappelons que des pas de temps de calcul peuvent être indépendants des pas de discrétisation des fonctions du temps. Dès lors, à chaque date de simulation, les valeurs des fonctions sont interpolées.

Résultats : simulation en régime transitoire

Différentes solutions analytiques pour la propagation d'un signal sinusoïdal dans le temps et dans l'espace sont proposées pour l'équation de la chaleur par Carslaw et Jaeger (1965) pour différentes configurations géométriques (milieu semi-infini, secteur cylindrique, ½ plan 2D, barre 3D semi-infinie...).

La comparaison des résultats de TAFFETAS avec de telles solutions analytiques permet de vérifier la qualité des simulations (fig. 3) pour les différentes méthodes disponibles (conformes ou mixtes hybrides).



comparaison éléments conformes / éléments mixtes

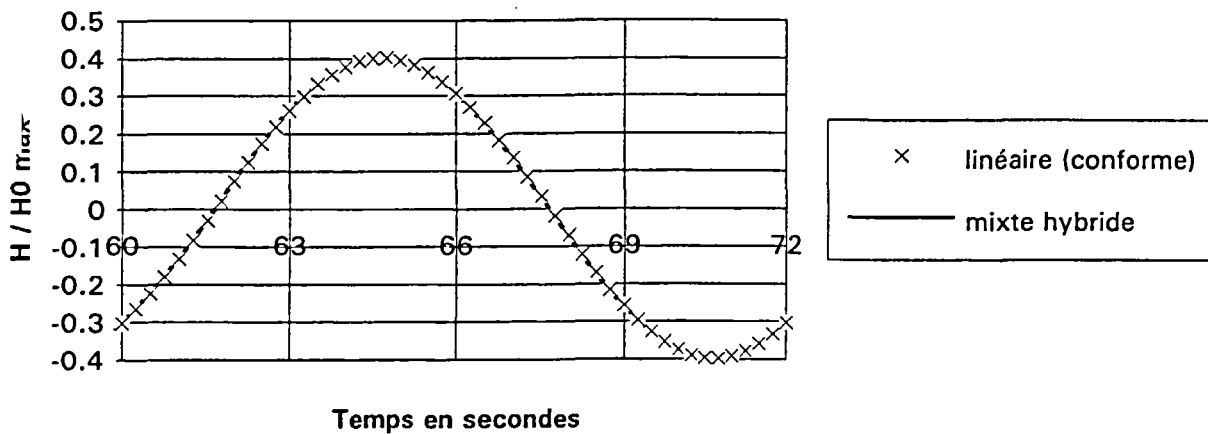


Fig. 3 - Propagation d'un signal sinusoïdal en pression dans un aquifère (LINBAR16 et MIXBAR16).

Modèle 1D en régime transitoire, constitué de 164 noeuds et 40 éléments 3D.
 Méthodes de calcul de l'hydrodynamique: Eléments finis conformes linéaires et éléments mixtes hybrides.

1.3. SIMULATION HYDRODYNAMIQUE MULTICOUCHE (TEST HYDROCOIN 6)

Cet exemple est l'étude d'un système hydrogéologique constitué par la superposition d'aquifères séparés par des aquitards.

Exemple numéro : 1.3						FIGURE: 4
répertoire des fichiers de données : .DATA.HYDROCO6						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom : SM_COI6C	type : linéaire		X			
nombre de noeuds : 1528		régime permanent				
nombre d'éléments 1D :						
2D :						
14 groupes 3D : 1120						
Objectif: Calcul 3D dans un domaine complexe						
remarques:						
• Cas très hétérogène (1.E+8 de contraste de perméabilité) • éléments dégénérés (faces triangulaires: 2 noeuds confondus)						

Le système hydrogéologique considéré dans ce test HYDROCOIN numéro 6, est une vision simplifiée d'un système réel, de 400 km de longueur, 150 km de largeur et dont l'altitude varie de +1800 m à l'amont, à -2 000 m en aval.

La définition du problème est présentée sur les figures 4bis et 4ter.

La figure 4 présente, en coupe verticale la répartition des paramètres hydrodynamiques (exemple: la perméabilité K) dans le maillage aux éléments finis utilisé par TAFFETAS.

De très nombreux travaux sur l'hydraulique de ce système en régime permanent, et sur le tracé des trajectoires dans un tel domaine hétérogène, ont été réalisés avec ROCKFLOW (1992) puis TAFFETAS (1996).

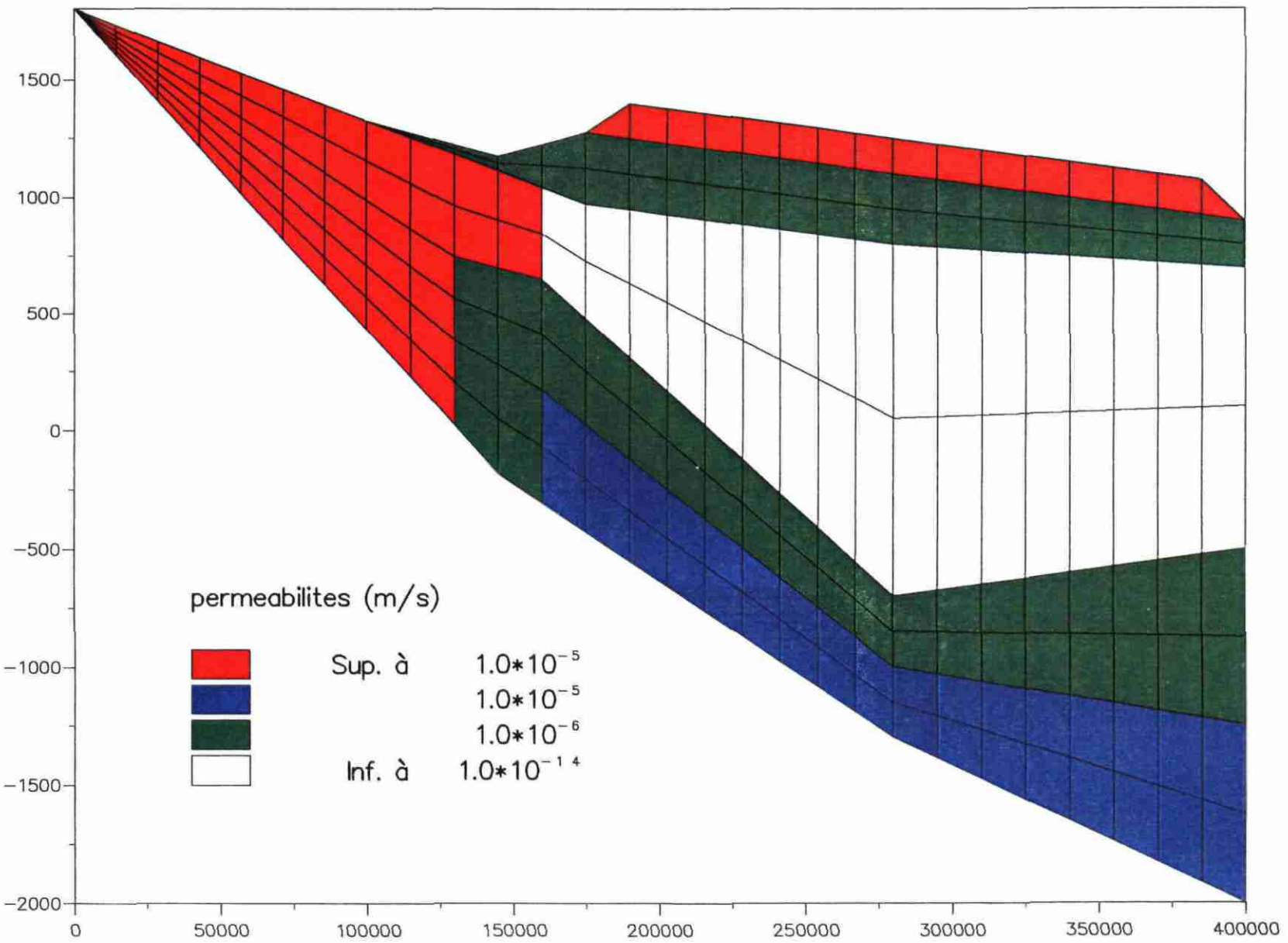
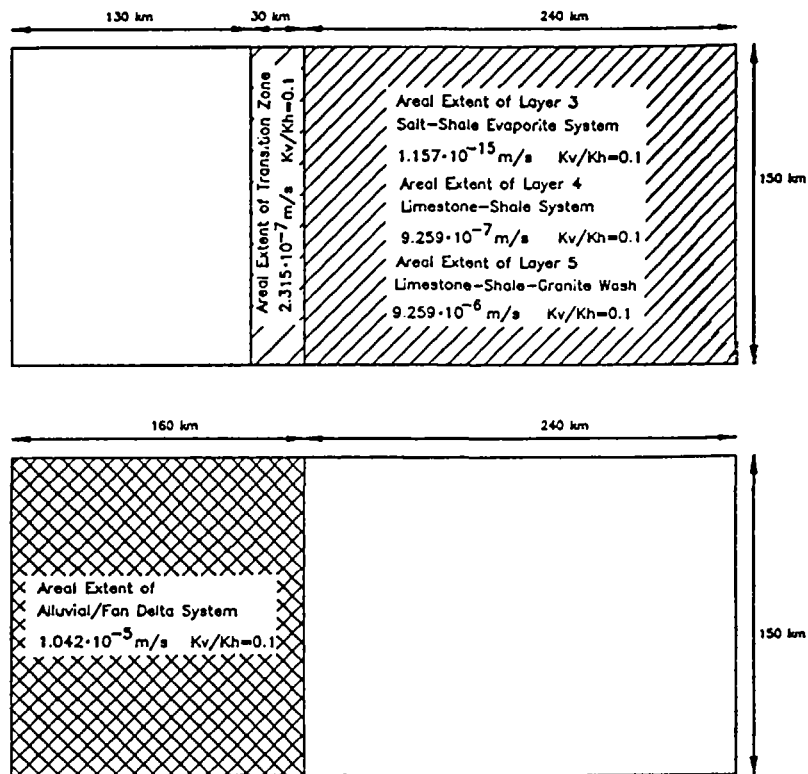


Fig. 4 - Test HYDROCOIN numéro 6.

Modèle 3D en régime permanent, constitué de 1120 éléments 3D.
Méthode de calcul de l'hydrodynamique : Eléments finis conformes linéaires.



Areal extent of the different geological layers.

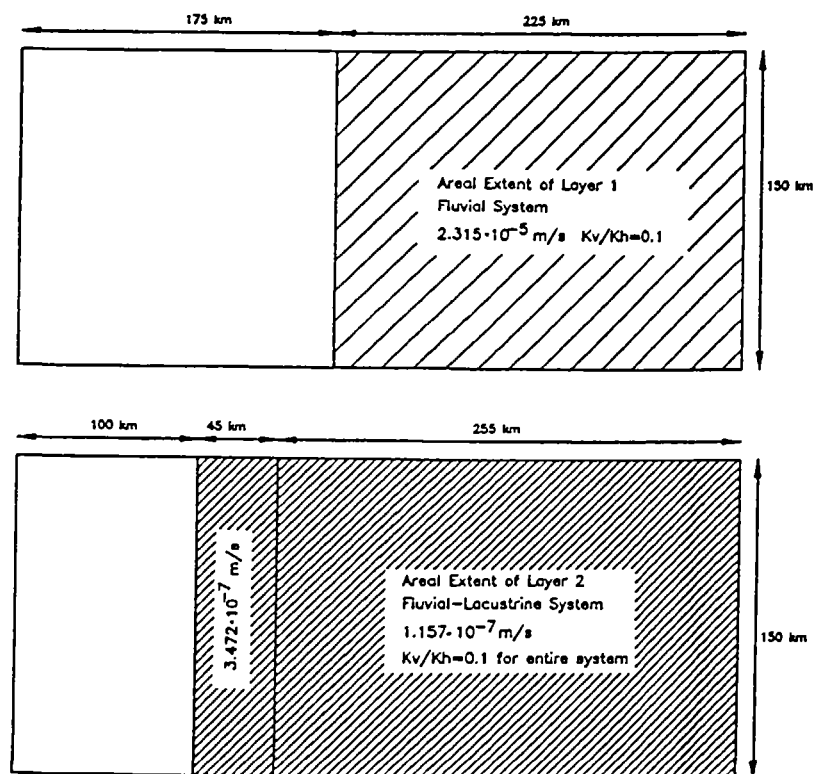
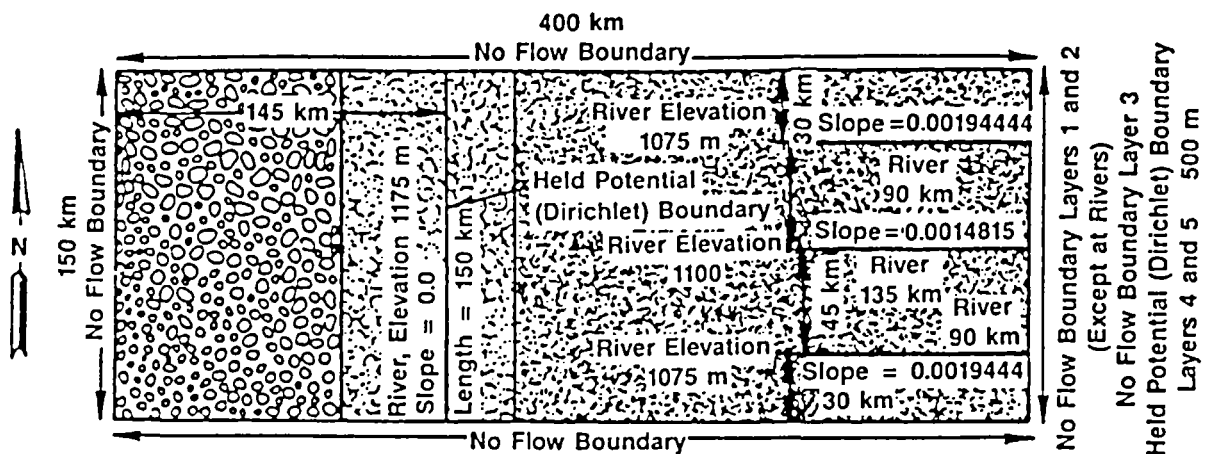


Fig. 4bis - Extension horizontale des différentes structures (couches) géologiques.



Lower: Plan view showing surface drainage and outcrops.

18

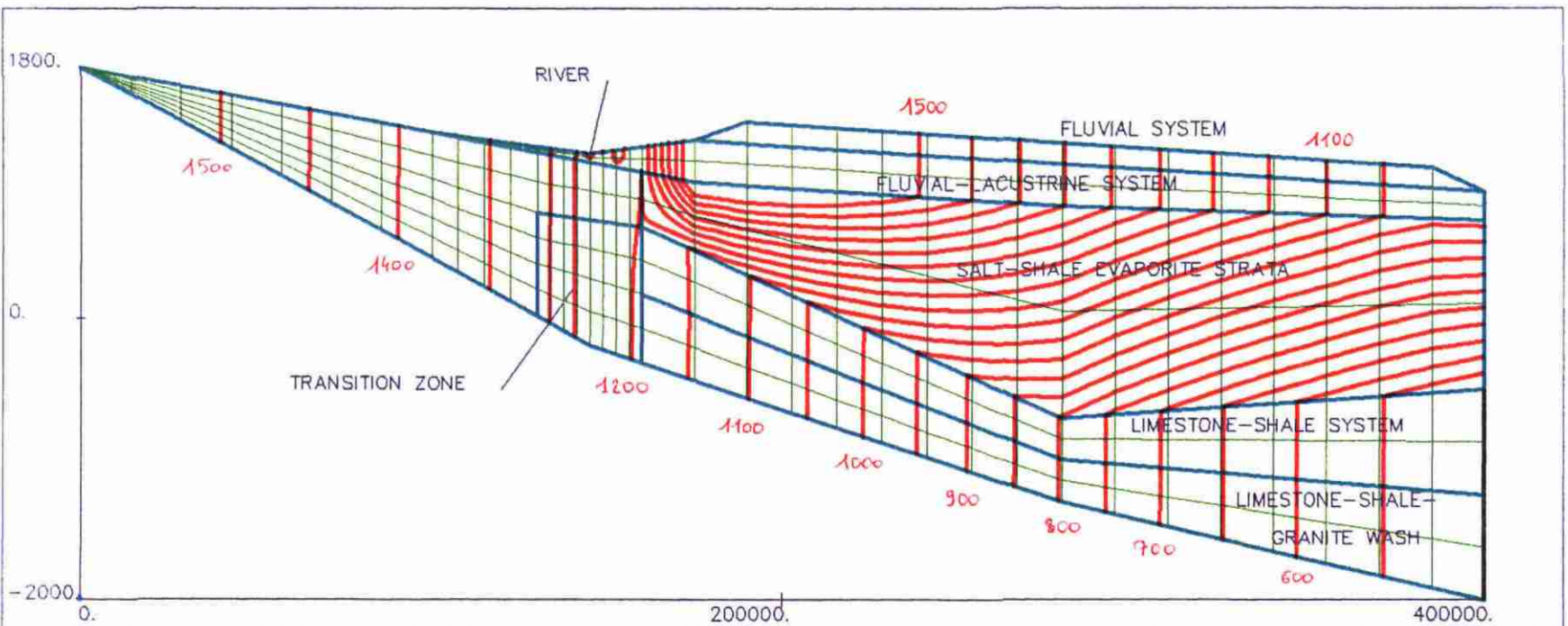


Fig. 5a - Affectation du maillage pour traiter l'exemple de la figure 4ter, et isopotentielle calculées.

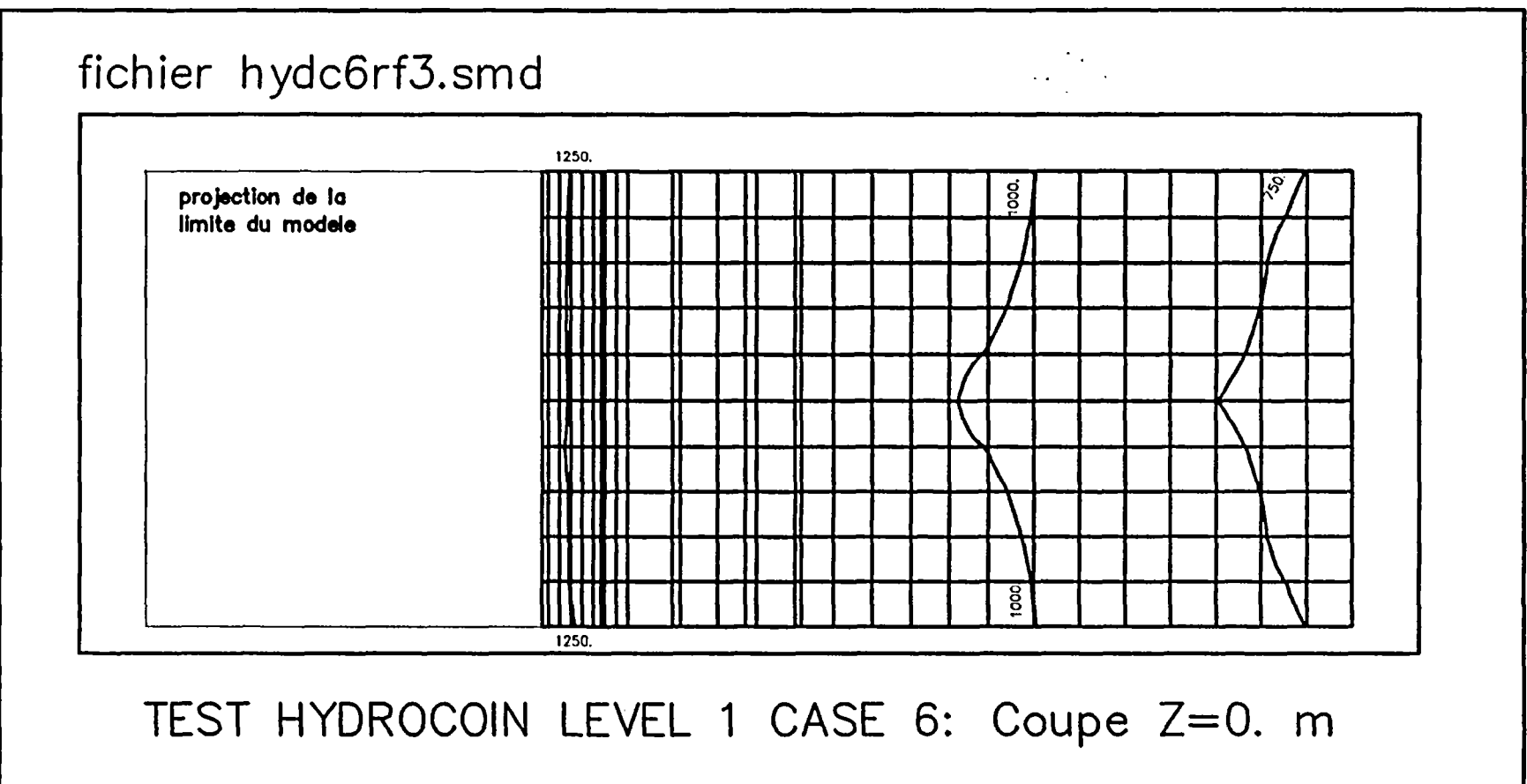


Fig. 5b - Coupe horizontale en $Z = 0.m$.

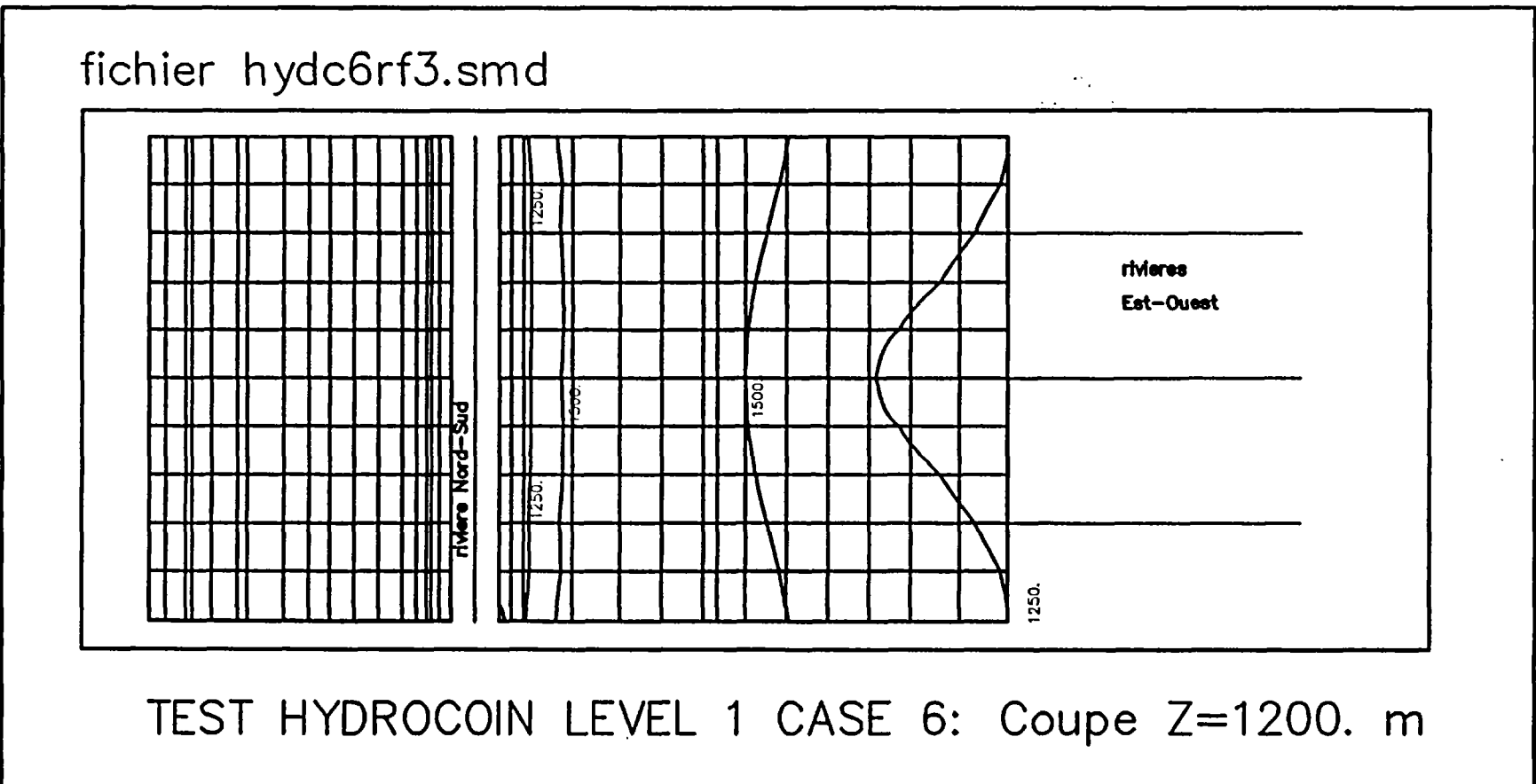


Fig. 5c - Coupe horizontale en Z = 1 200 m.

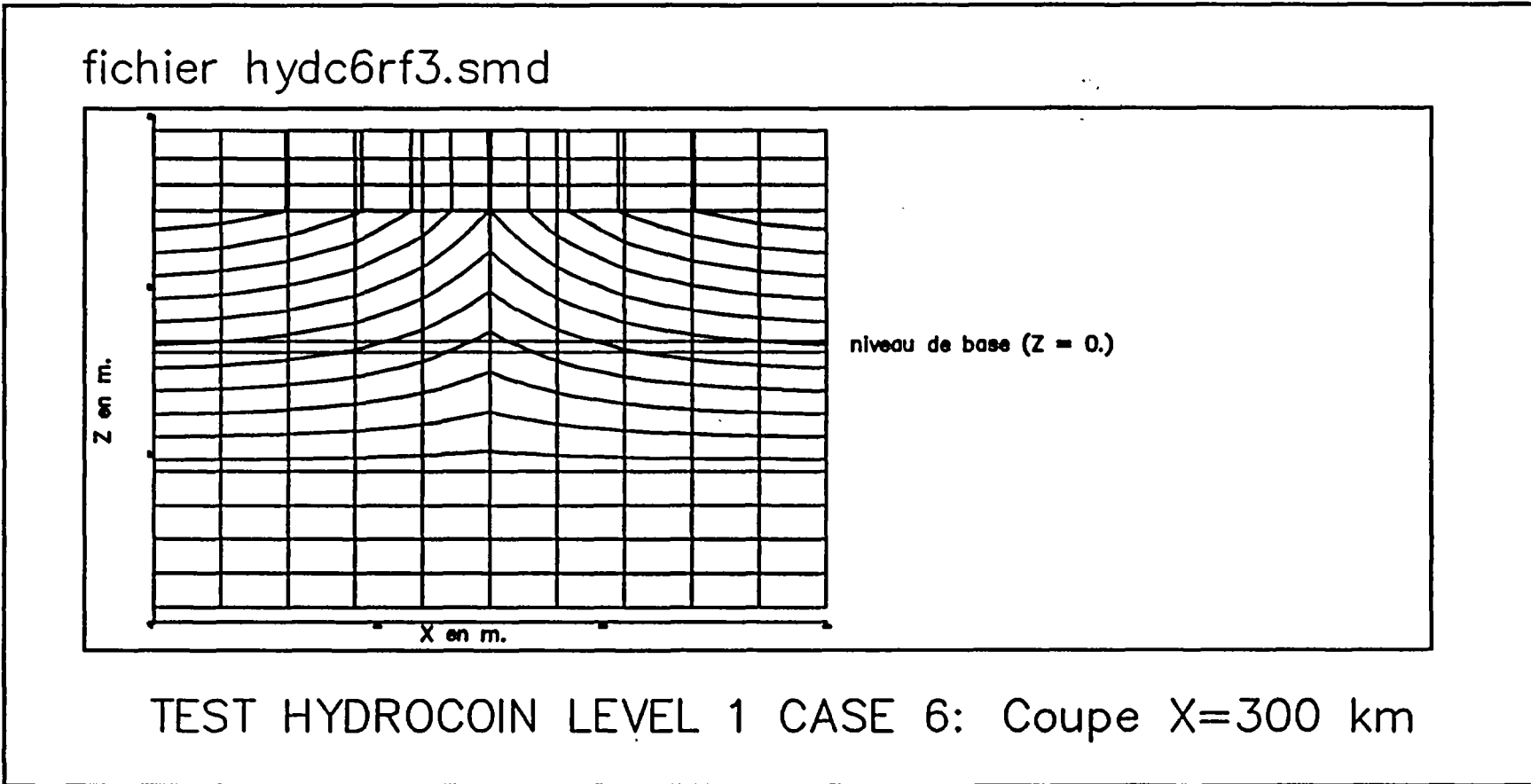


Fig. 5d - Coupe verticale en X = 300 km.

1.4. SIMULATION HYDRODYNAMIQUE 3D (SITE DE NEUVY-BOIN)

Cet exemple est l'étude d'un domaine tridimensionnel présentant deux zones de perméabilités très contrastées.

Etude 2D :

Exemple numéro : 1.4.a						FIGURE: 6a
répertoire des fichiers de données : .DATA.NEUVEY_BO.2D						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom :	type :		X			
SM_NNE11	linéaire		X			
et SM_NNESQ	linéaire					
nombre de noeuds : 1245		étude ANDRA 1992				
nombre d'éléments 1D :						
2 groupes 2D : 1162						
3D :						
Objectif:						
remarques:						

Etude 3D :

Exemple numéro : 1.4.b						FIGURE: 6b et c
répertoire des fichiers de données : .DATA.NEUVEY_BO.3D fichiers de données						
		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom :	type :		X			
SM_N8COB	linéaire					
nombre de noeuds : 3296		étude ANDRA 1992				
nombre d'éléments 1D :						
2D :						
16 groupes 3D :2641						
Objectif:						
remarques: 8 couches d'éléments						

La figure 6a présente une vue en plan (2D) du maillage (réalisé par triangulation de Delaunay pour tenir compte d'un réseau hydrographique dense et d'une géologie complexe) et les charges calculées à l'aide de ce modèle.

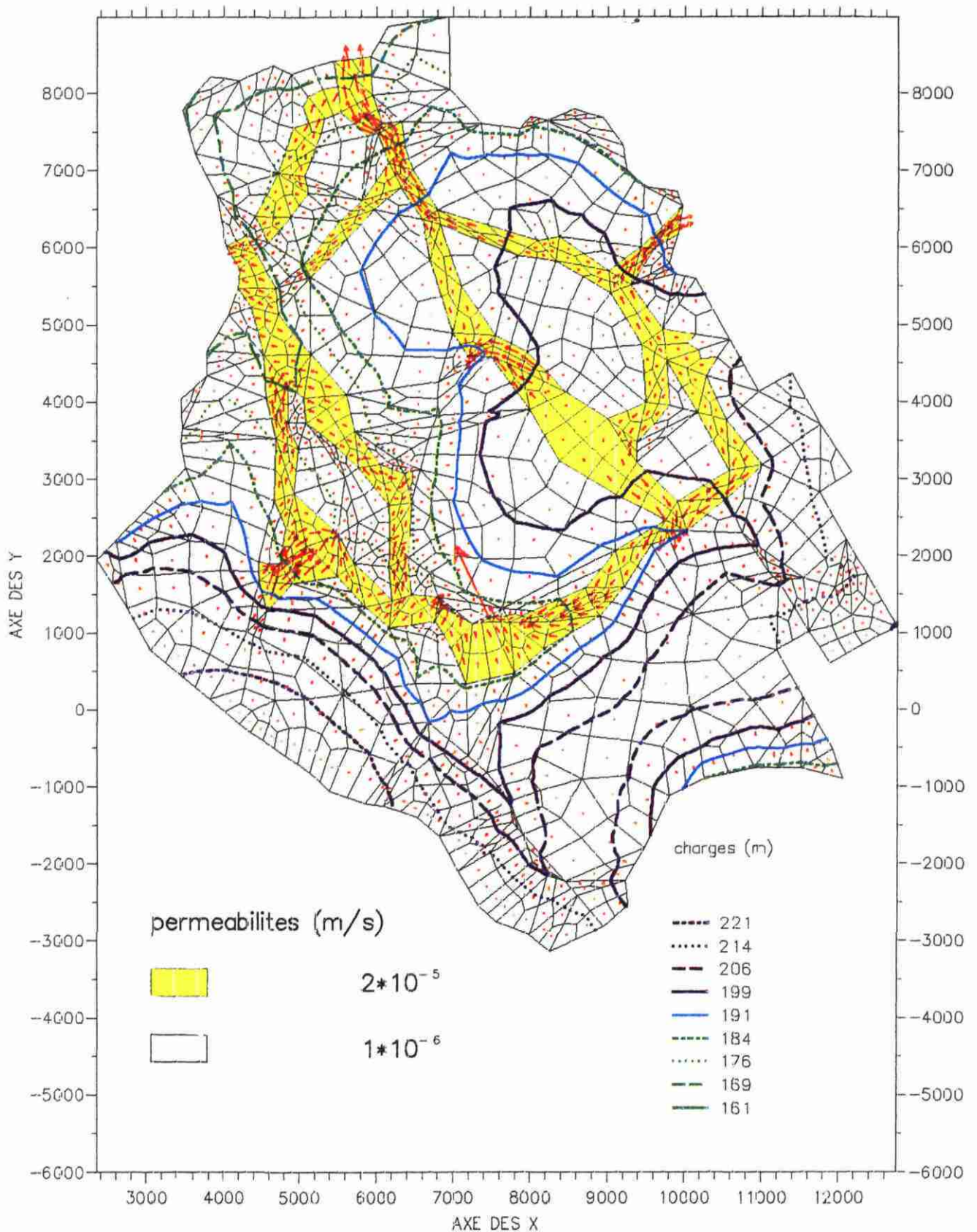
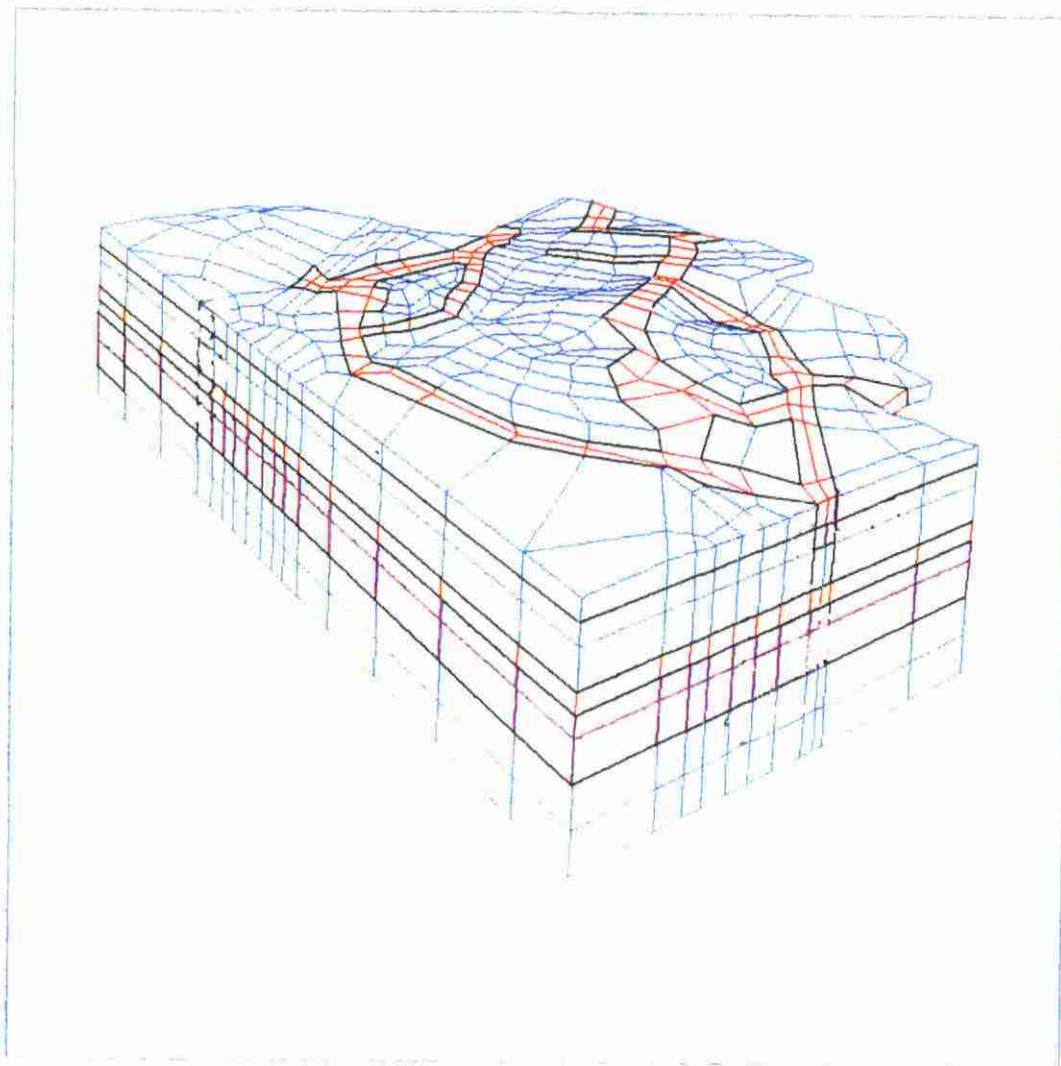


Fig. 6a - Modélisation 2D des écoulements : Site de Neuvy Boin.

Modèle 2D en régime permanent, constitué de 1245 éléments 2D.

Méthode de calcul de l'hydrodynamique : Eléments finis conformes linéaires.



Exemple de maillage

Fig. 6b - Modélisation 3D des écoulements : Site de Neuvy Boin.

Modèle 3D en régime permanent, constitué de 3296 éléments 3D.
Méthode de calcul de l'hydrodynamique : Eléments finis conformes linéaires.

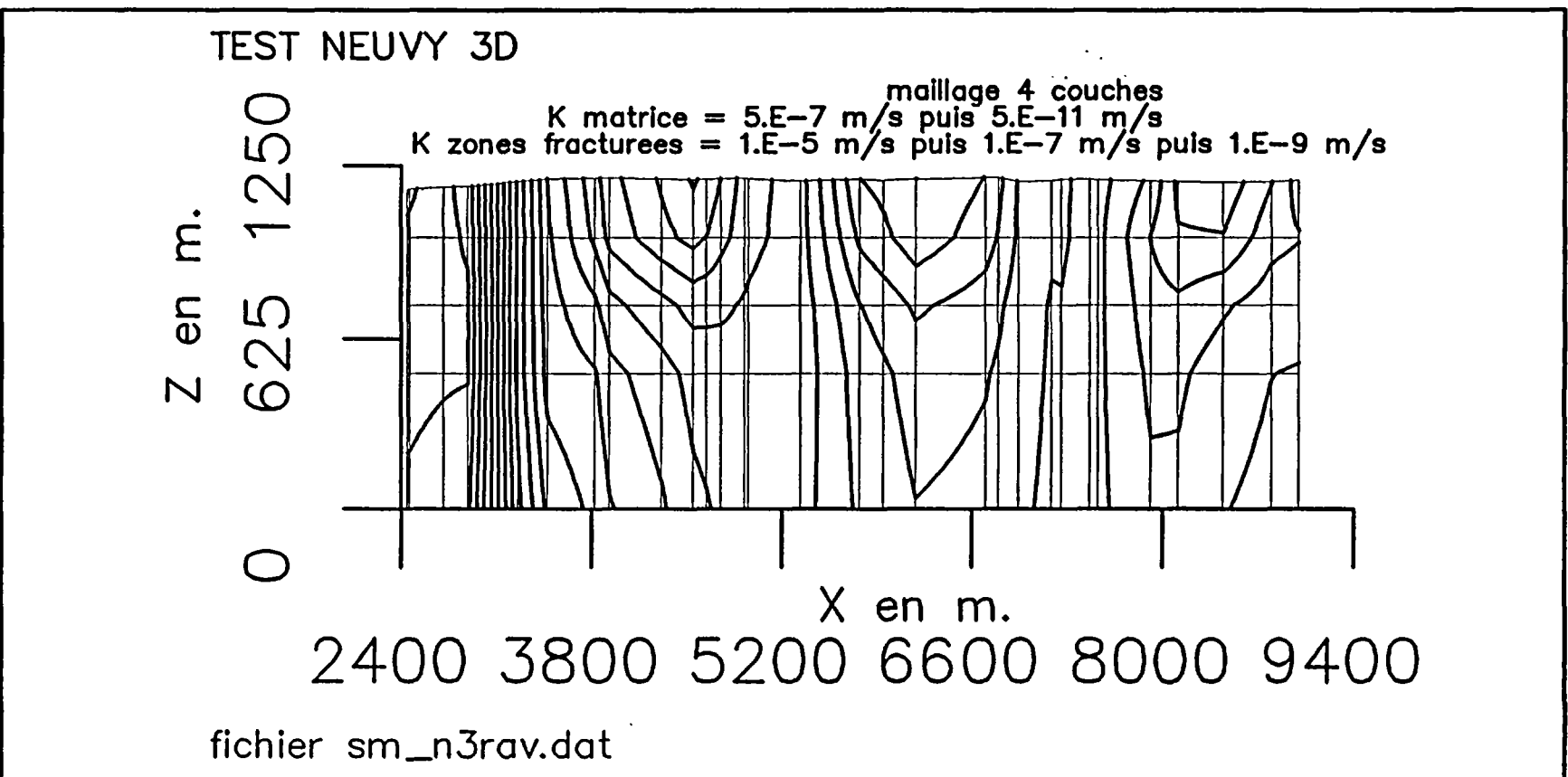


Fig. 6c - Coupe verticale dans le modèle à 4 couches. Organisation des isopotentielles.

1.5. SIMULATION HYDRODYNAMIQUE EN DOMAINE FRACTURE

1.5.1. Simulation 2D en domaine à double porosité

(site de TAYMA : Arabie Saoudite)

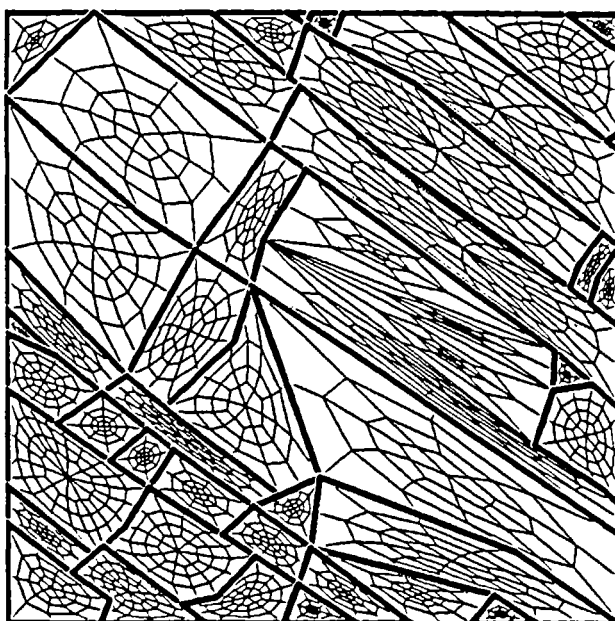
Les éléments hydrauliques monodimensionnels (1D) sont utilisés pour simuler les traces des fractures.

Exemple numéro : 1.5.1.a						FIGURE: 7.a	
répertoire des fichiers de données : .DATA.TAYMA_S fichiers de données							
nom :		type :	.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
TAYMA_94		linéaire		X			
nombre de noeuds : 1661		régime permanent étude Fracturation 1995					
nombre d'éléments 1D : 184							
2D : 1624							
3D :							
Objectif: double porosité en 2D							
remarques:							
- tests avec plusieurs solvers - simulations de pompages d'essais							

Exemple numéro : 1.5.1.b						FIGURE: 7.b
répertoire des fichiers de données :						
.DATA.TAYMA_S						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom :	type :		X			
TABUK_94	linéaire					
nombre de noeuds : 4055		régime permanent étude Fracturation 1995				
nombre d'éléments 1D : 502						
2D : 4018						
3D :						
Objectif: double porosité en 2D						
remarques concernant l'étude fracturation 1995:						
- tests avec plusieurs solvers - simulations de pompages d'essais						

Dans le cadre des études méthodologiques du BRGM, la relation entre la géométrie des réseaux de fractures telle que décrite par les géologues, et les propriétés hydrodynamiques des formations fracturées et à matrice poreuse (double porosité) vis-à-vis d'un ou de plusieurs fluides (eau, huile, gaz), est étudié dans le cadre de projets européens. A l'aide des données disponibles pour Tayma et Tabuk (Arabie Saoudite) différentes approches ont été étudiées (fig. 7a et 7b).

RESEAU ETUDIE SUR LE SITE DE TAYMA



Tenseur de perméabilité: TAYMA600 en echelle Logarithmique

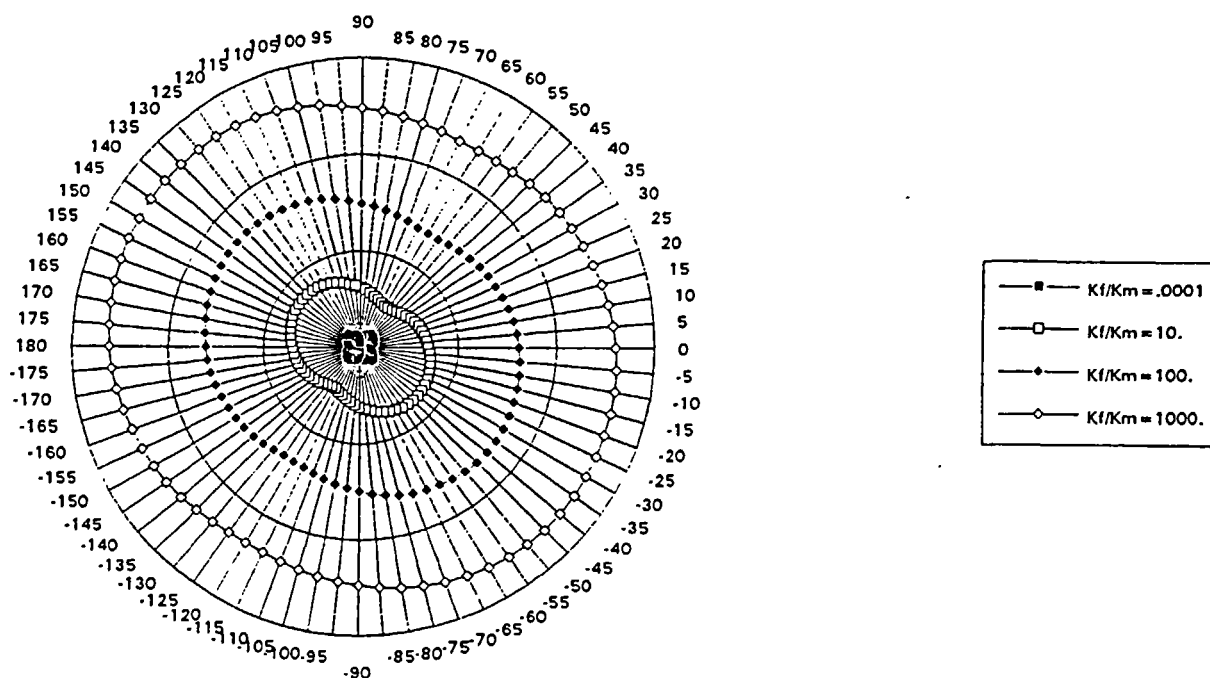
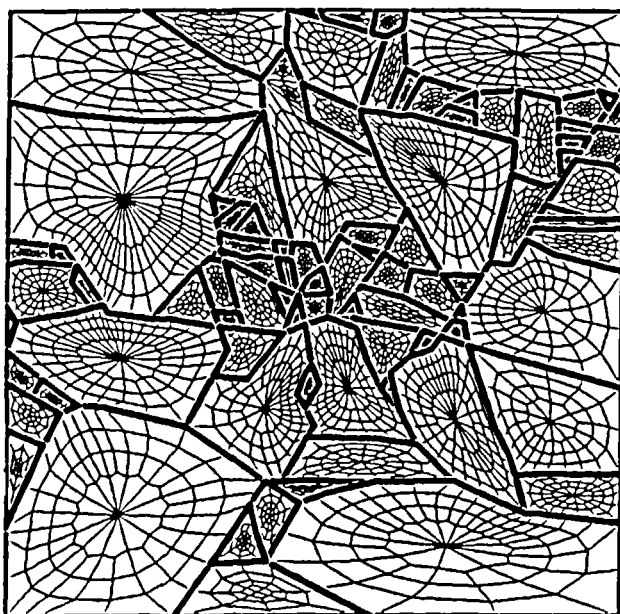


Fig. 7a - Modélisation 2D en domaine à double porosité : site de Tayma (Arabie Saoudite).

Modèle 2D en régime permanent, constitué de 1624 éléments 2D simulant la matrice poreuse et de 184 éléments 1D simulant les fractures.
Méthode de calcul de l'hydrodynamique : Eléments finis conformes linéaires.

RESEAU ETUDIE SUR LE SITE DE TABUK



Tenseurs de perméabilité: TABUK200 en echelle Logarithmique

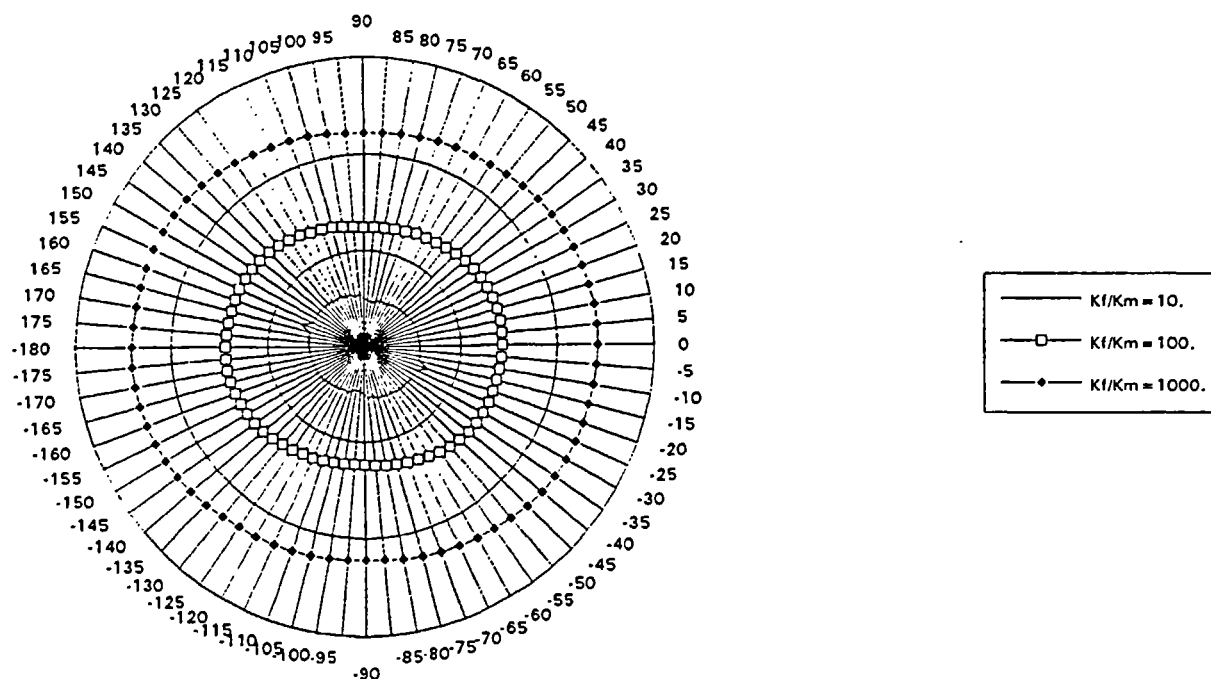


Fig. 7b - Modélisation 2D en domaine à double porosité : site de Tabuk (Arabie Saoudite).

Modèle 2D en régime permanent, constitué de 4018 éléments 2D simulant la matrice poreuse et de 502 éléments 1D simulant les fractures.

Méthode de calcul de l'hydrodynamique : Eléments finis conformes linéaires.

1.5.2. Simulation 3D en domaine à double porosité (site d'ÄSPÖ : Suède)

Les éléments hydrauliques bidimensionnels (2D) sont des éléments plans à quatre sommets orientables à volonté dans le système global des coordonnées X-Y-Z. Ils permettent de simuler le réseau des fractures. Les jeux de données correspondant à ces trois exemples, correspondent donc à une approche double porosité du domaine modélisé :

Exemple numéro : 1.5.2						FIGURE: 8
répertoire des fichiers de données :						
.DATA.ASPO1994						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom :	type :					
AS18FRAC	linéaire		X			
AS22FRAC	linéaire		X			
AS26FRAC	linéaire		X		X	
nombre de noeuds :		simulations permanentes et transitoires etude ANDRA/SKB 1994 et 1995				
18 fractures	8143					
22 fractures	11167					
26 fractures	15033					
nombre d'éléments	1D : X					
	2D : fractures					
	3D : matrice					
Objectif: simulation 3D double porosité						
remarques: 18, 22 ou 26 plans de fractures dans les modèles						
(cf. mailleur automatique double porosité 3D)						

Dans les trois cas, il s'agit de construire le modèle conceptuel du site de stockage d'ÄSPÖ tel que décrit par les géologues suédois du SKB.

Le modèle le plus complexe, AS26FRAC est représenté sur la figure 8 page suivante. Il est en fait constitué de 22 fractures et de 4 plans additionnels permettant d'affiner le maillage à proximité des conditions latérales aux limites, conditions en pressions hydrostatiques imposées.

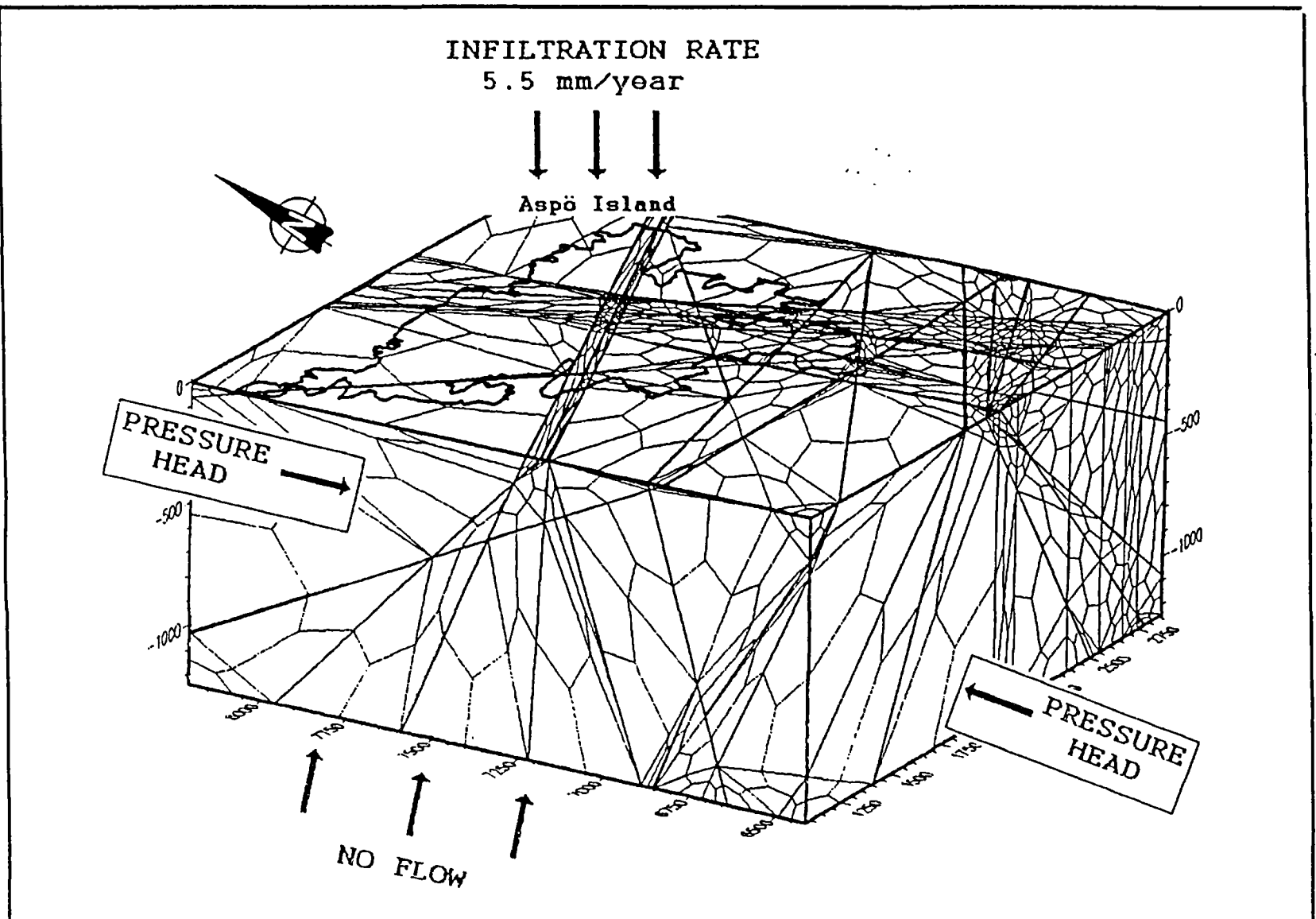


Fig. 8 - Modélisation 3D en domaine à double porosité (site d'ASPÖ: Suède).

Modèle 3D en régime permanent et transitoire, constitué de 15033 noeuds et de 17418 éléments 2D (fractures) et 3D (matrice poreuse).
Méthode de calcul de l'hydrodynamique : Éléments finis conformes linéaires.

1.6. DIFFERENTES METHODES DE SIMULATIONS HYDRODYNAMIQUES

1.6.1. Simulation par la méthode des éléments finis conformes

Les contributions élémentaires sont directement construites à l'aide de fonctions d'interpolations scalaires et nodales. Le champ de vitesse est dérivé élément par élément. Il est donc discontinu aux faces des éléments et est interpolé pour le tracé des trajectoires et le déplacement des particules.

1.6.2. Simulation par la méthode des éléments mixtes hybrides

Les contributions élémentaires sont construites à l'aide de fonctions d'interpolations vectorielles définies à l'aide des faces de l'élément. Les vitesses sont continûment définies au travers du maillage. Leurs expressions aux faces satisfont les critères du calcul de trajectoires par la méthode de Pollock.

1.6.3. Comparaison sur un exemple : Pompage dans un écoulement régional

Le même modèle est testé successivement avec des éléments conformes linéaires, puis des éléments quadratiques (fig. 9), et enfin des éléments mixtes hybrides (fig. 10).

Exemple numéro : 1.6						FIGURE: 9 et 10
répertoire des fichiers de données : .DATA.POMPAMLN.MONOCOMP						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom :	type :					
LINEIMLN	linéaire	X		X		
QUADIMLN	quadrat.	X		X		
MIXTIMLN	mixte	X		X		
nombre de noeuds : 663		maillage GTTS (M.L. NOYER 1995)				
nombre d'éléments 1D :						
2D : 618						
3D :						
Objectif: comparaison des méthodes (voir aussi: transport multicomposant)						
remarques:						
Les bonnes trajectoires avec des éléments conformes (linéaires et quadratiques) sont obtenus en imposant un flux nul sur les limites latérales.						

Lorsque le maillage est parfaitement adapté au problème traité (comme c'est le cas ici), les trois méthodes donnent donc des résultats assez similaires en terme de champ de charge et de trajectoires calculées (fig. 9 et 10).

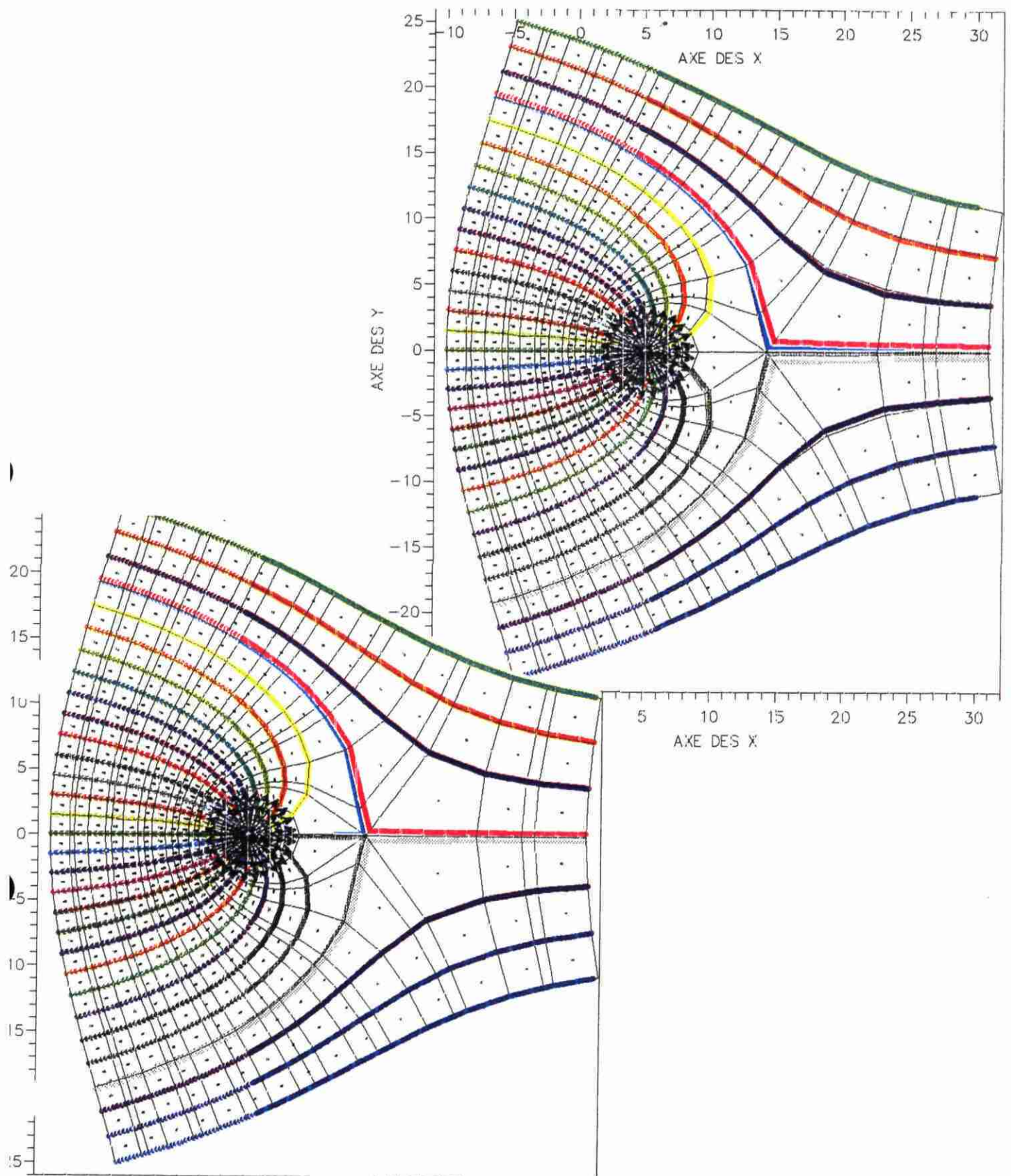
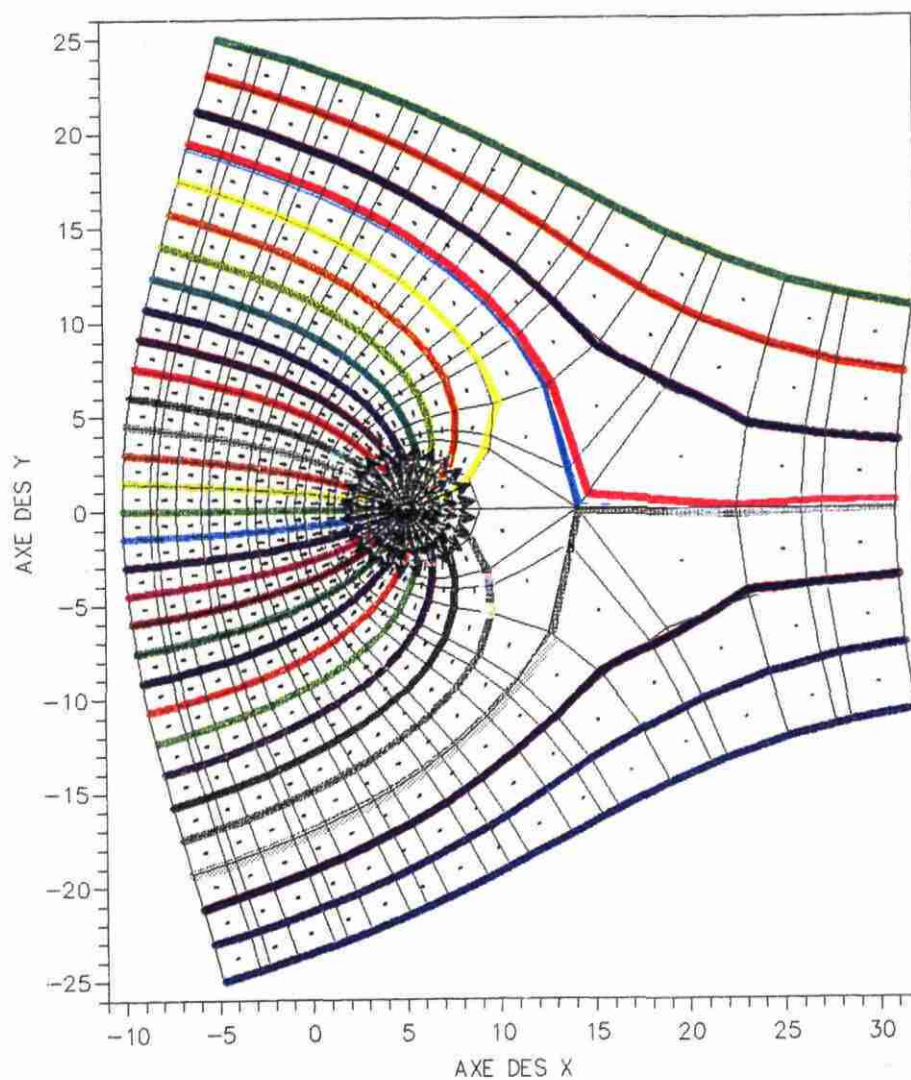


Fig. 9 - Modélisation 2D d'un pompage dans un écoulement régional : méthode conforme.

Modèle 2D en régime permanent. Comparaison des trajectoires.

Méthode de calcul de l'hydrodynamique : Eléments finis conformes (linéaires et quadratiques).



UNIGRID 6.3 25-JAN-96 A 11-15:36

Fig. 10 - Modélisation 2D d'un pompage dans un écoulement régional : méthode mixte hybride.

Modèle 2D en régime permanent. Comparaison des trajectoires.
Méthode de calcul de l'hydrodynamique : Eléments finis mixtes hybrides.

1.7. CHAMP DE VITESSES ET TRACES DE TRAJECTOIRES

1.7.1. Simulation 2D

a) Test HYDROCOIN 2 en régime permanent

Cet exemple présente le tracé des vitesses et des trajectoires en 2D.

Exemple numéro : 1.7.1.a						FIGURES: 11/12
répertoire des fichiers de données : .DATA.HYDROCO2						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom :	type :					
LINEHYDR	linéaire		X			
QUADHYDR	quadrat.		X			
MIXTHYDR	mixte		X			
nombre de noeuds : 448						
nombre d'éléments 1D :						
2D : 441						
3D :						
Objectif: comparaison mixte hybride et linéaire						
remarques:						

b) Site de FINNSJON : Suède, en régime transitoire

Exemple numéro : 1.7.1.b						FIGURE: 13	
répertoire des fichiers de données : .DATA.FINNSJON fichiers de données							
nom :		type :	.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
SM_FI2NE		linéaire		X			
nombre de noeuds		: 1485					
nombre d'éléments		1D :					
(8 groupes)		2D : 1404					
		3D :					
Objectif:							
remarques:							

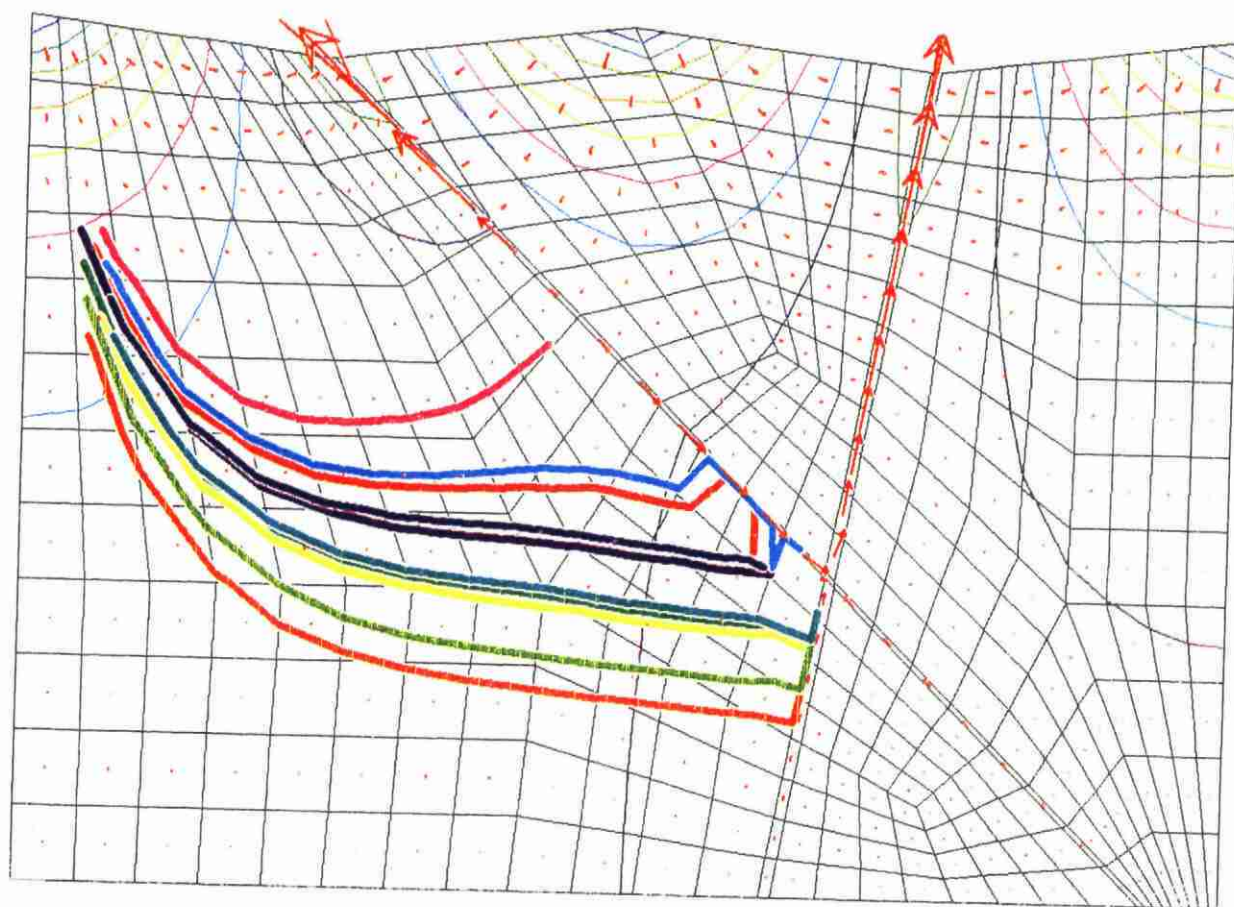


Fig. 11 - Test HYDROCOIN numéro 2.

Méthode de calcul de l'hydrodynamique : Eléments finis linéaires.

Les trajectoires tracées avec ce maillage sont donc insatisfaisantes pour un calcul avec des éléments linéaires : la mauvaise précision des vitesses (construites par élément) dérivées numériquement du champ de charge, ne permet pas d'appliquer correctement la méthode de tracé de trajectoire de Pollock, puisque localement les hypothèses de tracé ne sont pas respectées ($\text{div } V \neq 0$).

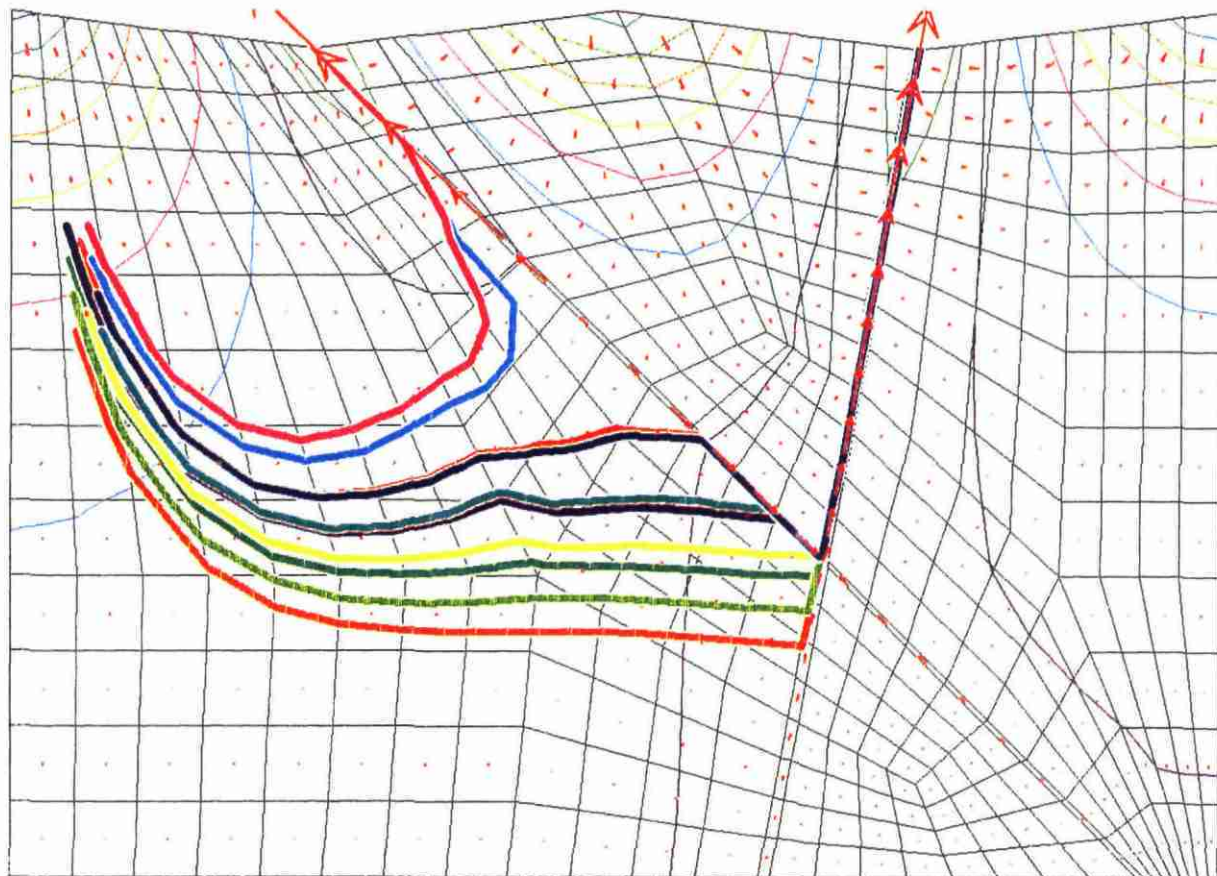


Fig. 12 - Test HYDROCOIN numéro 2 (suite).

Méthode de calcul de l'hydrodynamique : Eléments finis mixtes hybrides.

Les trajectoires issues des mêmes points de départ que sur la figure précédente (fig. 11), sont cette fois beaucoup plus réalistes et présentent une circulation dans les 2 fractures cohérente avec le champ des charges calculées.

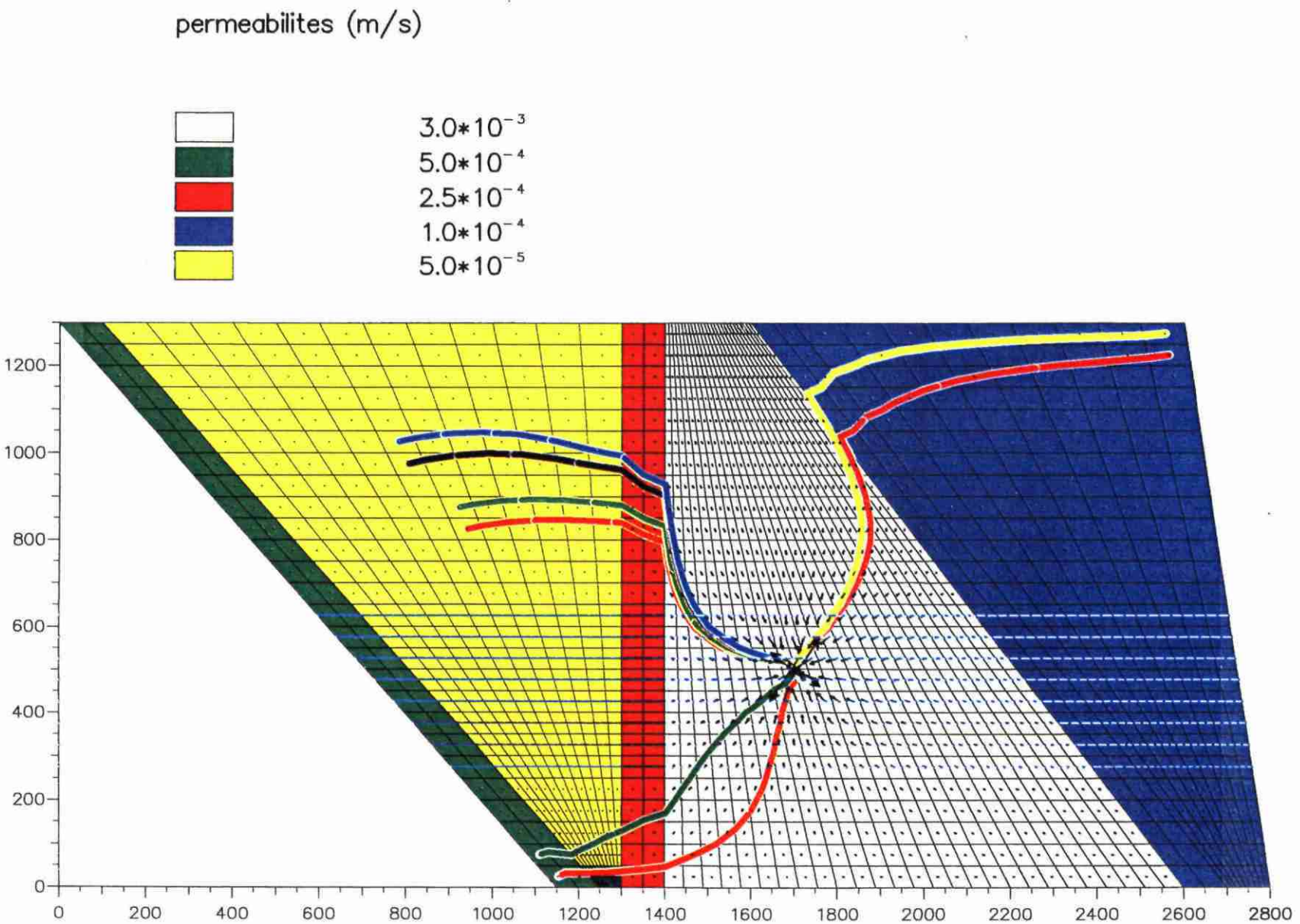


Fig. 13 - Site de Finnsjön (Suède).

Méthode de calcul de l'hydrodynamique : Eléments finis conformes linéaires.

1.7.2. Simulation 3D : (benchmark SAUTY-KINZELBACH)

Cet exemple présente le tracé des vitesses et des trajectoires en 3D.

Exemple numéro : 1.7.2						FIGURE : 14
répertoire des fichiers de données : .DATA.SAUTKINZ						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom : SAUTKINZ	type : linéaire	X		.TMD		
nombre de noeuds : 3751						
nombre d'éléments 1D :						
2D : 100						
3D : 3000						
Objectif : benchmark						
remarques : une fracture et une interface hétérogène, dans un écoulement en rotation 3D						

Dans un bloc cubique de 100 m de côté, la partie inférieure est composée sur 20 m d'extension verticale, d'un matériau de perméabilité 10 fois plus forte.

De plus, une fracture plus transmissible que son encaissant est noyée dans ce bloc, avec une inclinaison (pendage) importante vers l'est, qui lui permet de traverser le bloc d'une côte -10 m sur sa face ouest, à une côte -80 m sur sa face est.

Un fort écoulement en rotation est de plus imposée à l'aide de deux conditions limites en charge imposée, tel qu'illustré sur la page suivante en bas de la figure 14.

Les trajectoires 3D calculées sont correctes, comme le montrent leurs projections dans 3 plans orthogonaux sur la figure 14.

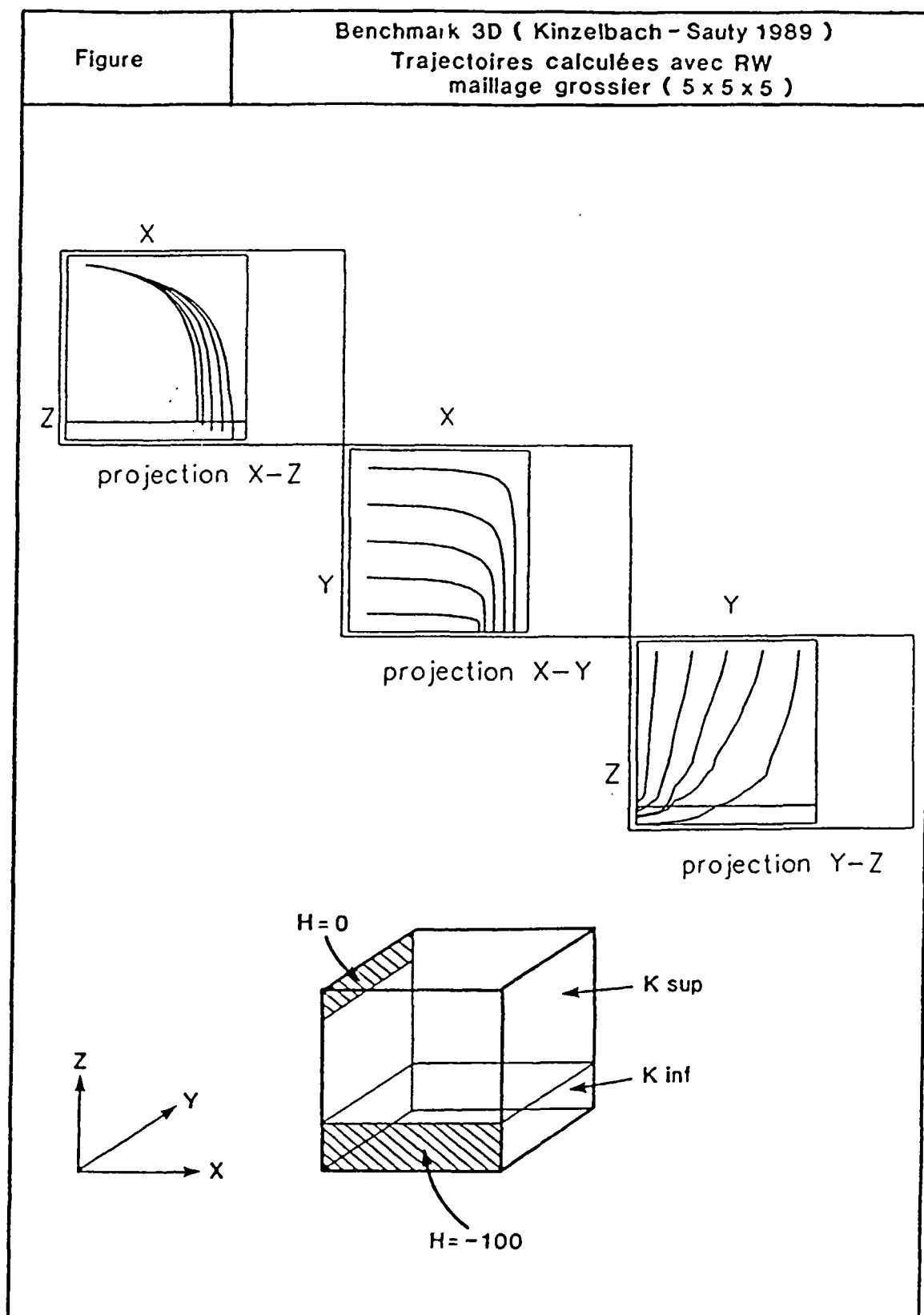


Fig. 14 - Trajectoires 3D : Benchmark Sauty - Kinzelbach.

2. Modélisation de transport de masse ou de chaleur

2.1. TRANSPORT D'UN SOLUTE

Préambule : Importance des trajectoires

Les trajectoires calculées analytiquement sont la base du transport pour les méthodes PT-RW et MOC.

De l'exactitude du tracé des trajectoires dépend le comportement du transport dans des zones de fortes hétérogénéités, c'est à dire où le champ de vitesse est perturbé. Pour illustrer l'importance de ce tracé, l'exemple suivant présente des trajectoires autour d'une hétérogénéité (sans transport réel). En fonction de la méthode utilisée pour le calcul de l'hydrodynamique, les trajectoires obtenues sont nettement différentes à proximité de cette hétérogénéité.

Exemple numéro : 2.1						FIGURE : 15 / 16
répertoire des fichiers de données : .DATA.BLOC_HET						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom :	type :					
LINEBLOC	linéaire		X			
QUADBLOC	quadrat.		X			
MIXTBLOC	mixte		X			
nombre de noeuds : 121						
nombre d'éléments 1D :						
2D : 100						
3D :						
Objectif : comparaison des trajectoires autour d'une hétérogénéité						
remarques :						
bloc hétérogène de perméabilité constitué des 16 éléments centraux						

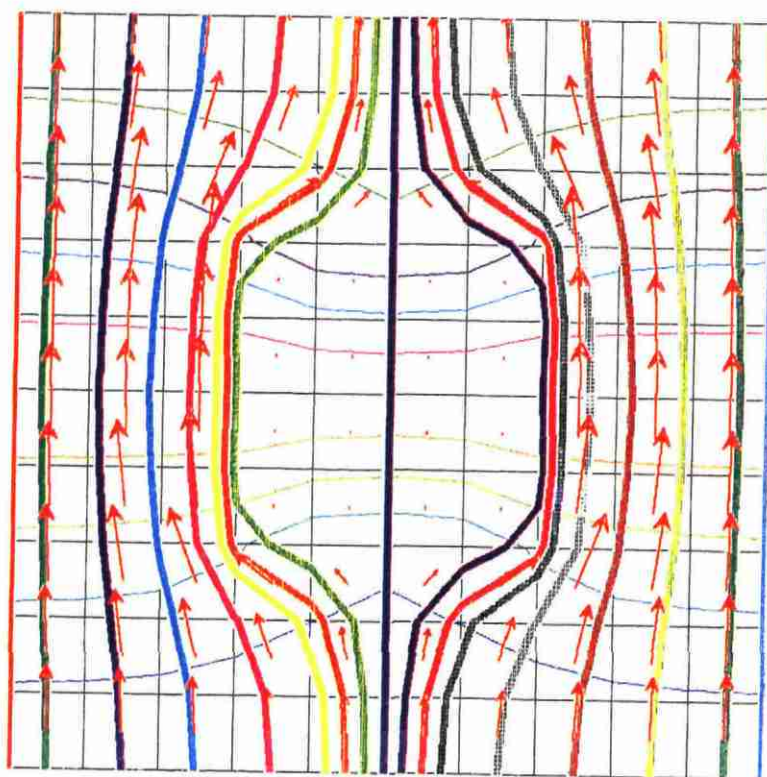
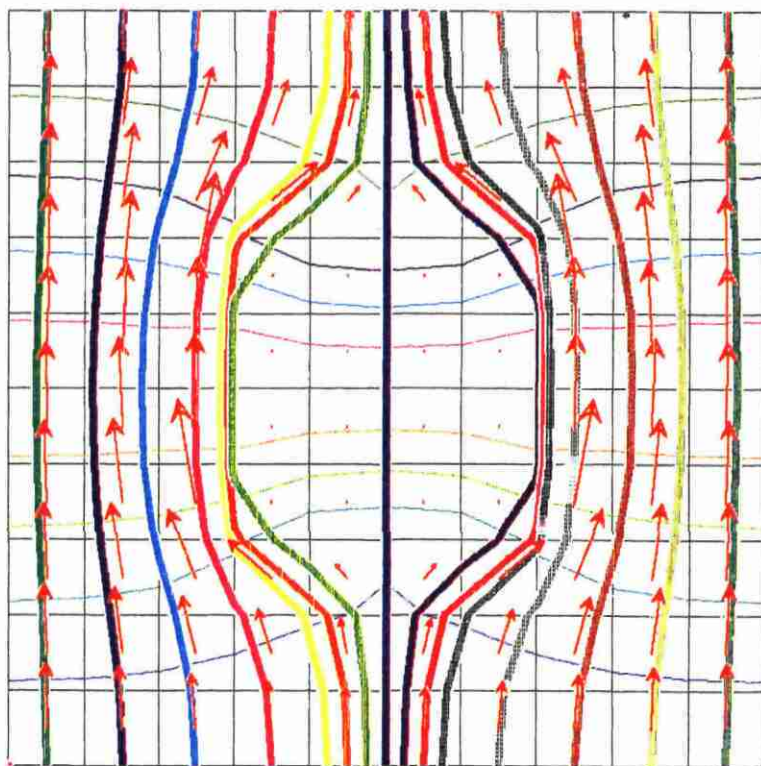
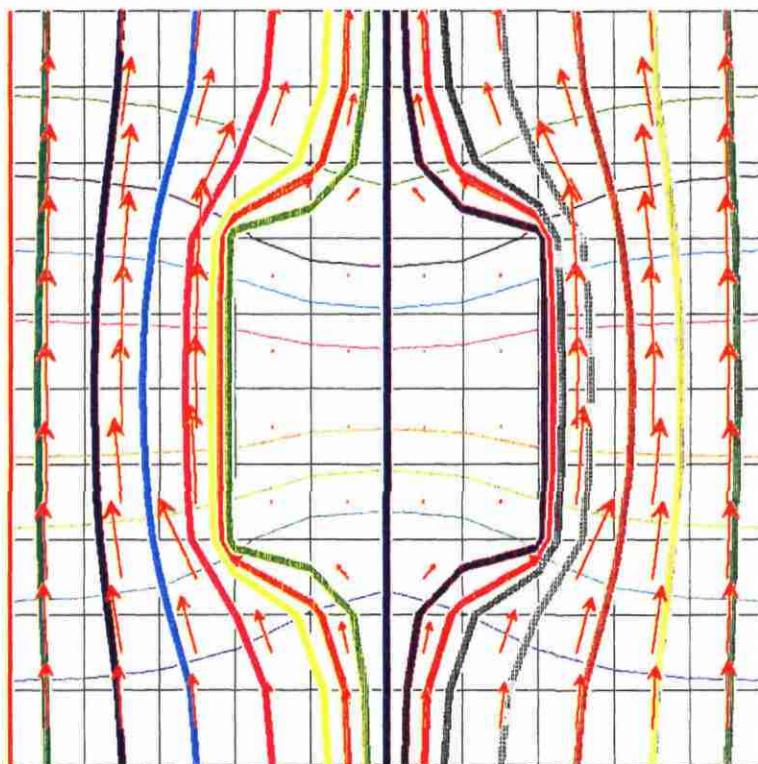


Fig. 15 - Comportement des trajectoires autour d'un bloc de faible perméabilité.

Méthode conforme : Eléments linéaires et quadratiques.



UNIGRID 6.3

7-JUL-05 A: 17:59:25

Fig. 16 - Comportement des trajectoires autour d'un bloc de faible perméabilité.

Méthode mixte hybride.

La supériorité de la méthode mixte-hybride est donc sans appel en terme de trajectoires en milieu hétérogène, donc aussi en terme de transfert de masse ou d'énergie avec des méthodes à particules tout particulièrement.

Le transport d'un soluté est réalisé par l'une des trois méthodes déjà décrites, à savoir :

- une méthode d'éléments conforme (CFEM) avec un choix de plusieurs schémas d'intégration temporelle (Cranck-Nicolson ou Leismann-Frind) ;
- une méthode de transport de particules (PT : Particles Tracking) suivant un processus de marche au hasard (RW : Random Walk) ;
- une méthode mixte entre les deux premières (MOC : Method Of Characteristics).

2.1.1. Exemples 1D : Injection continue et injection instantanée

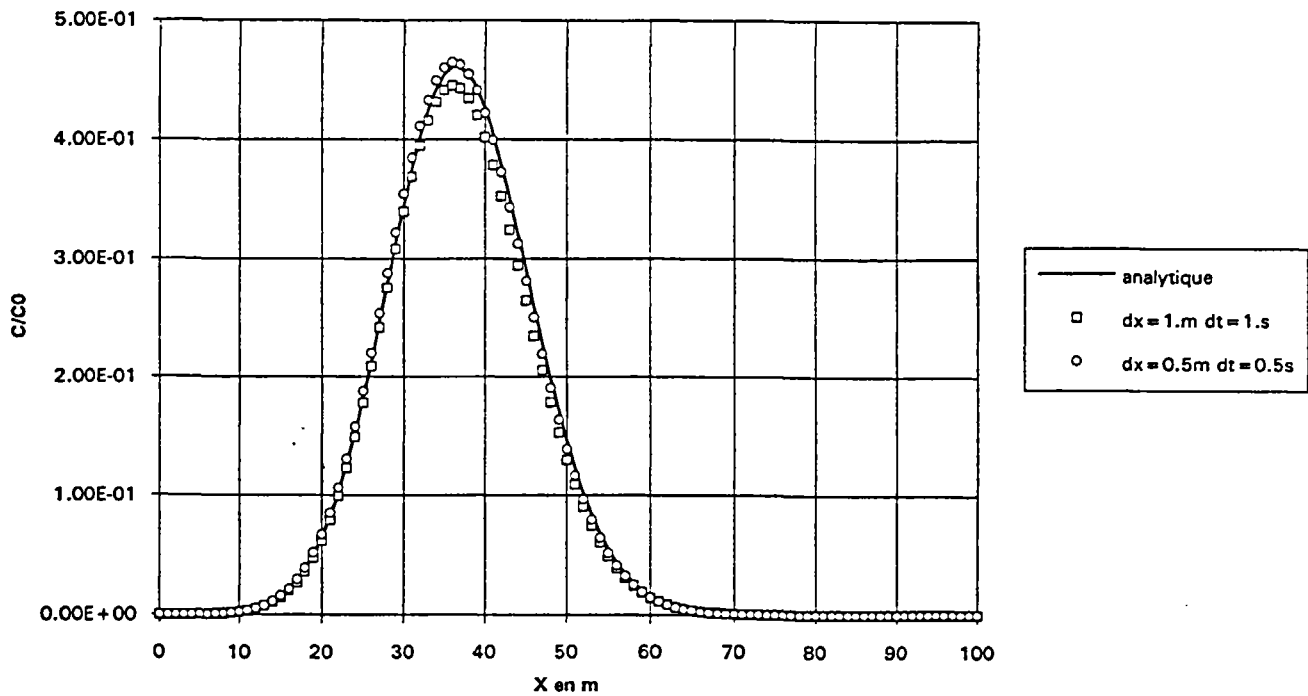
Exemple numéro : 2.1.1						FIGURE : 17
répertoire des fichiers de données :						
.DATA.TESTMONO						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom :	type :					
CONT_FIX	linéaire	X		TMD		
FIXSHORT	linéaire	X		TMD		
RAFSHORT	linéaire	X		TMD		
nombre de noeuds : 404						
nombre d'éléments 1D :						
2D :						
3D : 100						
Objectif : comparaison avec des solutions analytiques						
remarques :						
CONT_FIX : concentration fixée continûment à l'amont						
FIXSHORT : concentration fixée pendant 10 s. seulement						
RAFSHORT : idem mais avec raffinement X 2 du pas de temps (80 pas de 0.5 s)						
et du pas d'espace (200 pas de 0.5 m)						

La figure 17 présente une injection instantanée (figure du haut), pour une discrétisation spatiale et temporelle grossière (FIXSHORT) et pour une discrétisation spatiale et temporelle plus fine (RAFSHORT).

La figure du bas correspond à une injection continue à concentration imposée (CONT_FIX).

Les trois exemples sont traités avec la méthode de transport par éléments conformes (CFEM), pour un schéma de discrétisation de Leisman et Frind (CFEM_LF).

comparaison analytique / taffetas (CFEM_lf)



comparaison analytique / taffetas (CFEM_lf)

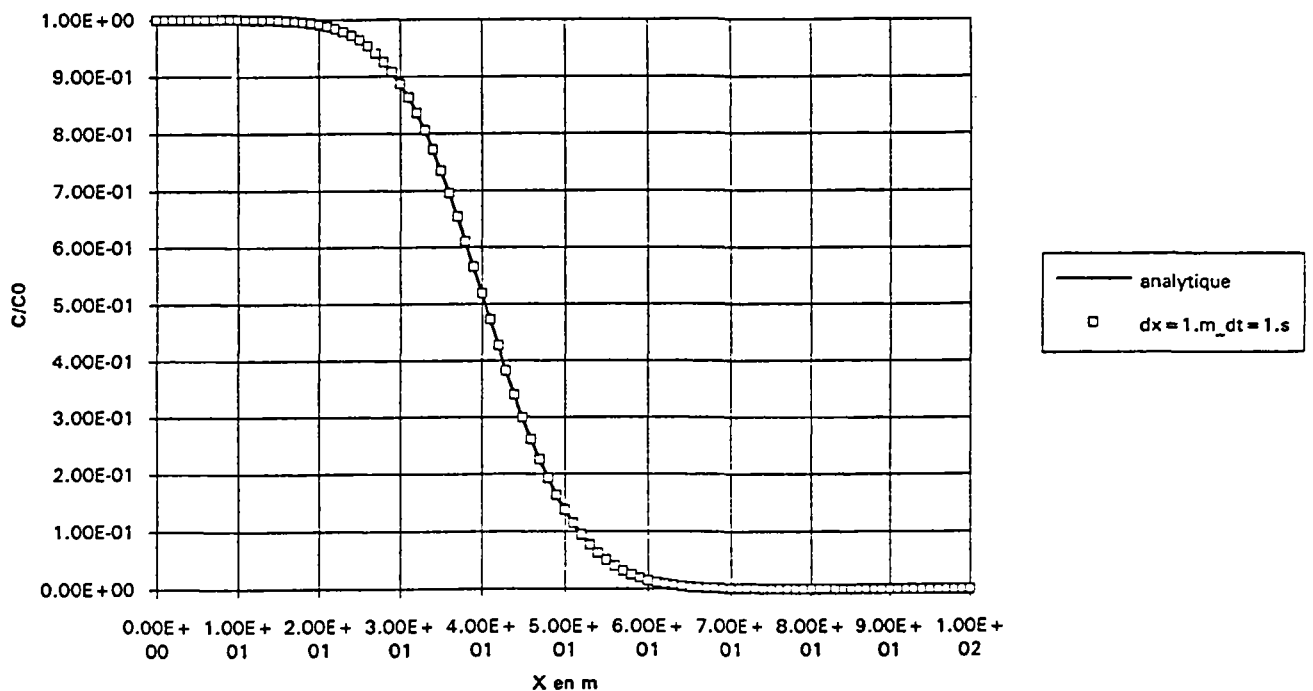
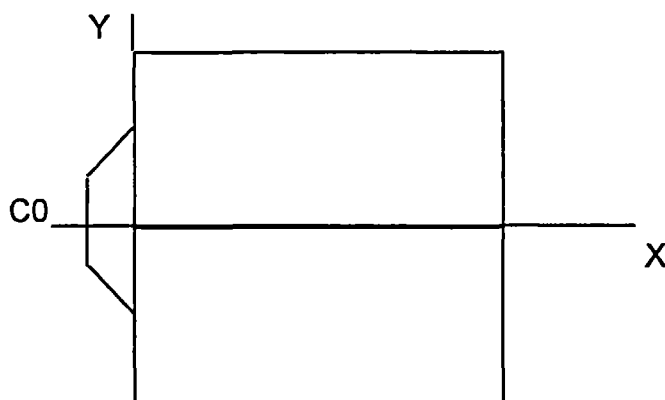


Fig.17 - Transport monodimensionnel : Comparaison après 40 s entre solutions analytiques exactes et résultats numériques calculés avec TAFFETAS.

Méthode conforme : éléments linéaires : injection continue (en bas) et injection brève (en haut)

2.1.2. Exemples 2D : solution de CLEARY

Exemple numéro : 2.1.2						FIGURE : 18	
répertoire des fichiers de données : .DATA.CLEARY_S fichiers de données							
nom :		type :	.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
GROSANGL		linéaire		X	TMD		
nombre de noeuds : 130							
nombre d'éléments 1D :							
2D : 108							
3D :							
Objectif : comparaison avec une solution analytique							
remarques : (voir aussi : maillage adaptatif)							



Définition du problème : injection à C_0 imposée entre $\pm \Delta Y$.

La figure 18 présente le profil de concentration le long de l'axe X pour 3 pas de temps donnés. A chaque pas de temps, la correspondance avec la solution analytique proposée par Cleary, est excellente.

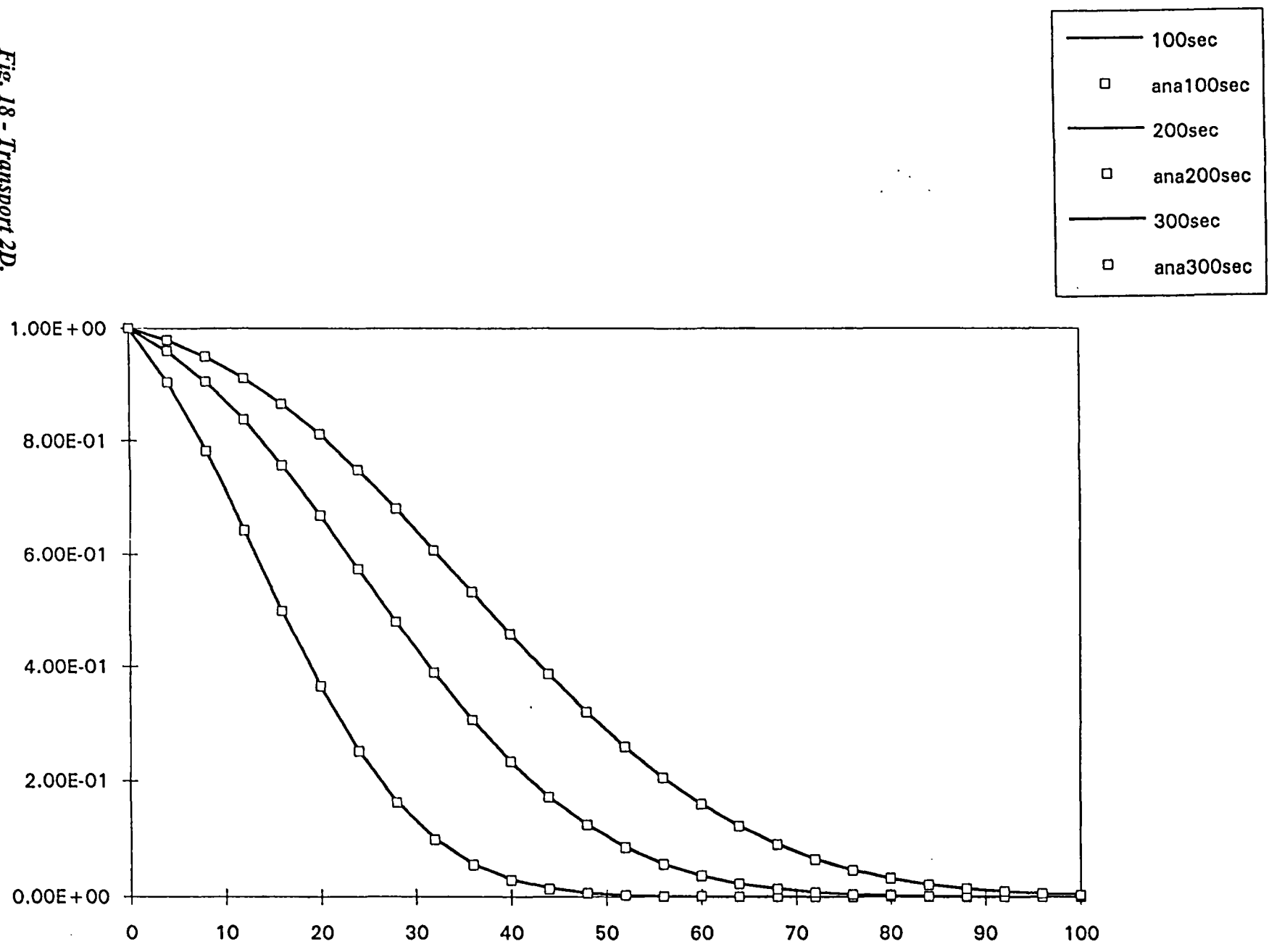


Fig. 18 - Transport 2D.

Méthode conforme : Éléments linéaires.

2.1.3. Exemples 3D : Diffusion dans la matrice depuis une fracture

Exemple numéro : 2.1.3						FIGURE : 19		
répertoire des fichiers de données : .DATA.DIFFFRAC fichiers de données								
nom :		type :		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
DIFFFRAC		linéaire			X	TMD		
nombre de noeuds :								
nombre d'éléments 1D : 1250								
2D : 250								
3D :								
Objectif : Comparaison avec une solution analytique								
remarques : éléments 2D dans la fracture, et 1D verticaux pour simuler la matrice (diffusion verticale, Kx = Ky =0).								

Cet exemple très classique permet de tester la diffusion dans la matrice, perpendiculairement à l'écoulement dans la fracture. La discrétisation est très fine (50 éléments 1D verticaux empilés sur chaque noeud des éléments 2D horizontaux de la fracture).

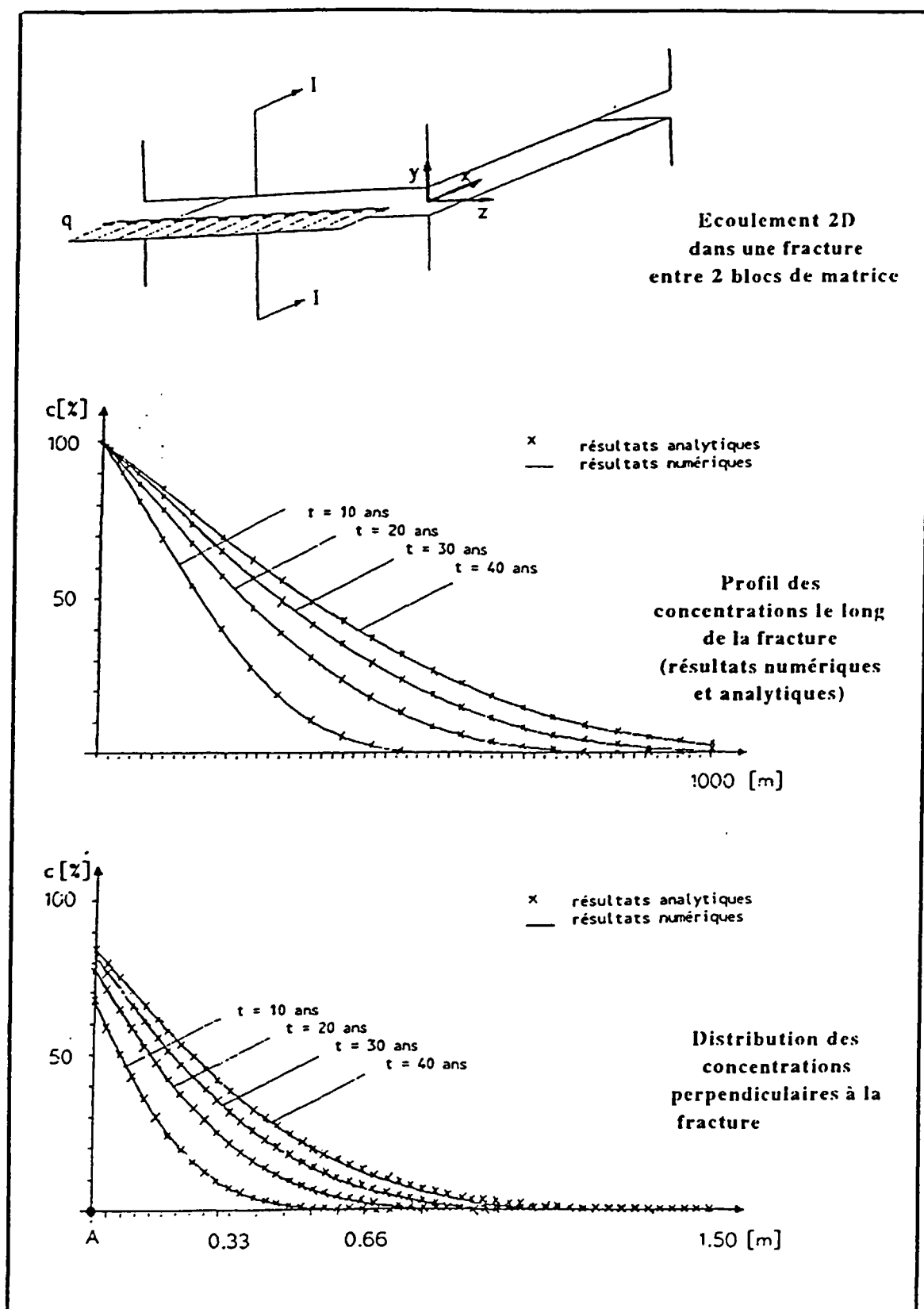


Fig. 19- Transport tridimensionnel avec diffusion dans la matrice depuis une fracture.

Méthode conforme : Éléments linéaires.

2.1.4. Simulation 3D : (benchmark SAUTY-KINZELBACH) : transport de masse

Exemple numéro : 2.1.4						FIGURE : 20
répertoire des fichiers de données : .DATA.SAUTKINZ fichiers de données						
		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom : SAUTKINZ	type : linéaire	X		TMD		
nombre de noeuds : 3751						
nombre d'éléments 1D :						
2D : 100						
3D : 3000						
Objectif : benchmark						
remarques : transport en transitoire cf. paragraphe 8.1.7.2.						

Le benchmark "SAUTY-KINZELBACH" déjà présenté au § 1.7.2. (trajectoire 3D de la figure 14) est aussi un test pour le calcul du transport en milieu poreux et fracturé. La figure 20a montre le champ de vitesse dans le plan de la fracture, et une projection des isopotentielles sur le plan (X, Y) horizontal en $Z = -100$ m, pour les 30 couches d'éléments, individualisées suivant Z.

La figure 20b montre le champ de concentration (3 courbes iso-concentrations) dans un plan vertical ($Y = 80$ m) pour trois pas de temps successifs $T1 < T2 < T3$.

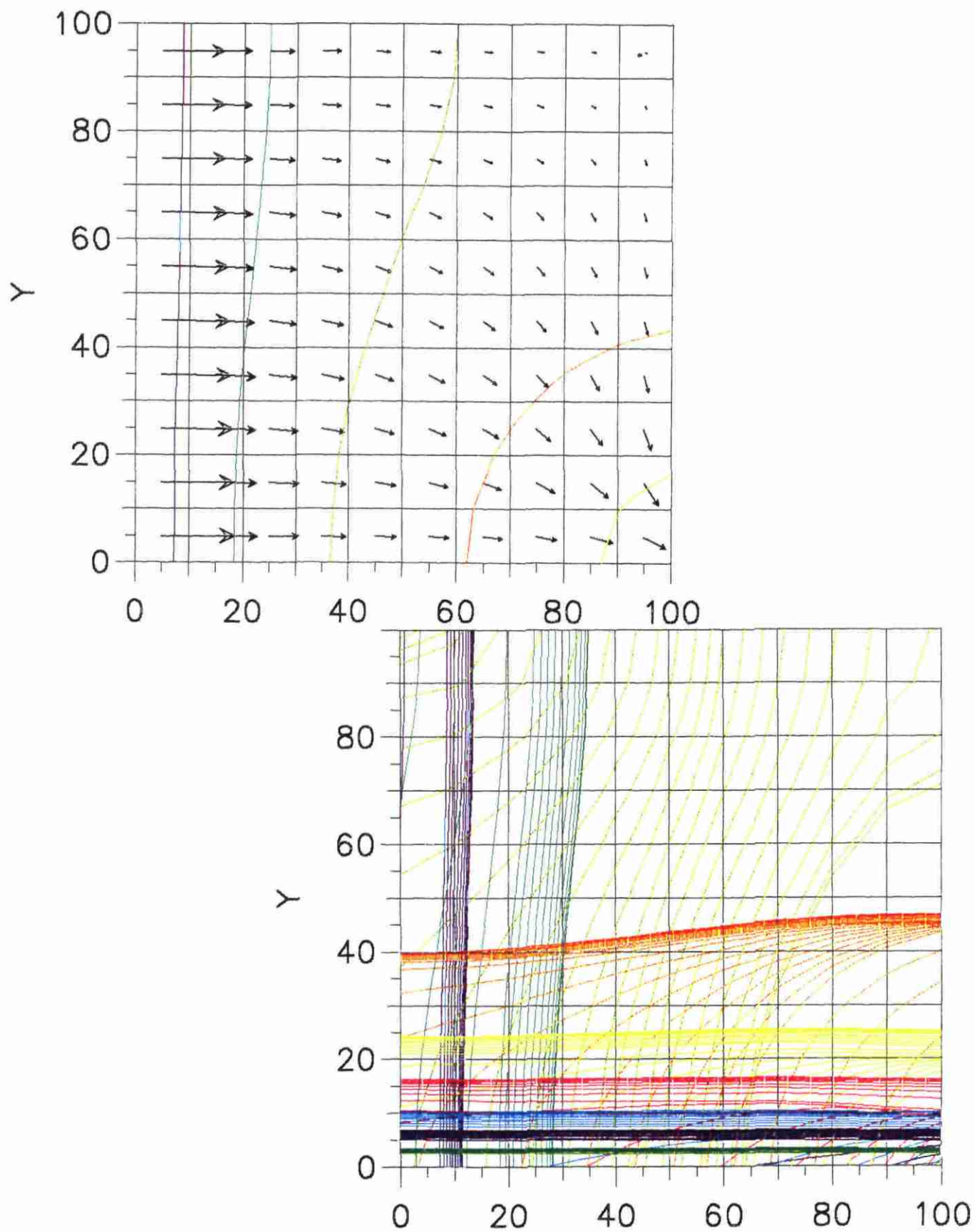


Fig. 20a - Transport tridimensionnel avec une fracture.

Méthode conforme : Éléments linéaires.

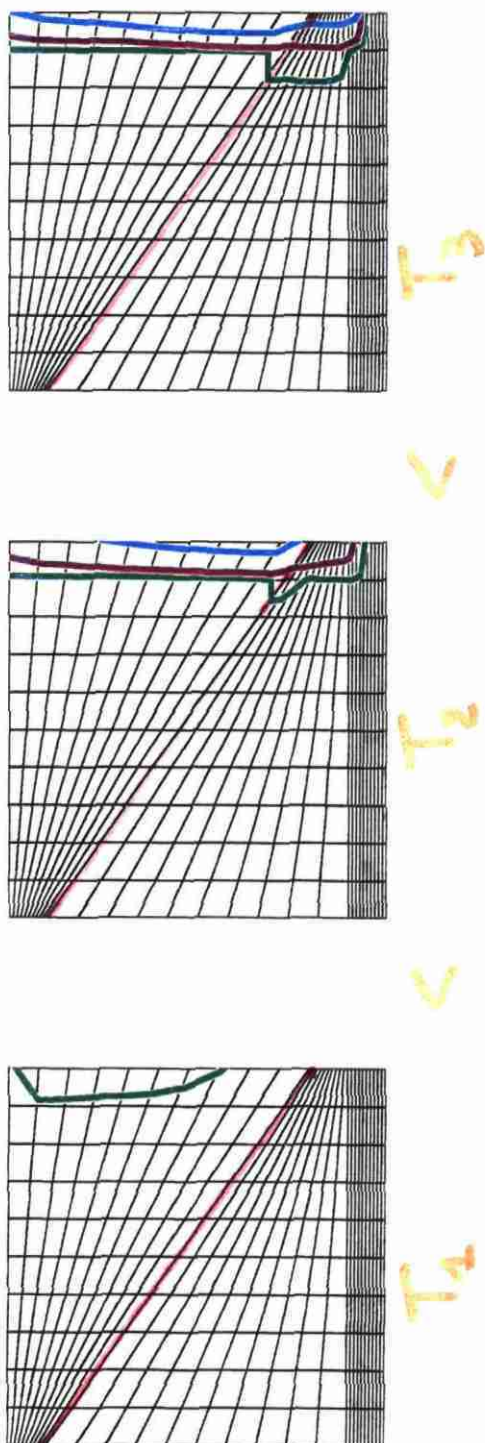


Fig. 20b - Champs des concentrations en fonction du temps dans le plan $Y = 80$ m.

NB : la ligne rouge représente la fracture.

2.2. TRANSPORT DE PLUSIEURS SOLUTES : EXEMPLE DE TRAÇAGE MULTIPLE

Pour réaliser le transport de plusieurs solutés, il faut :

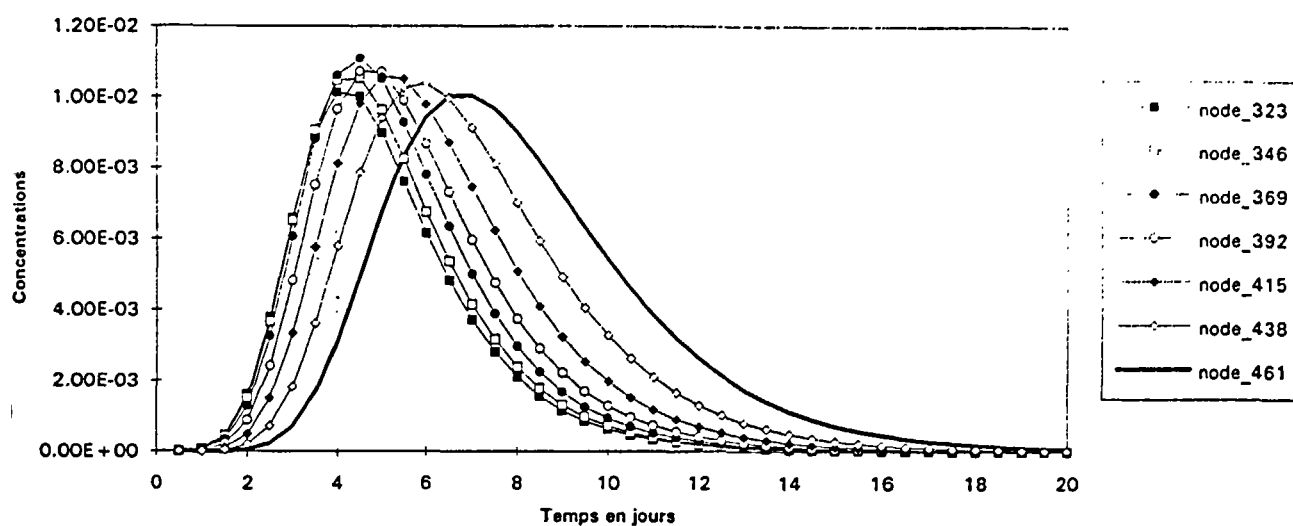
1. Générer les fichiers de data .TMD (pour le premier composant) et .TM2 .TM3 etc... (respectivement pour les composants 2 3 etc.) identiques au fichier .TMD présenté au paragraphe 1.3.1. précédent.
2. Définir le nombre de composants à prendre en compte dans le fichier projet (clique PROJET puis MODIFICATION d'un projet).

Exemple : Fichiers TEMAIMLN.SMD

Exemple numéro : 2.2						FIGURE : 21	
répertoire des fichiers de données : .DATA.POMPAMLN.MULT_CO fichiers de données							
nom : TEMAIMLN		type : linéaire	.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
		X		TMD TM1 TM2 etc.			
nombre de noeuds : 663							
nombre d'éléments 1D :							
2D : 618							
3D :							
Objectif :							
remarques :							

NB : cet exemple permet de plus d'illustrer les possibilités de TAFFETAS en terme d'injection de masse, imposée par une concentration initiale fixée ; donc pour des volumes d'injection variables, d'imposer des masses d'injection elles aussi variables, et recalculées automatiquement.

Concentrations pour 7 noeuds d'injections à concentration initiale = 1. (pour des volumes variables)



Concentrations pour 7 noeuds d'injections à concentration initiale = 1. (pour des volumes variables)

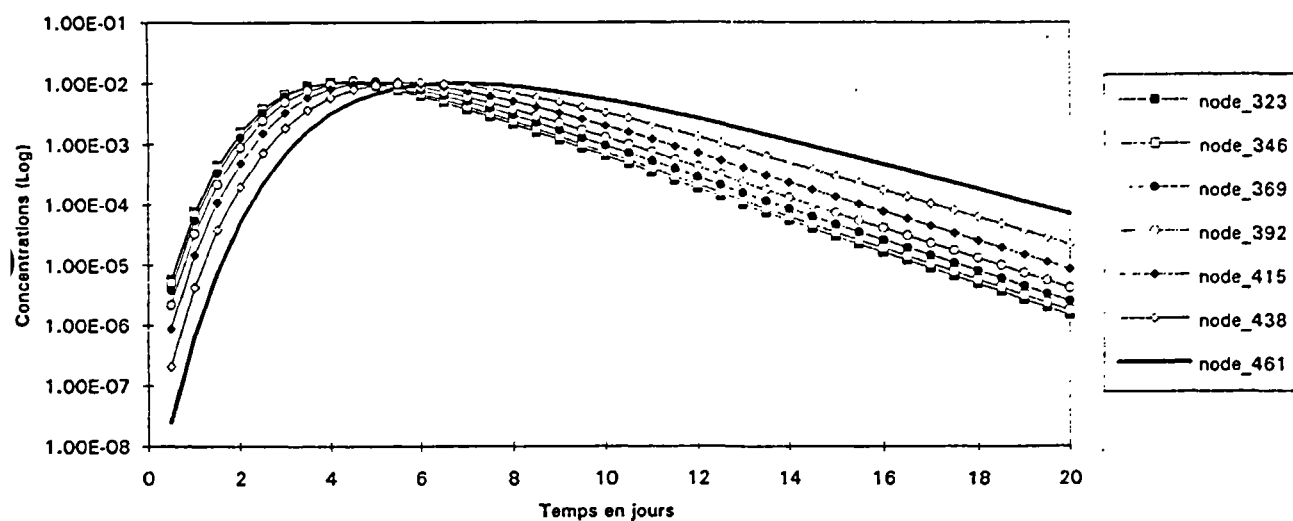


Fig. 21 - Test d'un traçage multicomposant : (7 composants simultanément).
(a : arithmétique / b : logarithmique).

2.3. TRANSPORT DE CHALEUR (DOUBLETS GEOTHERMIQUES)

Pour réaliser un transport de chaleur, il faut :

1. Générer le fichier de data .TMT (T pour thermique ou température) identique au fichier .TMD présenté au paragraphe 1.3.1. précédent, aux équivalences près des paramètres élémentaires (diffusivité thermique, etc.) et en considérant comme variable la température et non plus une concentration.
2. Imposer un calcul thermique (flag) à prendre en compte dans le fichier projet (clique PROJET puis MODIFICATION d'un projet)

Exemple : Doublet géothermique : Exemple de Champigny 2D (GCTMS).

Exemple numéro : 2.3.a						FIGURE : 22/23
répertoire des fichiers de données : ...DOUBLETS.CHATEN95.SMAL_2D						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom :	type :					READ.ME
MIXGCTMS	mixte		X			
LINGCTMS	linéaire		X			
QUAGCTMS	quadrat.		X			
nombre de noeuds : 774						
nombre d'éléments 1D :						
2D : 708						
3D :						
Objectif :						
remarques :						

Cet exemple est disponible en conforme linéaire (LINGCTMS), en conforme quadratique (QUAGCTMS) et en mixte hybride (MIXGCTMS). Il présente la particularité, par rapport aux problèmes d'hydrogéologie classique, d'impliquer des vitesses très élevées, dont le calcul peut parfois être délicat. La figure 22a montre les trajectoires (lignes de couleur) au départ du puits injecteur du doublet, ainsi que les vecteurs vitesses aux centres des éléments (flèches rouges).

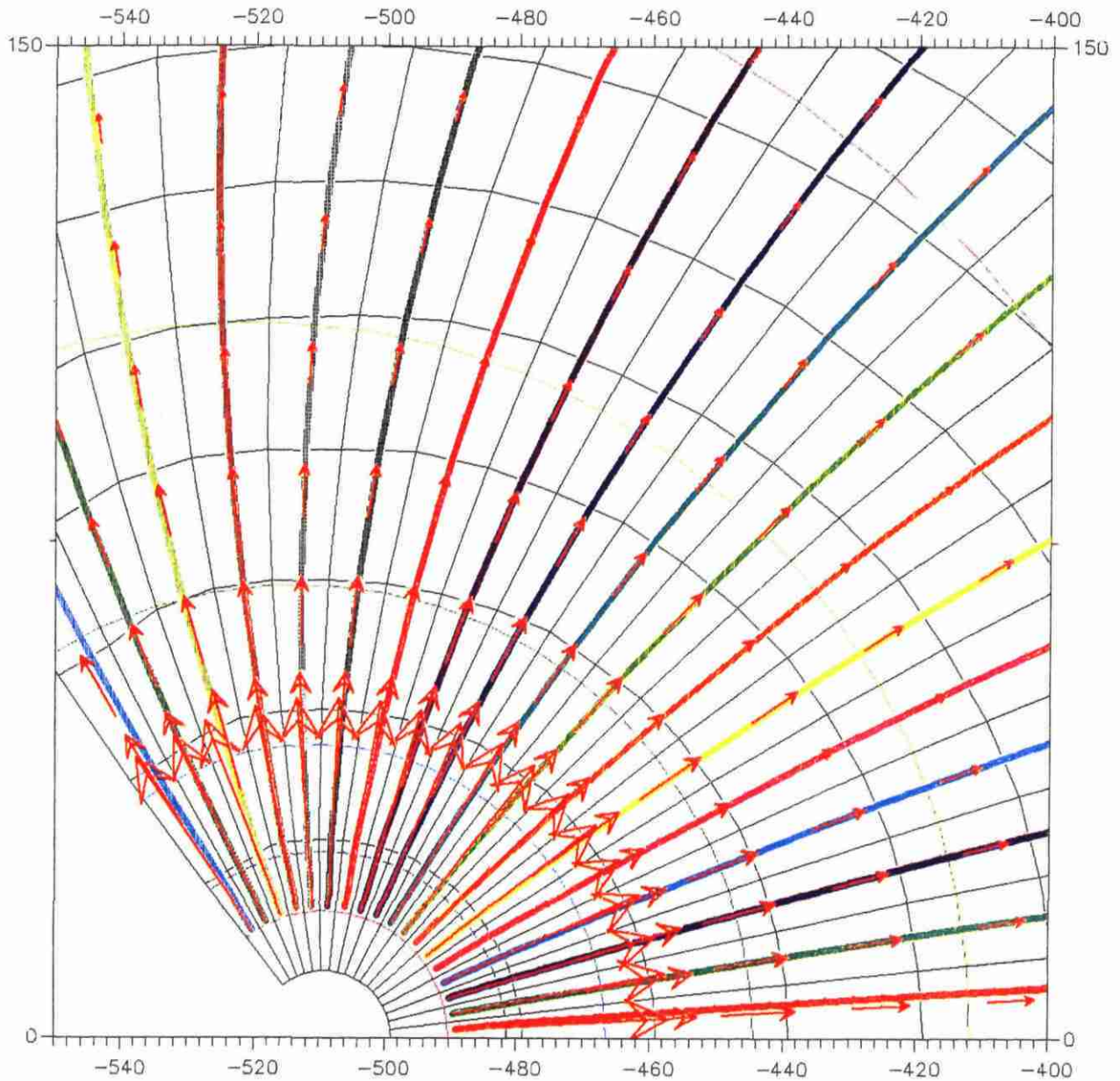


Fig. 22a - Doublet géothermique : Exemple 2D (maillage autour de l'injecteur, trajectoires et vecteurs vitesses).

Exemple numéro : 2.3.b						FIGURE : 22/23
répertoire des fichiers de données : .DATA.DOUBLETS.CHATEN95.						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom :	type :					
.MONO_COULINGCTMS	linéaire	X		.TMD		
.MOTI_A_5\MOTI_A_5	linéaire	X		.TMD		
.MOTI_B_5\MOTI_B_5	linéaire	X		.TMD		
nombre de noeuds : 3870						
nombre d'éléments 1D :						
2D : 708						
3D : 2832						
Objectif : comparaison avec MITHRA (Modèle d'Investigation Thermique et Hydraulique des Réservoirs Aquifères) développé par A. MENJOZ						
remarques :						
.MONO_QUALINGCTMS : modèle quadratique monocouche						
.MOTB5QUA\MOTI_B_5 : modèle quadratique motif B						

La structure stratifiée du réservoir géothermique (Dogger du bassin parisien) est traitée dans cet exemple par superposition d'épentes (formations peu perméables) et de strates productrices (niveaux de perméabilités fortes). Les épentes d'extensions verticales importantes (semi-infinies à quelques mètres) sont représentées par des éléments tridimensionnels. Les niveaux producteurs, de faibles épaisseurs sont eux représentés par des éléments plan 2D.

Le maillage représenté sur la figure suivante (Fig. 22b) est vu de dessus, en plan (X, Y). Il est limité vers le bas par le plan vertical de symétrie du doublet, qui passe par l'axe des deux puits. La limite externe est une trajectoire théorique de durée suffisante pour exclure le reste du domaine (environ 170 ans). Cette figure présente un exemple de champ de température dans le doublet après 10 et 20 ans.

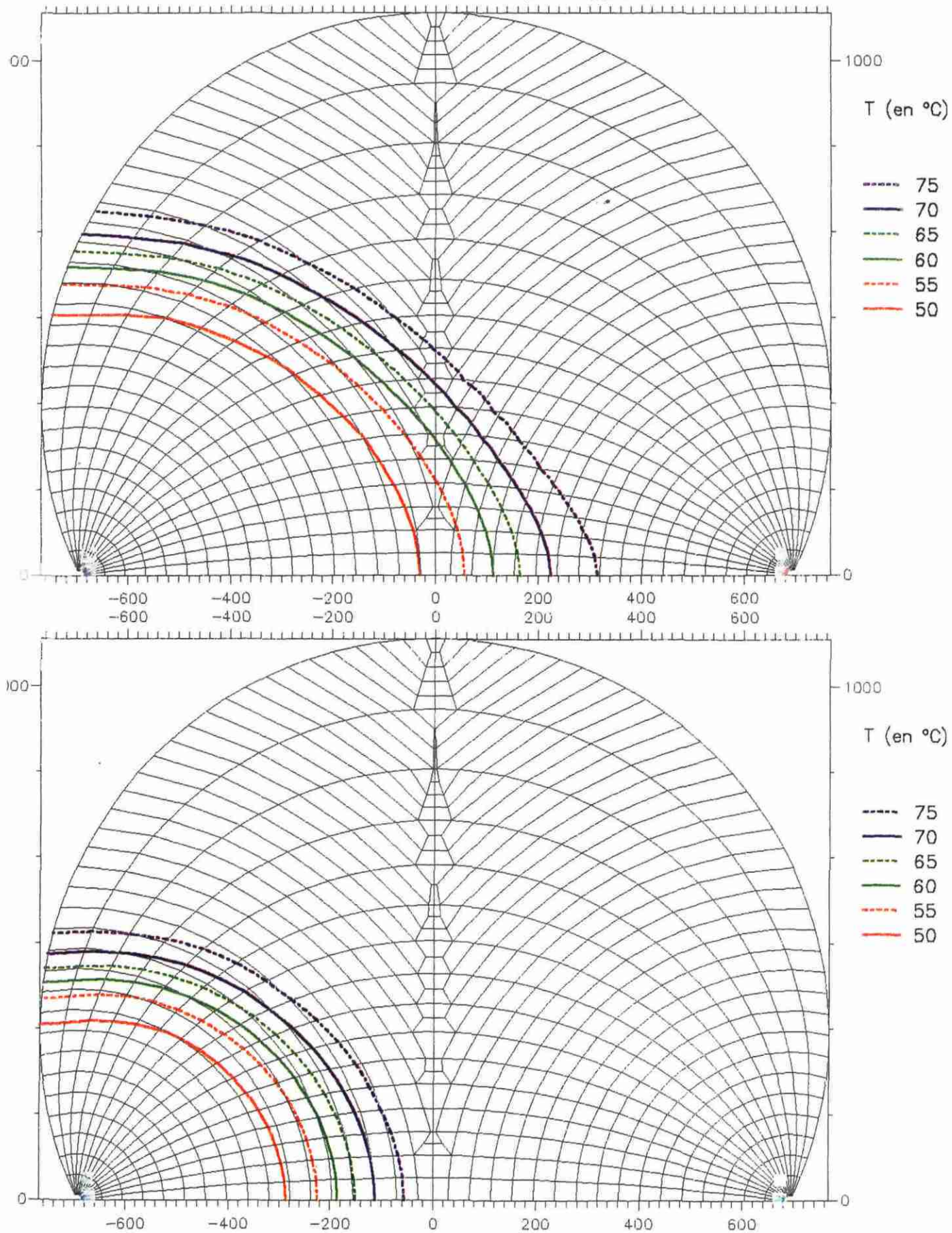
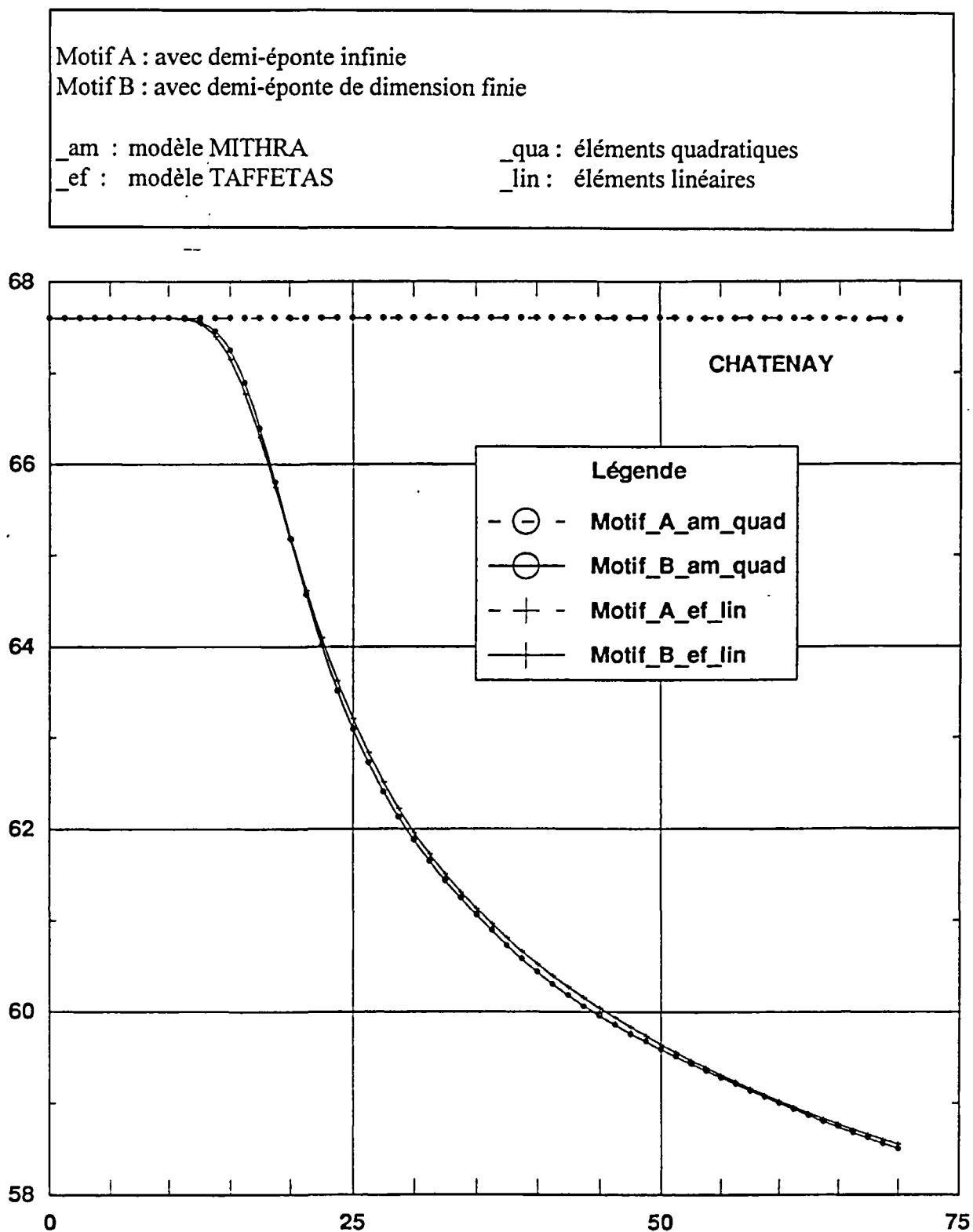


Fig. 22b - Doublet géothermique : champ de température dans le doublet après 10 et 20 ans.

Fig. 23 - Comparaison intercode des courbes calculées pour la production du doublet géothermique de Chatenay Malabry (modèle 3D avec aquifère 2D).



2.4. DIFFERENTES METHODES DE TRANSPORT

Les différentes méthodes disponibles sont :

- la méthode des éléments finis (Taylor Galerkin) ;
- la méthode des particules (RW_PT : Random Walk : Particles Tracking) ;
- la méthode des caractéristiques (MOC).

Le test proposé pour comparer les 3 méthodes précédentes est l'injection instantanée dans un carré d'une concentration unitaire dans un écoulement régional ouest-est régulier (vitesse constante).

Le modèle utilisé est bidimensionnel (2D). l'aquifère est homogène isotrope.

Exemple numéro : 2.4						FIGURE : 24/25/26
répertoire des fichiers de données : .DATA.INJINS2D						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom : INJINS2D	type : linéaire		X	.TMD		
nombre de noeuds : 286						
nombre d'éléments 1D :						
2D : 250						
3D :						
Objectif : comparaison des méthodes de résolution du transport.						
remarques : INStantannée INJection 2D						

La solution analytique à ce problème (J.J. SEGUIN - 1990) est utilisée comme référence sur les figures 24, 25 et 26 :

$$C(x,y,t) = \frac{M}{4\omega V} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{x+a-ut}{2\sqrt{\alpha_L ut}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x-a-ut}{2\sqrt{\alpha_L ut}}\right) \right] \left[\operatorname{erf}\left(\frac{y+b}{2\sqrt{\alpha_T ut}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y-b}{2\sqrt{\alpha_T ut}}\right) \right]$$

avec $V = 2a \times 2b$, a et b les dimensions du rectangle d'injection, M la masse injectée, ω la porosité, u la vitesse d'écoulement, α_L et α_T les dispersivités longitudinale et transversale.

2.4.1. Méthode des éléments finis conformes (EFC)

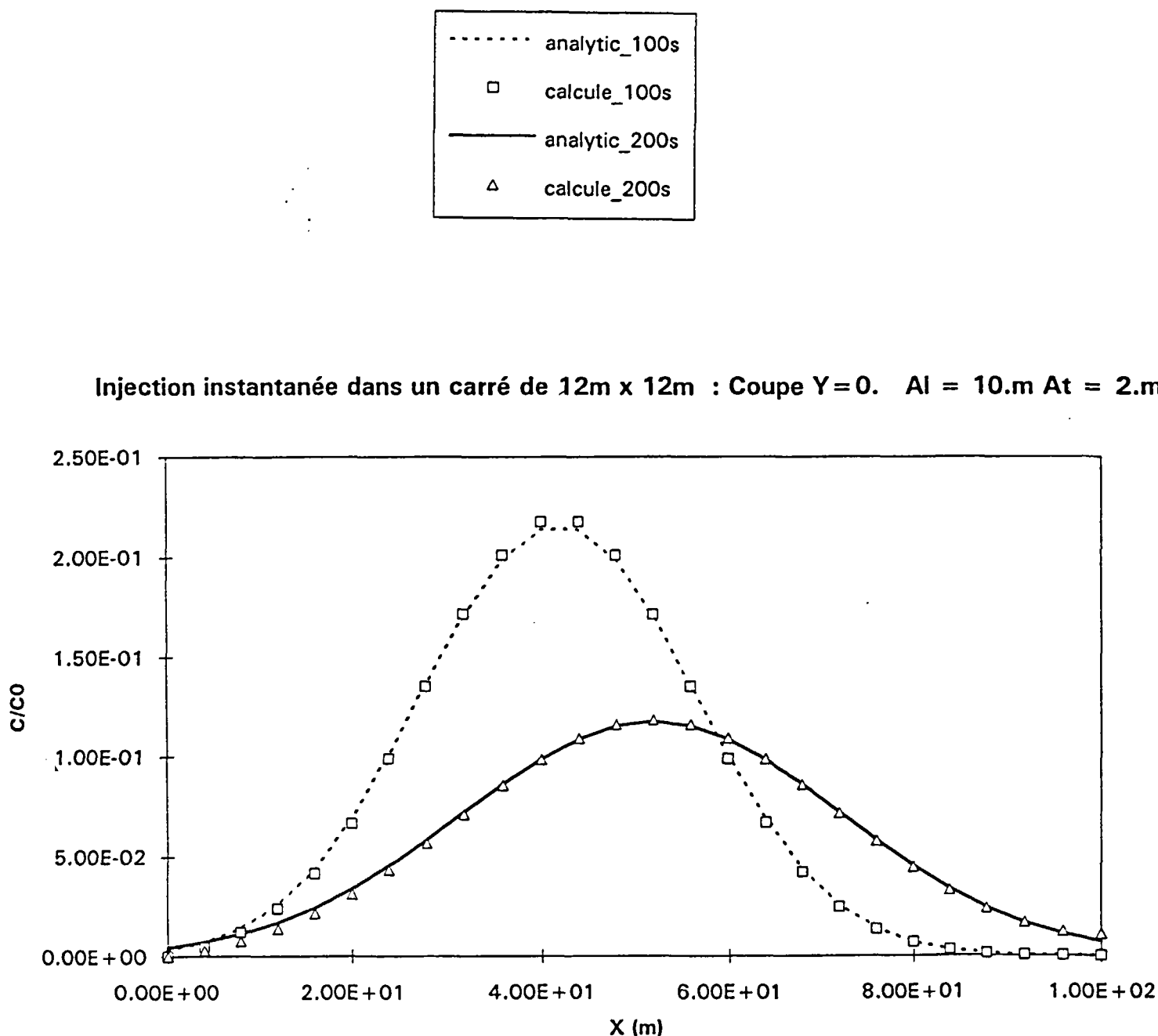


Fig. 24 - Comparaison entre solution analytique exacte et solution numérique de TAFFETAS : méthode des éléments finis conformes linéaires avec le schéma d'intégration temporelle de Leismann et Frind.

2.4.2. Méthode des particules (Random Walk : RW).

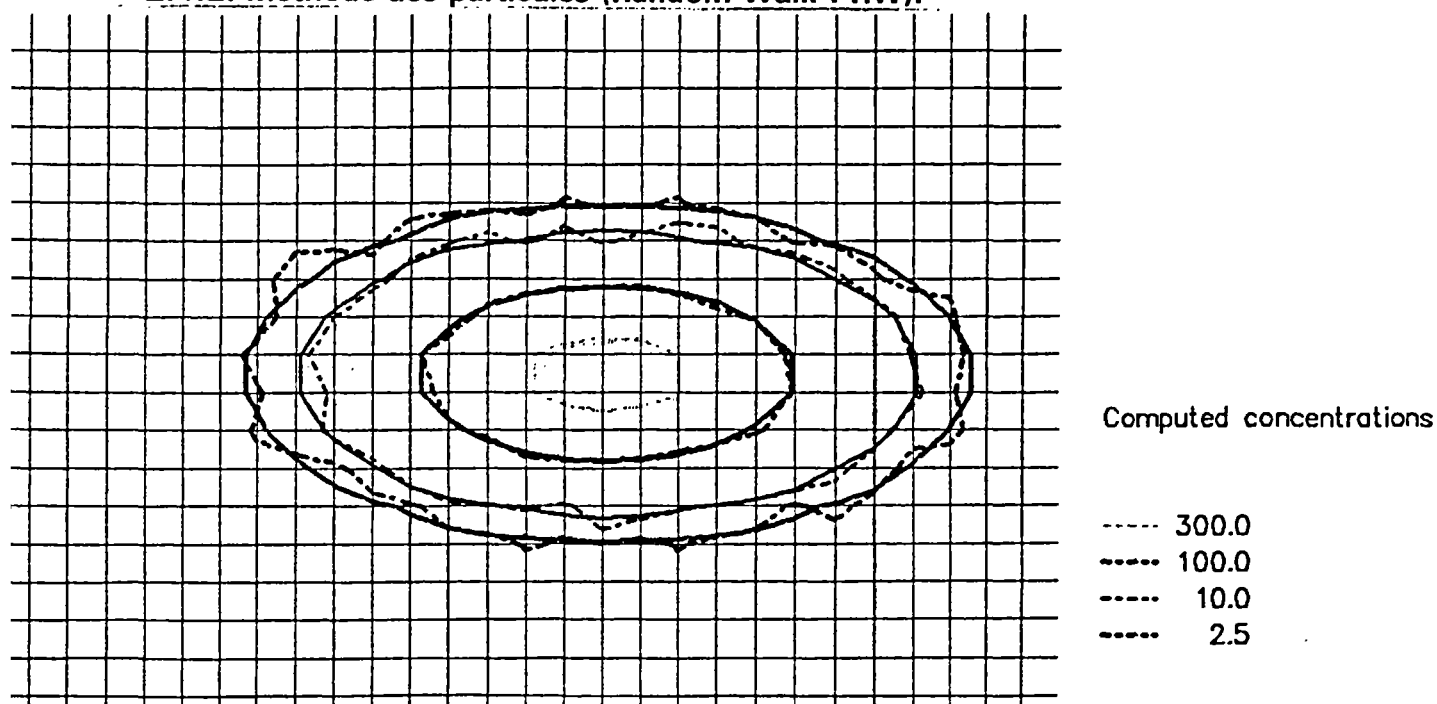


Fig. 25 - Comparaison entre solution analytique exacte et solution numérique de TAFFETAS : méthode des particules (Random Walk).

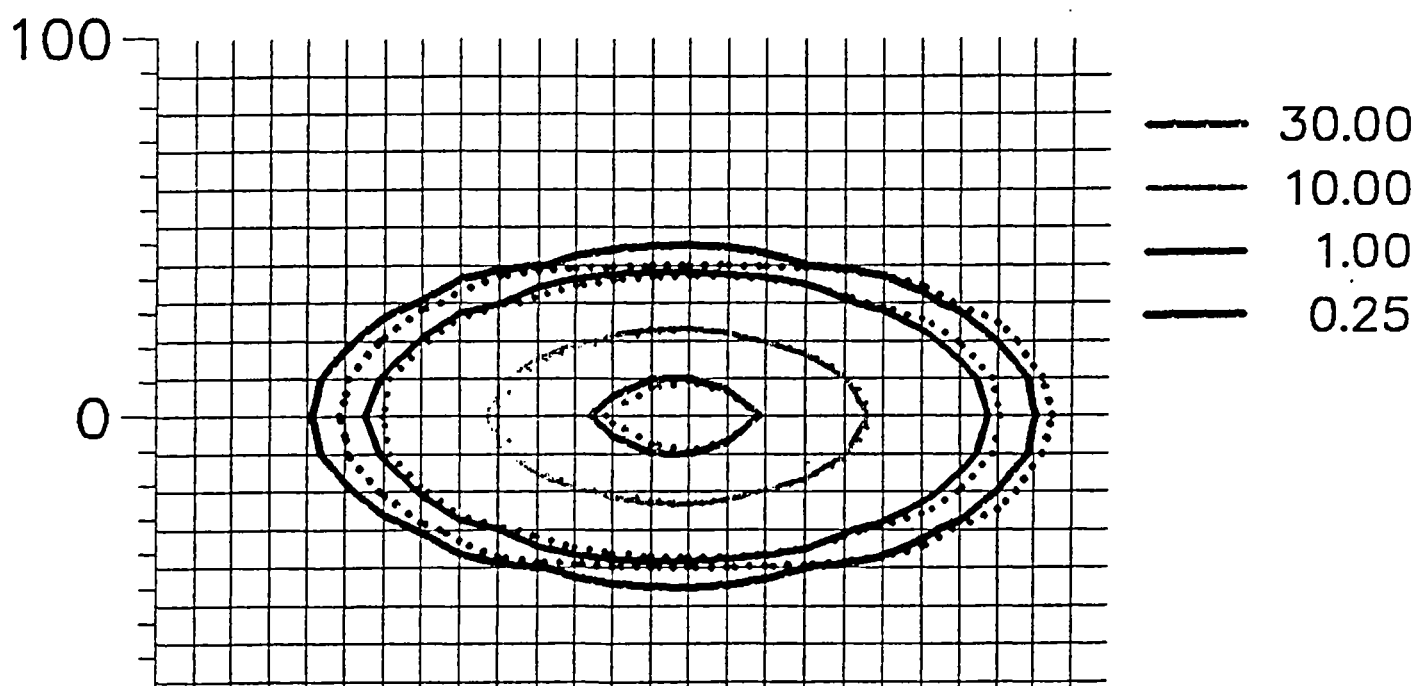


Fig. 26 - Comparaison entre solution analytique exacte et solution numérique de TAFFETAS : méthode des caractéristiques (MOC).

3. Couplages : écoulements et transferts (de masse et de chaleur)

3.1.VISCOSITE

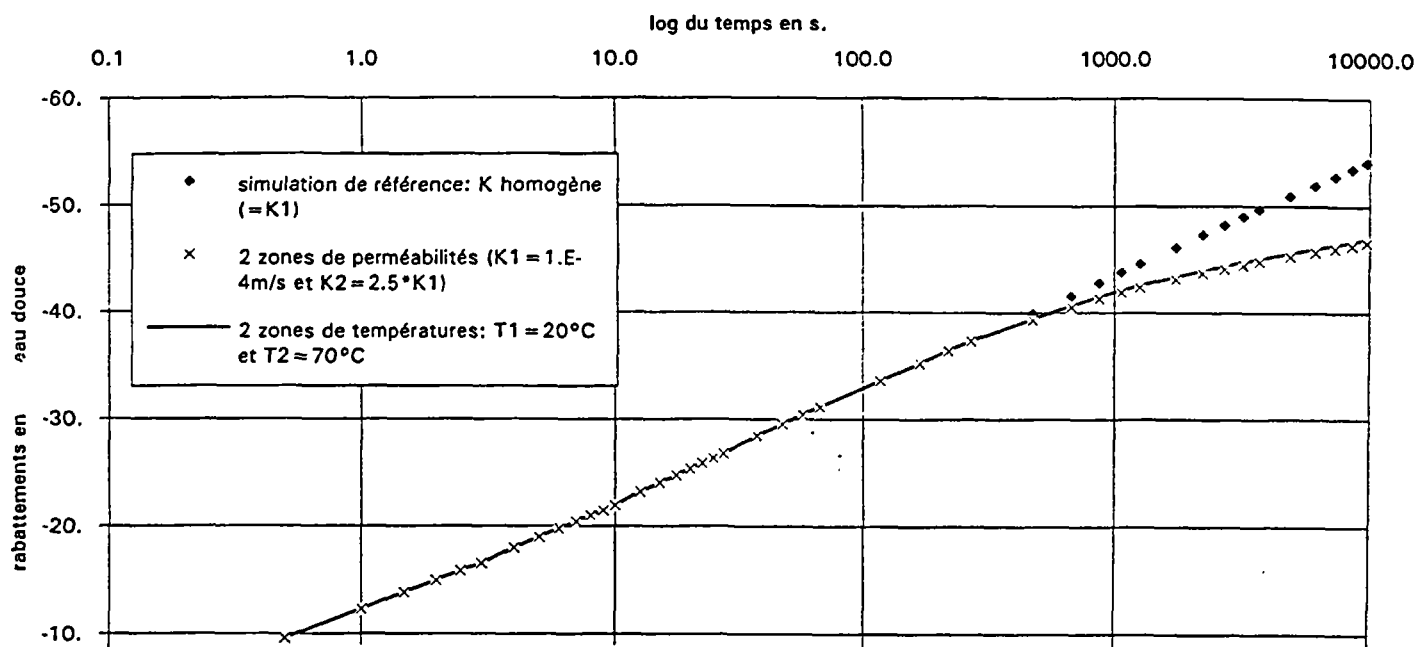
Le transport de chaque composant peut induire une variation de viscosité du fluide, donc de l'écoulement de celui-ci. Il en est de même pour le transport de chaleur. En conséquence les deux phénomènes majeurs (écoulement et transport) sont couplés.

Plusieurs exemples de validation du couplage visqueux sont disponibles dans COUPVISC (couplages visqueux) .VERIFANA (vérifications analytiques).

Exemple numéro : 3.1.						FIGURE : 27
répertoire des fichiers de données : .DATA.COUPVISC .VERIFANA						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom :	type :					
cas de front fixe :	linéaire		X	.TMT		
K1K2HETE		: 2 zones de perméabilités ($K_2 = 2.5 K_1$)				
COUPVISC		: 2 zones de températures (20°C et 70°C)				
cas de front mobile :						
REFERE20		: injection 20° - initial 20°				
REFERE70		: injection 70° - initial 70°				
REFERE21		: injection 20° - initial 70°				
REFERE71		: injection 70° - initial 20°				
nombre de noeuds : 164						
nombre d'éléments 1D :						
2D : 40						
3D :						
Objectif : validation du couplage visqueux						
remarques : secteur d'un pompage (symétrie axiale)						

La comparaison des variations de pression (fig. 27) montre la bonne cohérence des résultats du couplage avec TAFETAS, avec les solutions analytiques (triangles, carrés et cercles noirs).

Comparaison des variations de pressions: pompage avec viscosité hétérogène



Comparaison des variations de pressions: injection avec viscosité variable (front mobile) K = 1.E-4m/s (pour T référence = 70°C) et Q = 28.8 l/s

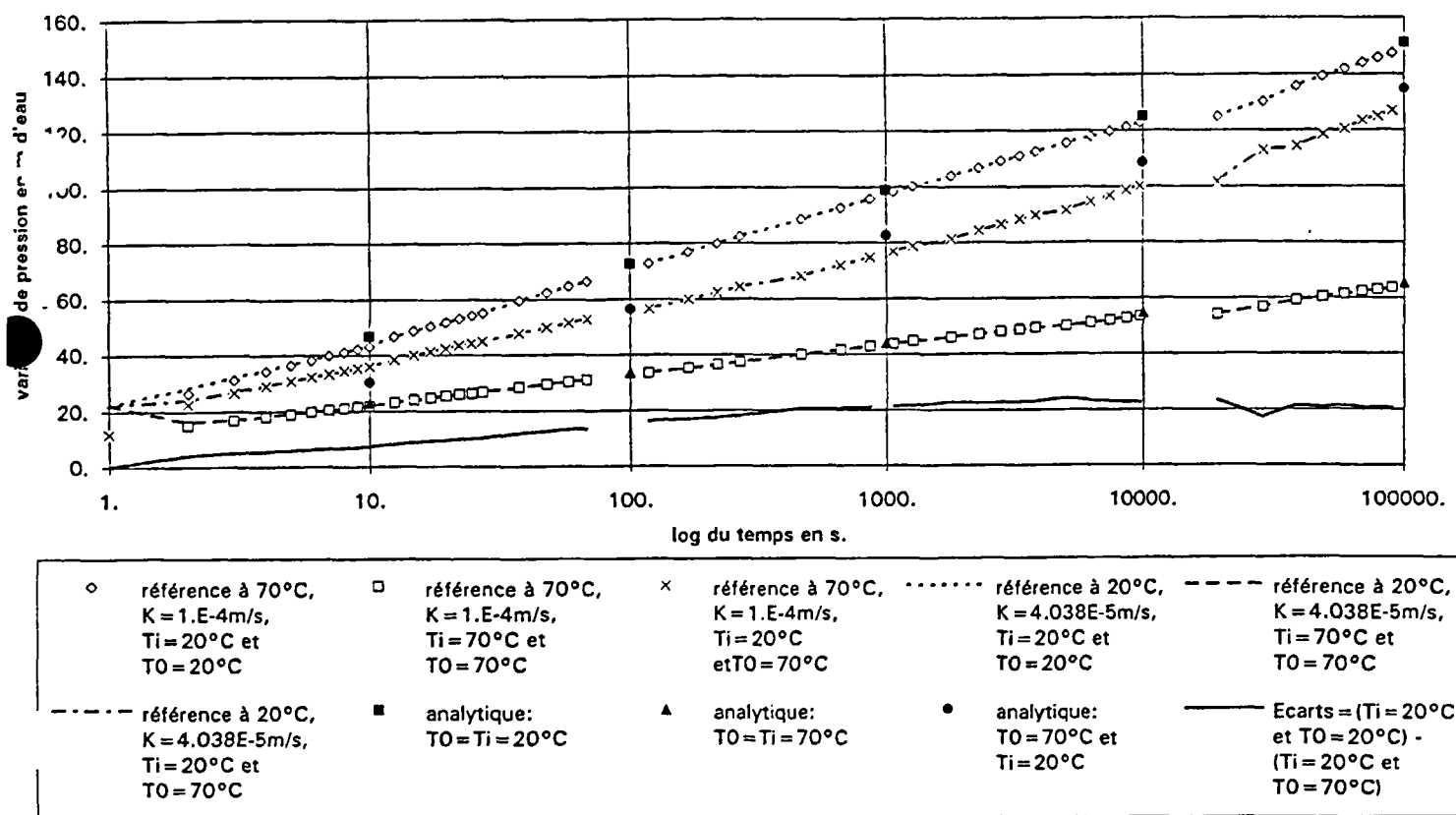


Fig. 27 - Comparaison des variations de pressions.

3.2. DENSITE

De même, les composants transportés (par exemple NaCl) peuvent induire une modification de la densité du fluide (par exemple via la salinité). Ce deuxième mode de couplage, plus complexe que le précédent, permet d'étudier en 2D coupe verticale (ou en 2D incliné) et en 3D, les problèmes de fluides à densités variables comme les intrusions d'eaux saumâtres dans les aquifères côtiers.

Exemple numéro : 3.2.						FIGURE : 28
répertoire des fichiers de données : .DATA. VIENNĚ						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom : VIENNE2D	type :		X	.TMD		
nombre de noeuds : 1702		état permanent final				
nombre d'éléments 1D :						
2D : 1620						
3D :						
Objectif : couplage densitaire en milieu fortement hétérogène (fracturé).						
remarques : convergence itérative						

Verticalement, les fractures sont espacées de 200 m, alors que deux fractures horizontales les recoupent à -200 m et -600 m (le niveau 0 est à l'interface entre l'aquifère sédimentaire supérieur et le granite fracturé sous-jacent).

K aquifère =	10^{-5} m/s	porosité : 1 %
K matrice-granite =	10^{-14} m/s	porosité : 10^{-5}
T fractures =	10^{-5} m ² /s	porosité : 10^{-5}

- Salinité initiale dans tout le domaine : 10 mg/l.
- Lessivage par de l'eau sans NaCl (C = 0 mg/l).

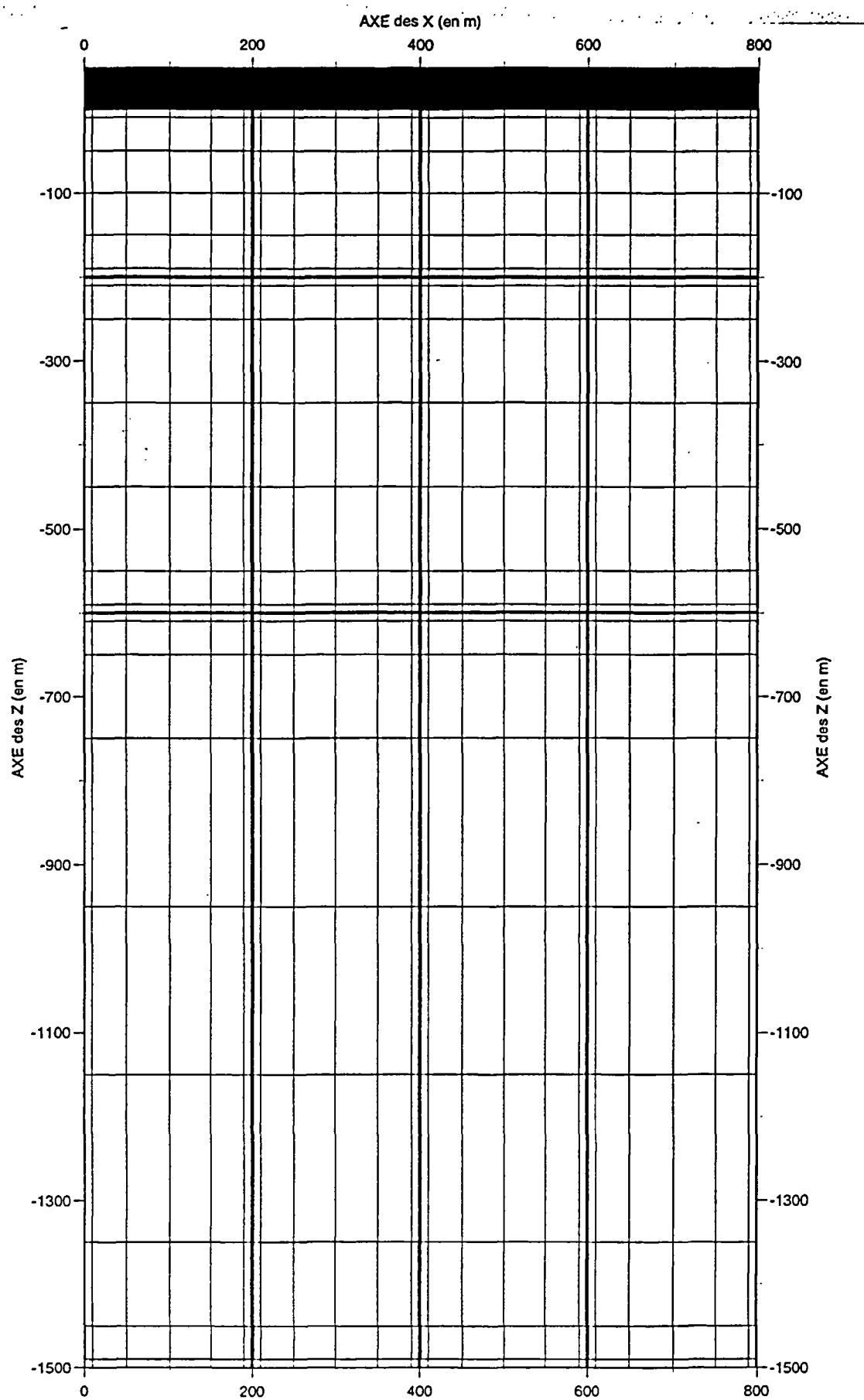


Fig. 28 - Couplage densitaire : Doublet dans un aquifère incliné ($\alpha = 10^\circ$).

4. Maillages auto-adaptatifs

Cette option n'est présentée ici qu'en 2D. Son développement en 3D a été implémenté récemment et il permet aussi l'adaptation de maillage 3D contenant des fractures 2D.

4.1. ECOULEMENTS

Le critère d'adaptation du maillage est le gradient de charge ou de pression.

Exemple numéro : 4.1.						FIGURE : 29
répertoire des fichiers de données : .DATA.ADAPFLOW						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom :	type :					
ADAPFLOW	linéaire		X			
ADHEFLOW	mixte		X			
nombre de noeuds : 25 (initial)						
nombre d'éléments 1D :						
2D : 16 (initial)						
3D :						
Objectif : adaptation automatique du maillage sur 15 pas d'itérations						
remarques : Le maillage initial est très grossier (grille de 4 * 4 éléments carrés)						

Le maillage initial est constitué de 16 éléments carrés de 25 m de côté. Un pompage est réalisé à l'angle inférieur gauche du domaine carré de 100 m x 100 m.

Après seulement 5 itérations, l'arête du premier élément au contact du puits a une dimension d'environ 10 cm $\left(\equiv \frac{25}{3^5} \right)$.

La fonction source qui décrit un pompage (ou une injection) dans un aquifère horizontal captif (fonction de Theis) donne des gradients fonction du logarithme de la distance au puits qui, bien que mal représentés par des éléments linéaires, sont parfaitement suivis grâce à l'adaptation proposé pour le maillage.

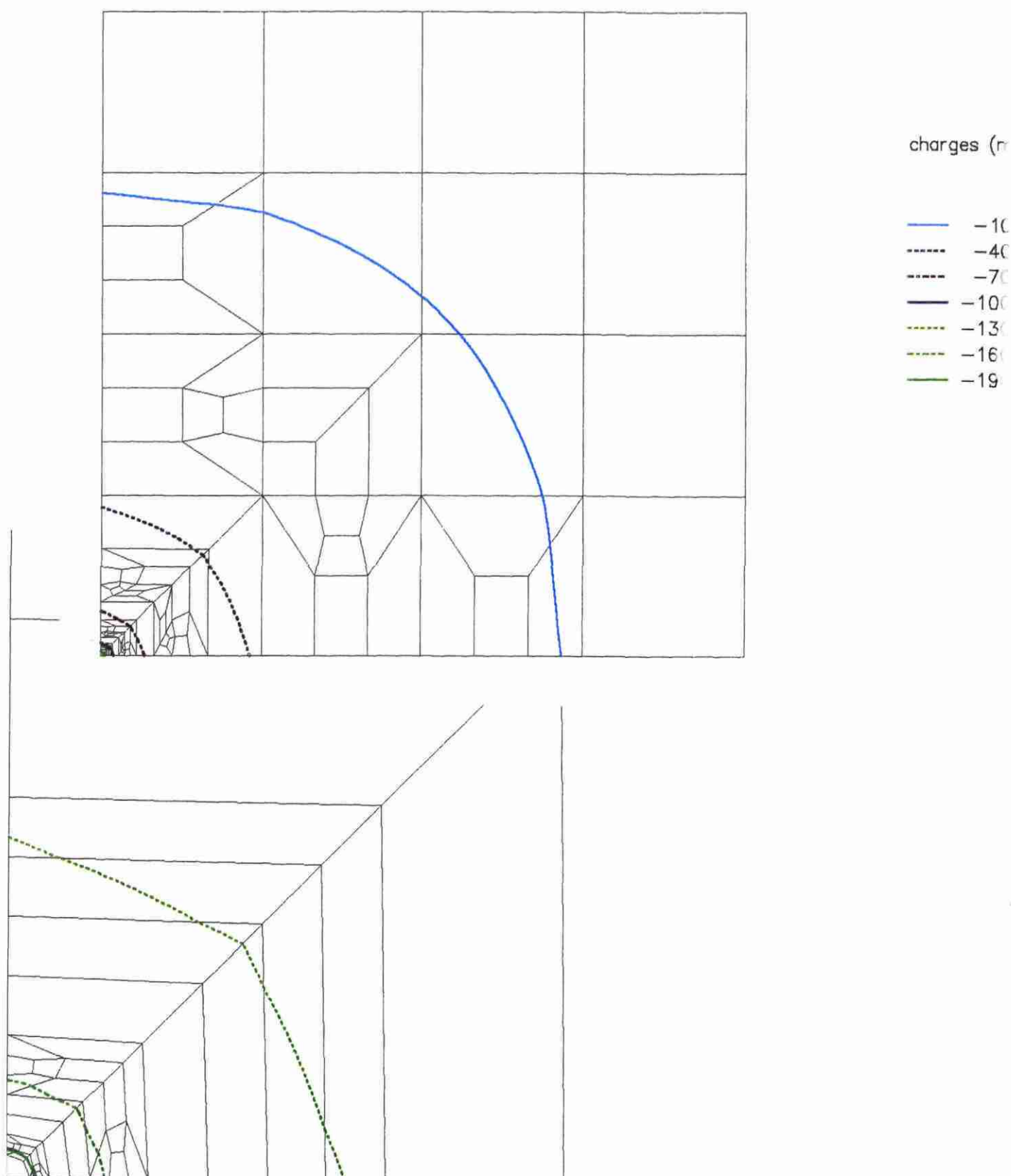


Fig. 29 - Pompage en milieu homogène : fichier ADAPFLOW.DAT.

Le maillage final est constitué de 181 noeuds et 143 éléments.

4.2. TRANSFERTS DE MASSE OU DE CHALEUR

Le critère d'adaptation du maillage est le gradient de concentration pour chaque élément chimique transporté, et le gradient de température pour le transport de chaleur.

Exemple numéro : 4.2.						FIGURE : 30
répertoire des fichiers de données : .DATA.CLEARY_S.ADAP_CLE						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom : GROSANGL	type : linéaire		X	.TMD		
nombre de noeuds :142 (initial)						
nombre d'éléments 1D :						
2D :						
117(initial)						
3D :						
Objectif :						
remarques :						

La solution analytique de Cleary est donnée pour une vitesse d'écoulement parallèle à l'axe X dans l'exemple 2.1.2 (fig. 18). Lorsque cette vitesse est inclinée par rapport à l'axe X (composante non nulle suivant Y), un maillage régulier en X et en Y est tout à fait inadapté. La figure suivante (fig. 30) présente cette solution analytique en pointillé rouge comme référence pour une simulation auto-adaptative du transport, sur une grille 9 x 13 initiale régulière (identique à celle utilisée pour le § 2.1.2).

Aux trois pas de temps présentés, 100 s, 200 s et 300 s, le résultat de la simulation auto-adaptative avec TAFFETAS est très proche de celui donné par Cleary. La petite différence observable à 300 s au bas de la figure, est imputable à la proximité de la condition limite (bordure du maillage).

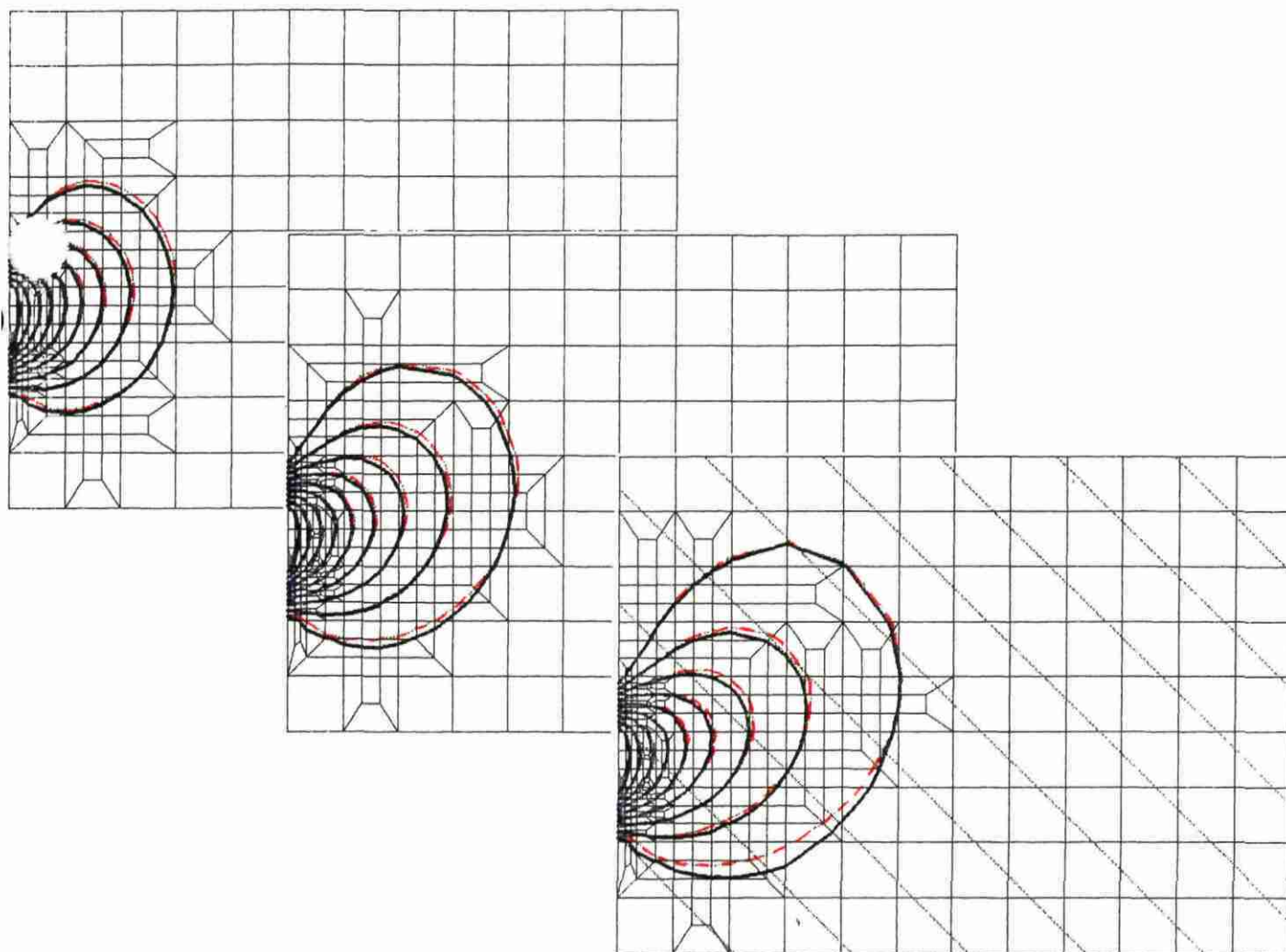


Fig. 30 - Iso-concentrations après 100, 200 et 300 s : comparaison avec une solution analytique (en pointillé).

4.3. ECOULEMENTS ET TRANSFERTS (DE MASSE OU DE CHALEUR)

Les critères d'adaptation du maillage sont d'une part le gradient de charge ou de pression, et d'autre part, le gradient de concentration pour chaque élément chimique transporté, et le gradient de température pour le transport de chaleur.

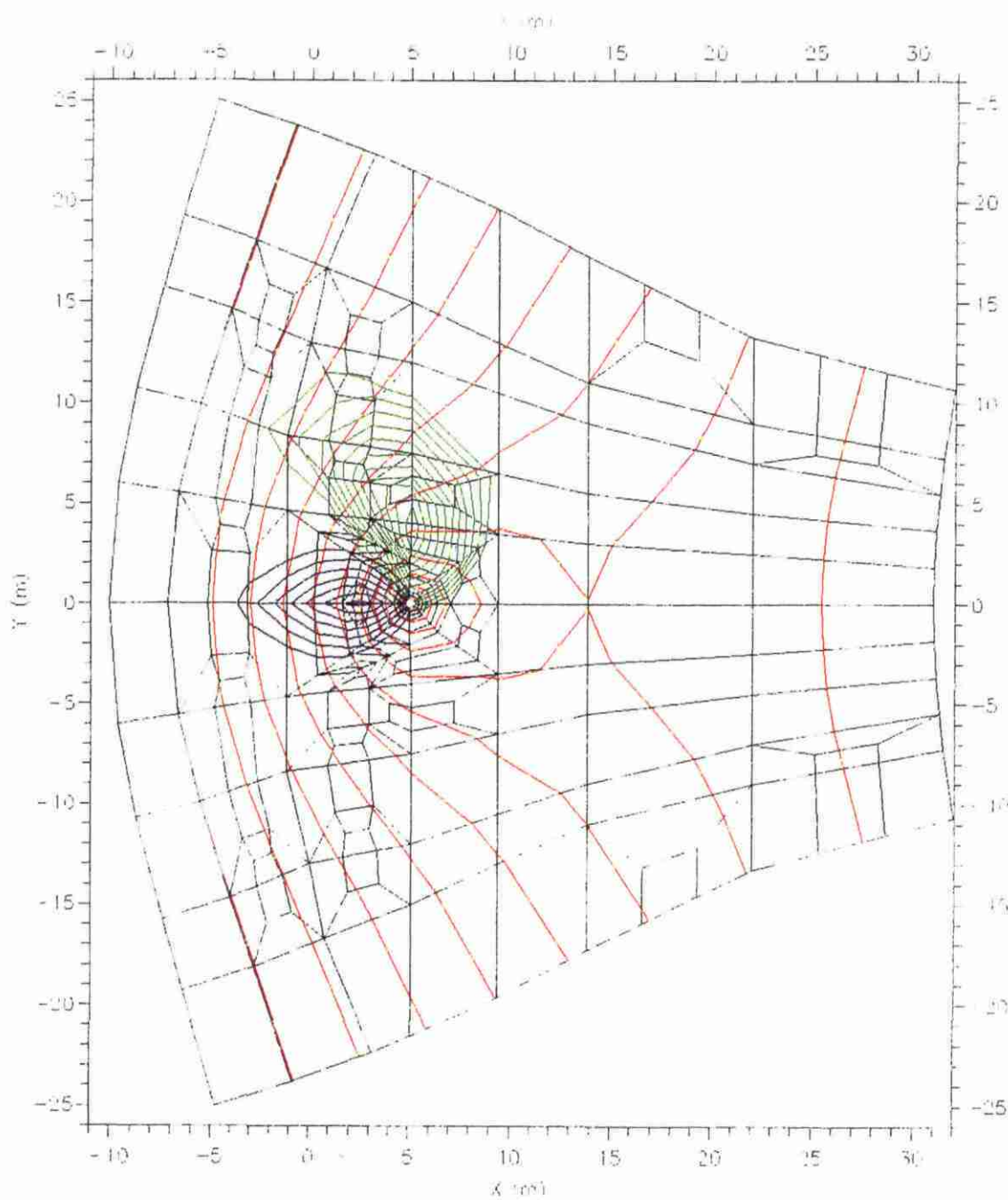
Exemple :

Exemple numéro : 4.3.						FIGURE : 31
répertoire des fichiers de données :						
.DATA. MAILMLN .AUTOMAIL						
fichiers de données		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
nom :	type :					
AUTOMAIL			X			
nombre de noeuds :						
nombre d'éléments 1D :						
2D : 70 initial						
3D :						
Objectif : auto-adaptativité simultanée en hydrodynamique et en transport.						
remarques : maillage initial grossier (10 x 7).						

Partant d'un maillage très grossier (10 x 7 éléments) on reprend le cas d'un pompage dans un écoulement régional (§ 1.6.3) avec injection de plusieurs solutés (§ 2.2. : traçage multiple).

Un premier pas de raffinement hydrodynamique du maillage est suivi par un pas de raffinement en transport (à proximité du puits). Le maillage est représenté figure 31 avec en rouge les isopièzes et en bleu et vert les isoconcentrations de deux solutés distincts.

Les courbes de restitution sont alors similaires à celle de la figure 21. Le calcul reste rapide tout en améliorant efficacement la précision du résultat.



UNICRID 6.3

2-10-1988 10-10-45

Fig. 31 - Adaptation simultanée du maillage avec un critère hydrodynamique (gradient de charge) et un critère de transport (gradient de concentration).

5.2. EXEMPLES

Les différentes possibilités de calage automatique sont illustrées par les deux exemples suivants :

Exemple numéro : 5.2.1.						FIGURE : 32
répertoire des fichiers de données : .DATA. ASPO1994 fichiers de données						
nom :		.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
AS26FRAC			X		X	
nombre de noeuds : 15033						
nombre d'éléments 1D :						
2D : fractures						
3D :matrice						
Objectif : calage automatique sur l'exemple du § 1.5.2						
remarques :						

	initial values	minimum values	maximum values	calibrated values
Infiltration rate (mm/year)	5.5	0.05	550	3.88
Matrix permeability (m/s)	10^{-8}	10^{-10}	10^{-6}	$7 \cdot 10^{-9}$
16 fractures transmissivities (m²/s)				
1	$2 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-3}$	$1.5 \cdot 10^{-5}$
2, 3 and 4	$5 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-8}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$1.7 \cdot 10^{-5}$
5	$5 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-9}$	$5 \cdot 10^{-5}$	$3.3 \cdot 10^{-5}$
6	$2 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-3}$	$7.2 \cdot 10^{-7}$
7 and 8	$7 \cdot 10^{-5}$	$7 \cdot 10^{-7}$	$7 \cdot 10^{-3}$	$7.1 \cdot 10^{-5}$
9 and 10	10^{-4}	10^{-6}	10^{-2}	$9.96 \cdot 10^{-5}$
11	$4 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{-8}$	$4 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$
12 and 13	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$1.5 \cdot 10^{-7}$	$1.5 \cdot 10^{-3}$	$5.15 \cdot 10^{-5}$
14 and 15	$1.6 \cdot 10^{-4}$	$1.6 \cdot 10^{-6}$	$1.6 \cdot 10^{-2}$	$1.1 \cdot 10^{-4}$
16	$7 \cdot 10^{-6}$	$7 \cdot 10^{-8}$	$7 \cdot 10^{-4}$	$7.0 \cdot 10^{-4}$
17	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$1.5 \cdot 10^{-7}$	$1.5 \cdot 10^{-3}$	$1.5 \cdot 10^{-7}$
18	$4 \cdot 10^{-5}$	$4 \cdot 10^{-7}$	$4 \cdot 10^{-3}$	$4.8 \cdot 10^{-5}$
19	$2 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-3}$	$8.5 \cdot 10^{-7}$
20	$4 \cdot 10^{-5}$	$4 \cdot 10^{-7}$	$4 \cdot 10^{-3}$	$4 \cdot 10^{-3}$
21	$5 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-7}$
22	$5 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$8.56 \cdot 10^{-7}$
criterion (m)	1.10	-	-	0.83

Fig. 32 - Calage automatique en régime permanent.

Exemple numéro : 5.2.2						FIGURE : 33	
répertoire des fichiers de données : .DATA. SIMILCSM fichiers de données							
nom :		type :	.SMD	.DAT	.TM...	.OPT	autres fichiers
SIMILCSM				X	TMD	X	
nombre de noeuds : 1352							
nombre d'éléments 1D : 128							
2D : 1147							
3D :							
Objectif : calage simultané en hydrodynamique et transfert.							
remarques :							

Parameters to calibrate	Initial values	Minimum values	Maximum values	Kind of variation of Newton's optimization	Automatically calibrated values for isotropic conductivity in layer 3	Automatically calibrated values for anisotropic conductivity tensor in layer 3
longitudinal dispersivity (m)	50	0.5	5000	arithmetic	10.8	12
transversal dispersivity (m)	5	0.05	500	arithmetic	1.2	1.5
maximum conductivity in layer 3 (m/s)	10 ⁻⁶	10 ⁻⁹	10 ⁻³	logarithmic	10 ⁻⁵	4.2 10 ⁻⁵
minimum conductivity in layer 3 (m/s)	10 ⁻⁶	10 ⁻⁹	10 ⁻³	logarithmic	10 ⁻⁵	5.6 10 ⁻⁶
conductivity tensor main direction in layer 3 (degree)	10	0	180	arithmetic		78.6

- Fracture zones
- Fixed head in rivers
- Observation points
- +P: Pumping borehole
- +M: Borehole used for tracer injection

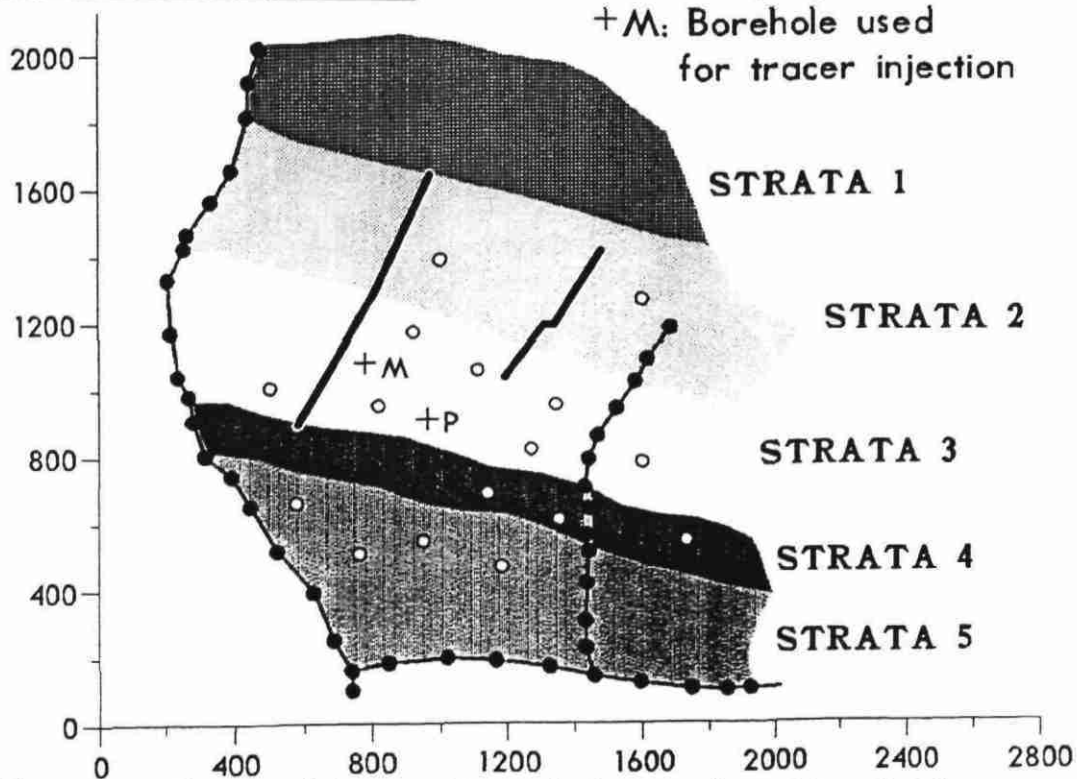


Fig. 33 - Calage automatique en régime transitoire : hydrodynamique et transfert de masse.

6. Couplages transport géochimie

Ce chapitre présente trois exemples de couplages transport-géochimie qui permettent de vérifier l'algorithme de calcul du modèle TAFFETAS. La méthode de transport utilisée est celle des éléments finis conformes linéaires, avec un schéma de discrétisation temporelle de LEISMANN.

6.1. TEST DE LA SILICE

Ce test (cf. Fabriol, Sauty, Ouzounian, 1993) permet de vérifier le couplage 2D avec une injection brève (Dirac) par comparaison à une solution analytique.

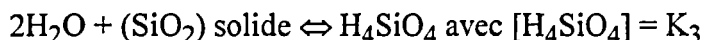
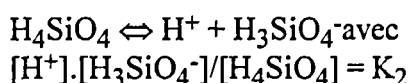
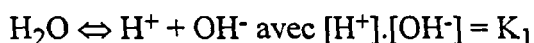
Cet exemple correspond à celui décrit par Fabriol et al. (1993). Le domaine d'étude est 2D avec une vitesse uniforme le long de l'axe horizontal. Il y a une phase solide contenant initialement de la calcédoine (SiO_2) en quantité infinie (10^5 mol/l). Le milieu poreux contient initialement de l'eau pure.

On y injecte instantanément une solution de soude (NaOH) à raison de 10 moles par mètre d'épaisseur d'aquifère. Le problème consiste à calculer la concentration en ion Na^+ et le pH, 150 jours après l'injection, et à calculer les historiques de ces mêmes variables aux points de coordonnées ($x = 212,5$, $y = 0$) et ($x = 212,5$, $y = 30$) l'injection étant en ($x = 62,5$, $y = 0$).

6.1.1. Le modèle chimique

Les quatre éléments chimiques dans la phase liquide sont H, O, Na et Si. Seuls les trois premiers sont injectés. La silice provient de la dissolution de SiO_2 en phase solide.

Le modèle chimique fait intervenir 3 réactions instantanées avec les lois d'action de masse :



Les constantes sont les suivantes, en notant $p^* = -\log_{10}(*)$:

$$pK_1 = 13.998$$

$$pK_2 = 9.77$$

$$pK_3 = 3.554$$

Les concentrations et les constantes correspondent à des mol/l. Fabriol et al. (1993) montrent que la concentration en ion H^+ peut être déduite de celle de la concentration C de Na^+ par :

$$H^+ = [-C + (C^2 + 4K_1 + K_2 + K_3)^{0.5}] / 2.$$

On considère que le sodium Na^+ est un traceur parfait. On a donc :

$$C = 0.001 \cdot \frac{M}{4\pi\theta \cdot u \cdot (\alpha_L \alpha_T)^{0.5} \cdot t} \cdot \exp(-arg)$$

$$arg = \frac{(x - ut)^2}{4\alpha_L \cdot u \cdot t} + \frac{y^2}{4\alpha_T \cdot u \cdot t}.$$

M = Masse injectée (moles) par unité d'épaisseur d'aquifère
 θ = teneur en eau
 u = vitesse réelle
 α_L, α_T = dispersivités
 x, y, t = coordonnées.

N.B. Le facteur 0.001 sert à transformer les mol/m³ en mol/l qui est l'unité utilisée dans les modèles chimiques.

6.1.2. Simulations

Les paramètres du test sont :

M = 10 mol/m
 θ = 10 %
 u = $1.1574 \cdot 10^{-5}$ m/s (1 m/jour)
 α_L, α_T = 5 m et 1 m respectivement.

Le maillage utilisé est composé de rectangles de 12.5 m de longueur suivant l'axe X et de 5 m de largeur suivant l'axe Y. L'épaisseur de l'aquifère est de 1 m. Son extension suivant l'axe X est de 312.5 m et de 65 m suivant l'axe Y. L'injection instantanée est réalisée en $X = 62,5$ m et $Y = 0$ m.

Le pas de temps est de 6.25 jours. La simulation est donc réalisée avec un nombre de courant $Co = 0.5$.

La figure 34 montre les historiques de concentration en sodium (Na^+) et les historiques de pH aux deux points de contrôle. La comparaison avec la solution analytique montre que la simulation est très bonne.

La figure 35 montre la carte des concentrations en Na^+ et la carte du pH après 150 jours. L'ajustement est très bon sur toute l'extension du domaine.

Enfin, notons que d'autres calculs réalisés avec un pas de temps de 12.5 jours ($\text{Co} = 1.$) et de 4.2 jours ($\text{Co} = 0.33$) donnent des résultats assez similaires.

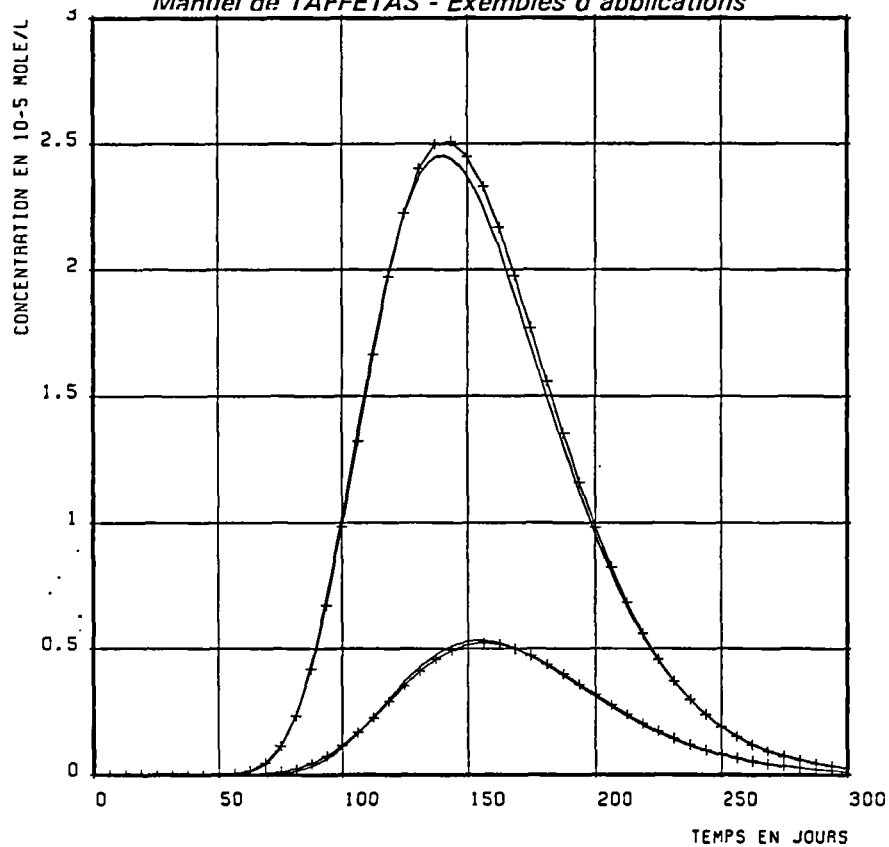


Fig. 34a - Evolution des concentrations en Na⁺ aux deux points de contrôle.

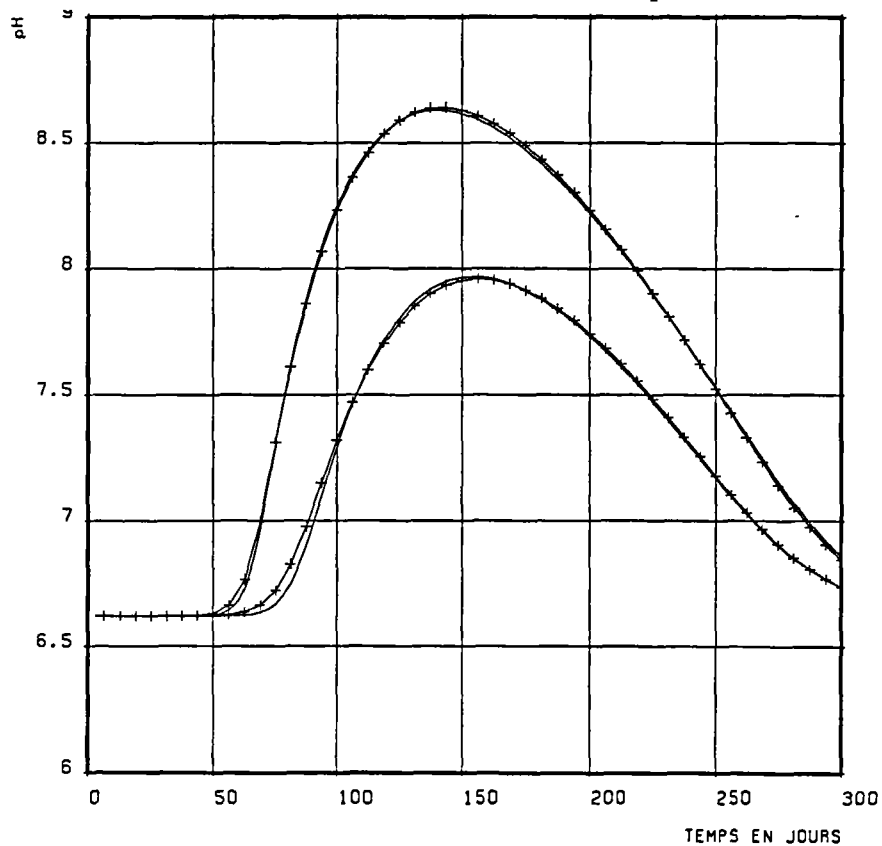


Fig. 34b - Evolution du pH aux deux points de contrôle.

Fig. 34 - Test de la silice - comparaison des historiques de concentration et pH simulés avec TAFETAS et des résultats analytiques. (— analytique, +++ TAFETAS).

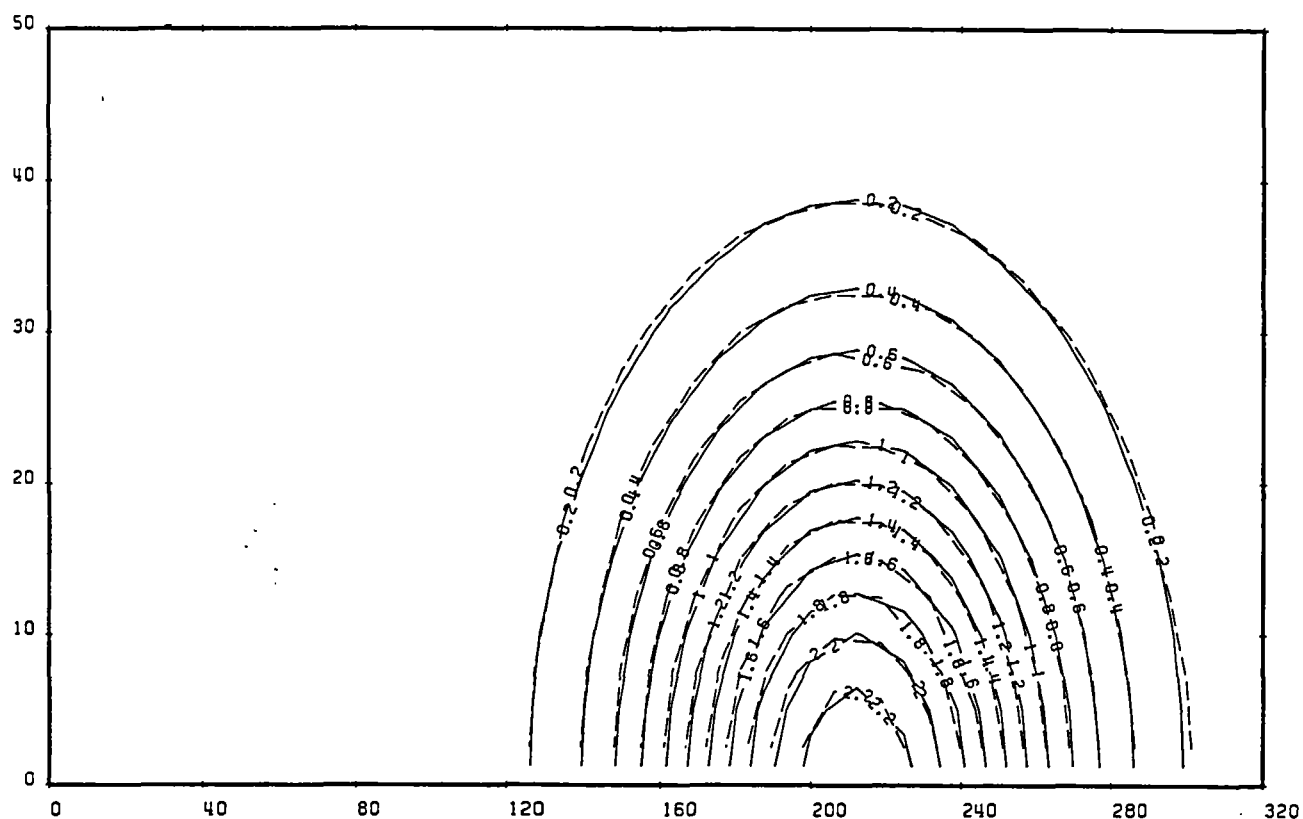


Fig. 35a - Carte des concentrations en Na^+ , 150 jours après l'injection.

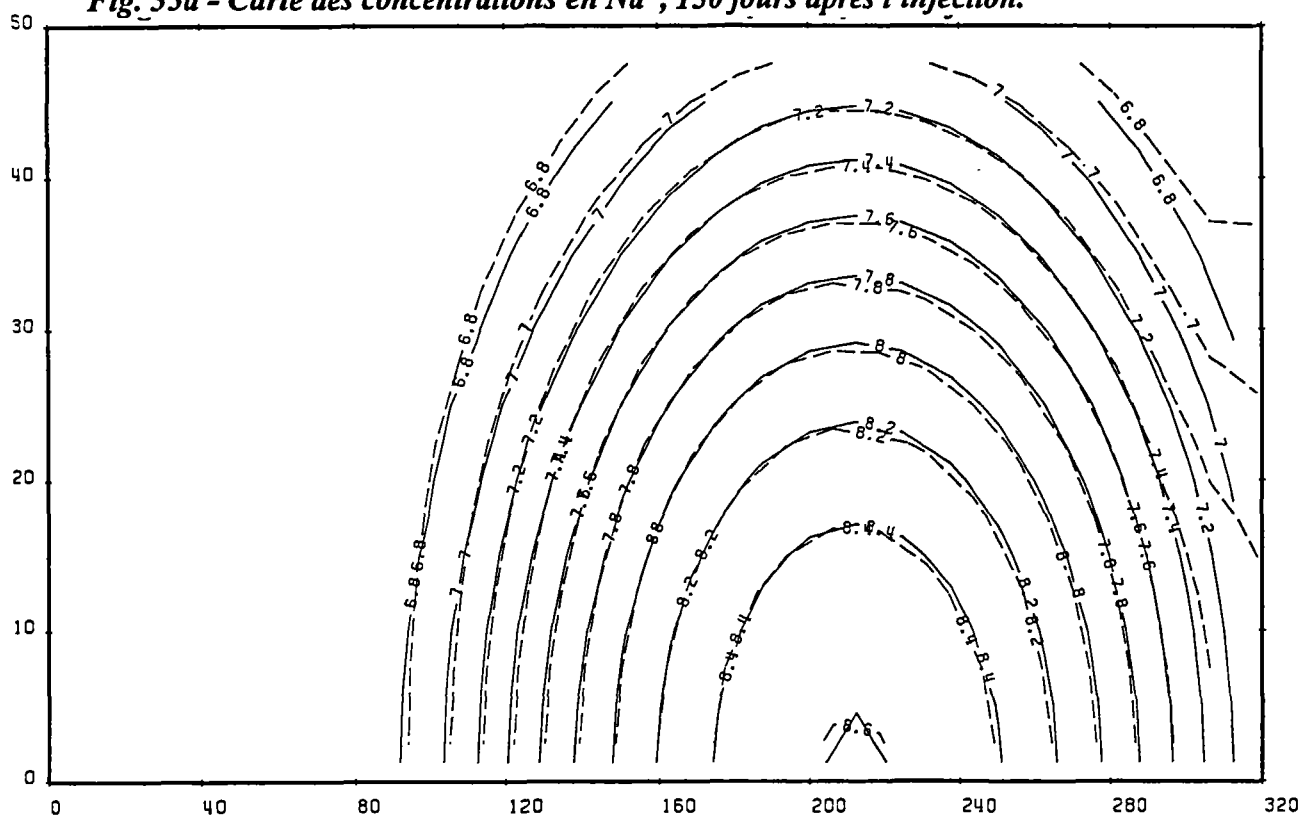


Fig. 35b - Carte du pH, 150 jours après l'injection.

Fig. 35 - Test de la silice - comparaison des cartes de concentration à 150 jours, simulées avec TAFFETAS et la solution analytique.
(— analytique, — TAFFETAS).

6.2. TEST DU CIMENT

Cet exemple qui fait partie des tests internationaux CHEMVAL permet de valider le couplage par comparaison à d'autres modèles dans un cas mettant en jeu de très fortes variations de pH, de 7 à 12,5, donc de très faibles concentrations en ion H^+ , pour un écoulement monodimensionnel 1D en régime permanent.

De l'eau provenant d'un aquifère argileux percole lentement à travers une eau légèrement sursaturée en portlandite (ciment). Les phénomènes mis en jeu au cours de la percolation sont la dissolution et la précipitation de minéraux (calcite, portlandite) et la complexation d'espèces chimiques dans l'eau.

Le ciment contient une eau de composition initiale donnée. Une eau d'origine argileuse impose sa concentration à l'amont et s'écoule avec une vitesse constante u et une dispersivité α_L dans le ciment dont la teneur en eau est θ .

Les paramètres de l'écoulement sont les suivants :

$$u = 3,1688 \cdot 10^{-10} \text{ m/s (1 cm/an)}$$

$$\alpha_L = 1 \text{ m}$$

$$\theta = 10 \text{ \%}$$

La vitesse de Darcy est donc $q = 0,1 \text{ cm/an} = 3,1688 \cdot 10^{-11} \text{ m/s}$.

6.2.1. Le modèle chimique

Le modèle chimique fait intervenir 6 éléments chimiques en phase liquide et 2 espèces chimiques en phases solides. Les données caractéristiques sont listées dans le tableau suivant :

Caractéristiques chimiques du modèle du ciment.

	H	O	Na	Ca	Cl	C
Composition chimique initiale (mol/l)	$5,599 \cdot 10^{-2}$	$5,0529 \cdot 10^{-2}$	$8 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$2,9323 \cdot 10^{-3}$	10^{-10}
Composition chimique imposée à l'amont	$1,5389 \cdot 10^{-2}$	$1,8962 \cdot 10^{-2}$	$8 \cdot 10^{-3}$	$5,5 \cdot 10^{-3}$	$1,44663 \cdot 10^{-2}$	$4,5 \cdot 10^{-3}$
Soit une variation en mol/l	$-4,0601 \cdot 10^{-2}$	$-3,1567 \cdot 10^{-2}$	0	$-1,45 \cdot 10^{-2}$	$1,1534 \cdot 10^{-2}$	$4,5 \cdot 10^{-3}$
Composition initiale après spéciation initiale (variation)	$4,899 \cdot 10^{-2}$ ($-6,997 \cdot 10^{-3}$)	$4,353 \cdot 10^{-2}$ ($-6,997 \cdot 10^{-3}$)	$8 \cdot 10^{-3}$ (0)	$1,65 \cdot 10^{-2}$ ($-3,498 \cdot 10^{-3}$)	$2,9323 \cdot 10^{-3}$ (0)	10^{-10} (0)

Dans la phase solide, la concentration initiale est nulle ; après spéciation initiale les concentrations des 2 espèces de la phase solide sont :

- Calcite [CaCO_3] = 0 mol/m³ de milieu poreux
(2,590 10⁻³ dans la maille d'injection)
- Portlandite [$\text{Ca}(\text{OH})_2$] = 0,34986 mol/m³ de milieu poreux
(0 dans la maille d'injection).

Après spéciation initiale on obtient les concentrations suivantes (en mol/l) :

	Na ⁺	Ca ⁺⁺	CaOH ⁺	CaHCO ₃ ⁺	pH
eau initiale	7,8851 10 ⁻³	1,25911 10 ⁻²	3,8883 10 ⁻³	6,4902 10 ⁻¹⁵	12,44
eau argileuse	7,9609 10 ⁻³	5,4155 10 ⁻³	6,022 10 ⁻⁹	1,5996 10 ⁻⁴	6,94

N.B. Les concentrations en H (hydrogène) et en O (oxygène) sont toujours données en variation par rapport à celle de l'eau pure (55,51 moles d'eau par kg d'eau) donc 55,51 mol/l d'oxygène et 111,02 mol/l d'hydrogène.

6.2.2. - Simulations

Pour ce test du ciment, D. Thiéry (1995) ayant montré la qualité des résultats obtenus avec le logiciel MARTHE, version 5.5, par rapport aux résultats des participants au test CHEMVAL, nous choisissons comme référence et en l'absence de solution analytique la "solution" obtenue par différences finies avec MARTHE.

On choisit une discrétisation faisant intervenir des éléments de 12,5 cm et un pas de temps de 12,5 ans, d'où les nombres de Peclet et de Courant : $Pe = 0,125$, $Cr = 1$. Les valeurs obtenues sont très proches de celles de la simulation de référence. Le domaine modélisé s'étend sur 10 mètres, soit 80 éléments, et la durée de simulation sur 200 ans, soit 16 pas de temps. Les figures 36 et 37 montrent les concentrations calculées après 200 ans des espèces suivantes : Na^+ , Ca^{++} , CaOH^+ , et le pH. Les valeurs calculées sont très semblables à celles calculées comme simulation de référence. On remarque en particulier que les concentrations près de la limite amont tendent régulièrement vers les concentrations imposées et que les concentrations à la limite aval sont identiques aux concentrations initiales.

En conclusion, notons que pour cet exemple avec une forte dispersion ($Pe = 0.125$ avec des grandes mailles de 12.5 cm), le transport par éléments finis donne des résultats très bons et très rapides en temps CPU. Le schéma de Leismann appliqué avec des éléments conformes linéaires, pour une chimie simulée aux noeuds du maillage, est stable et efficace (rapide car la matrice de transport reste symétrique).

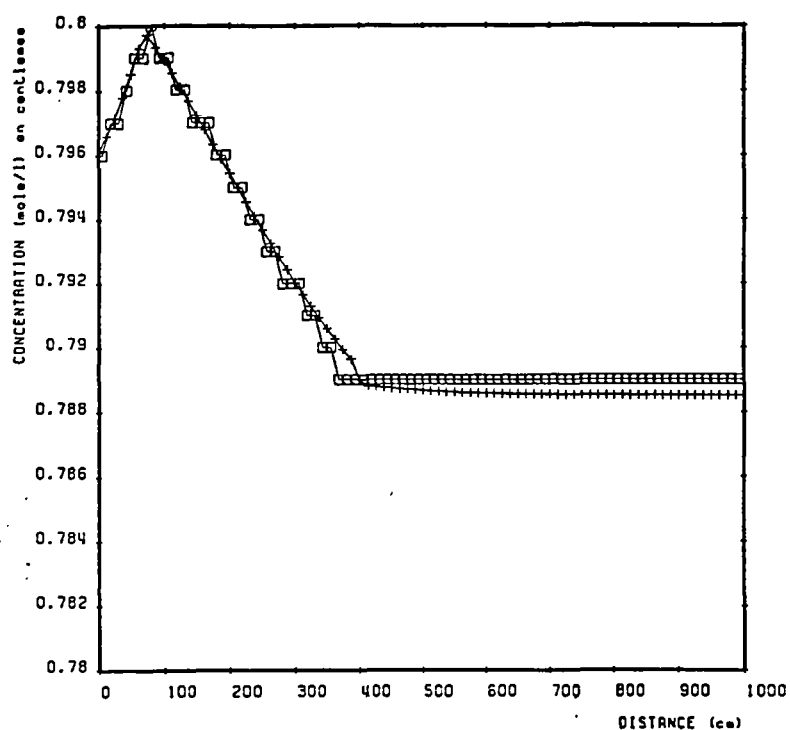


Fig. 36a - Concentration en Na⁺ en fonction de la distance.

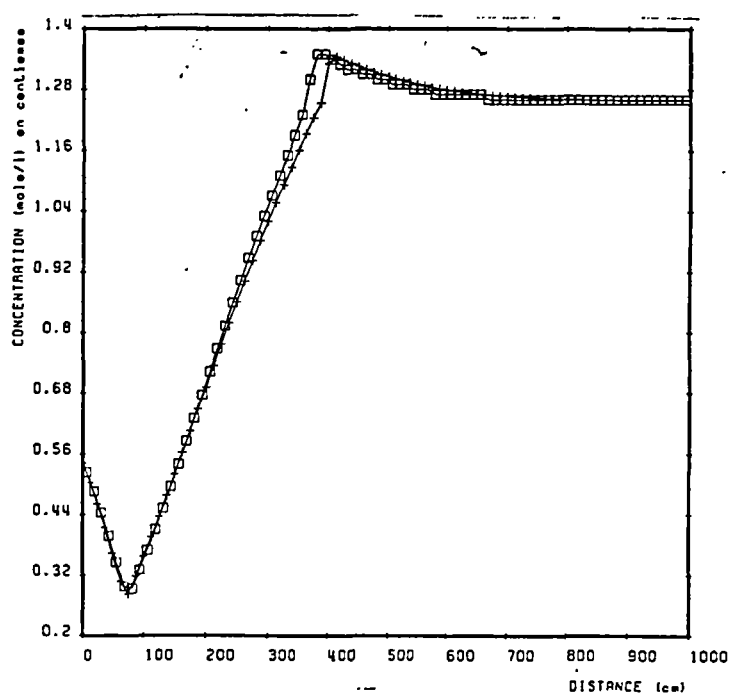


Fig. 36b - Concentration en Ca⁺⁺ en fonction de la distance.

Fig. 36 - Test du ciment - comparaison des distributions spatiales de Na⁺ et Ca⁺⁺ obtenues après 200 ans avec MARTHE version 5.5 et TAFFETAS. (+++ MARTHE, □□□ TAFFETAS).

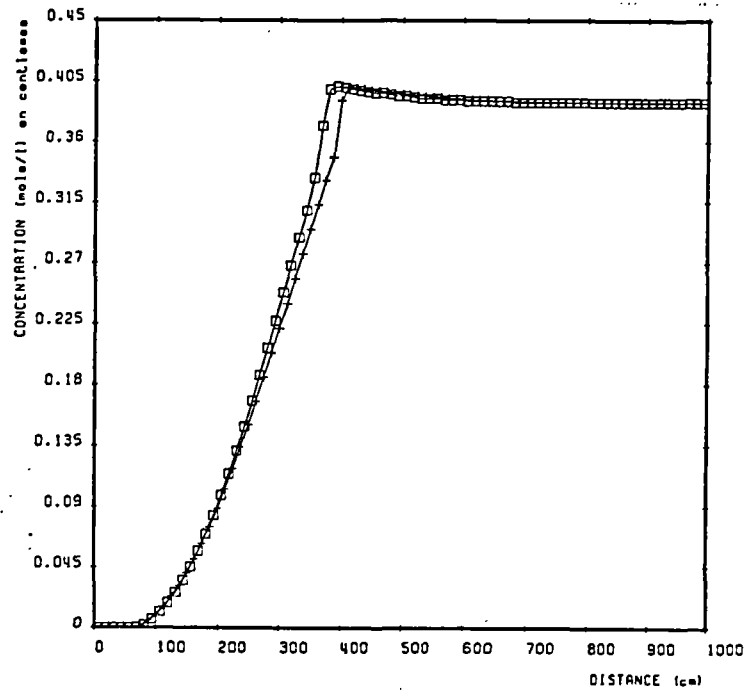


Fig. 37a - Concentrations en CaOH^+ en fonction de la distance.

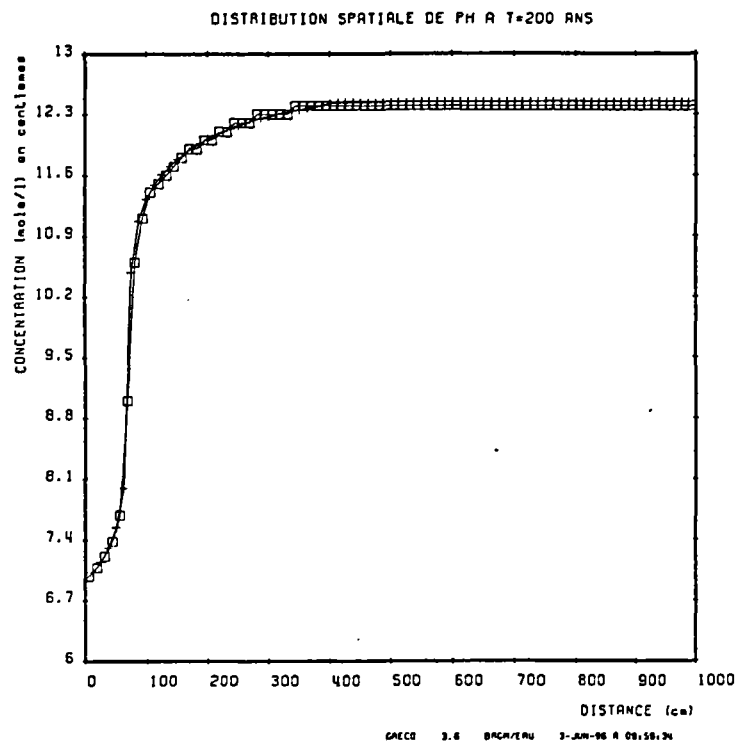


Fig. 37b - pH en fonction de la distance.

Fig. 37 - Test du ciment - comparaison des distributions spatiales de CaOH^+ et pH obtenues après 200 ans avec MARTHE version 5.5 et TAFFETAS. (+++ MARTHE, xxx TAFFETAS).

6.3. TEST DU CXTFIT

Cet exemple permet de vérifier le modèle par rapport à une solution analytique dans le cas monodimensionnel avec une cinétique d'échange linéaire.

Cet exemple, mis au point par C. Kervevan et R. Fabriol est adapté de celui présenté par J.C. Parker (1985) pour valider le logiciel CXTFIT de calage automatique d'un modèle d'adsorption avec cinétique linéaire.

Il s'agit d'un écoulement monodimensionnel avec une vitesse de pore uniforme u et une dispersivité α_L constante.

6.3.1 Le modèle chimique

Il y a deux phases :

- 1 phase liquide contenant un seul élément chimique, de concentration C (moles/m³ de terrain) ;
- 1 phase solide contenant une seule espèce chimique, de concentration S_v (moles/m³ de terrain).

Le modèle chimique s'écrit, en unités S.I. :

$$\frac{\partial S_v}{\partial t} = (K_D \cdot C - S_v) / te$$

avec :

te = constante de temps [T]

K_D = coefficient de partage volumique [-]

En fait, le modèle chimique est écrit avec les variables α et R définies comme suit (en notant θ_m la teneur en eau mobile) :

α [T⁻¹] = $1/te$

R [-] = $1 + K_D/\theta_m$ (coefficient de retard)

Le modèle chimique admet une solution analytique simple en écrivant que la masse totale M somme de la phase liquide et de la phase solide, se conserve au cours des échanges chimiques :

$$M = \theta_m \cdot C_0 + S_{v0} = \theta_m \cdot C + S_v$$

d'où la solution :

$$C = \frac{M}{\theta_m + K_D} + \left(C_0 - \frac{M}{\theta_m + K_D} \right) \cdot \exp(-t / T)$$

$$S_v = \frac{M \cdot K_D}{\theta_m + K_D} + S_{v0} \left(\frac{M \cdot K_D}{\theta_m + K_D} \right) \cdot \exp(-t / T)$$

Avec $T = t_e / R =$ constante de temps d'échange.

6.3.2. Simulations

a) Etat initial et conditions aux limites

Dans l'état initial on a $C = 0$ et $S_v = 0$. A l'instant initial on impose $C = 20$ sur la limite amont, puis après 5 jours on réimpose $C = 0$ (soit un créneau de 5 jours).

b) Paramètres

Deux tests sont modélisés avec des paramètres différents :

• test a

$u = 4.456 \cdot 10^{-6} \text{ m/s} \quad (38.5 \text{ cm/j})$
 $\alpha_L = 0$
 $\theta_m = 100 \%$
 $K_D = 100 \%$
 $t_e = 2 \text{ jours}$
 (d'où $R = 2$ et $T = 1 \text{ jour}$) ;

• test b

$u = 4.456 \cdot 10^{-7} \text{ m/s} \quad (3.85 \text{ cm/j})$
 $\alpha_L = 0.10 \text{ m}$
 $\theta_m = 100 \%$
 $K_D = 9$
 $t_e = 2 \text{ jours}$

(d'où $R = 10$ et $T = 0.2 \text{ jour}$)

On s'intéresse à la courbe d'élution (concentration en fonction du temps) à la distance $x=30$ cm de la limite amont.

c) Simulations du test a

C'est un test sans dispersion ($\alpha_L = 0$). Le domaine modélisé comporte 10 éléments de 3 cm ; le pas de temps est de 0.078 jour ($Co = 1$). Les résultats, corrects même avec un maillage grossier, sont présentés sur la figure 38.

d) Simulations du test b

Pour ce test, nous n'avons pas obtenu de bons résultats avec le maillage grossier du test a ($\Delta x = 3$ cm, $\alpha_L = 10$ cm, $Pe = 0.3$) et ceci quel que soit le pas de temps Δt (0.78 jours et $Co = 1$, 0.39 jour et $Co = 0.5$, 0.195 jour et $Co = 0.25$) comme c'est visible sur la figure 39a.

Avec un maillage plus fin ($\Delta X = 0.5$ cm donc $Pe = 0.05$) et quel que soit le pas de temps, les résultats n'ont pas été améliorés (cf. Fig. 39b).

Dans cet exemple avec cinétique, le problème du test b est plus difficile que celui du test a parce que la cinétique y est beaucoup plus rapide (R plus grand).

Les résultats sont cependant surprenants car le passage au maillage fin aurait dû améliorer les résultats.

D'autres tests avec cinétique seront donc nécessaires pour valider complètement le couplage transport-géochimie.

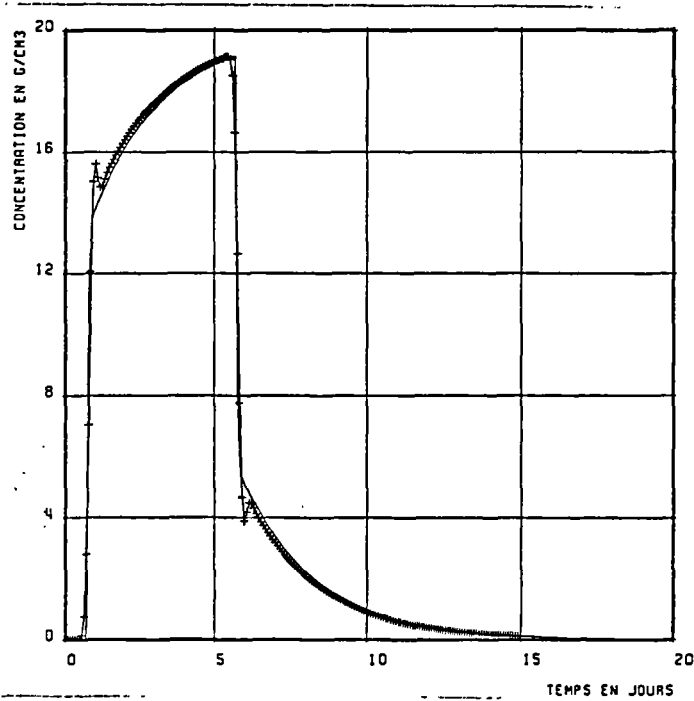


Fig. 38a - Test a - Evolution de la concentration en phase aqueuse à 30 cm.

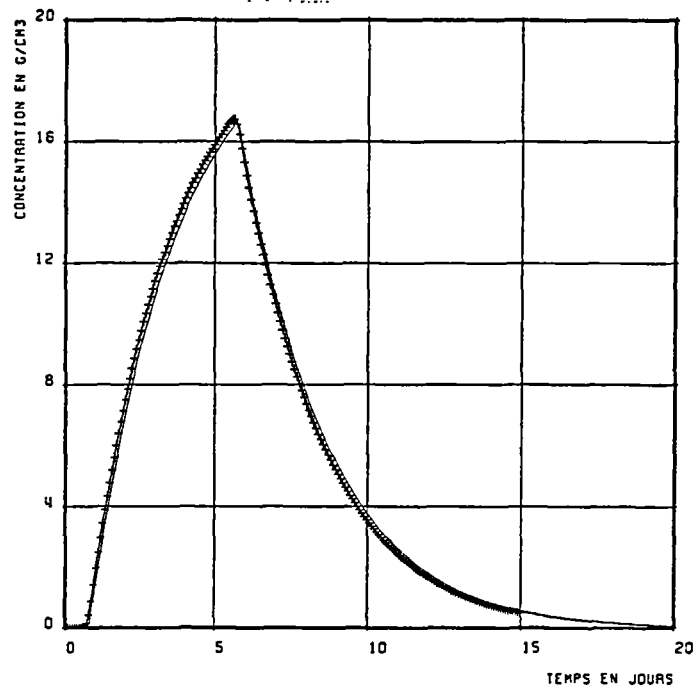


Fig. 38b - Test a - Evolution de la concentration adsorbée à 30 cm.

Fig. 38 - Test du CXTFIT - test a - Comparaison des évolutions de concentration à 30 cm, simulées par TAFFETAS et des résultats analytiques (— analytique, +++ TAFFETAS).

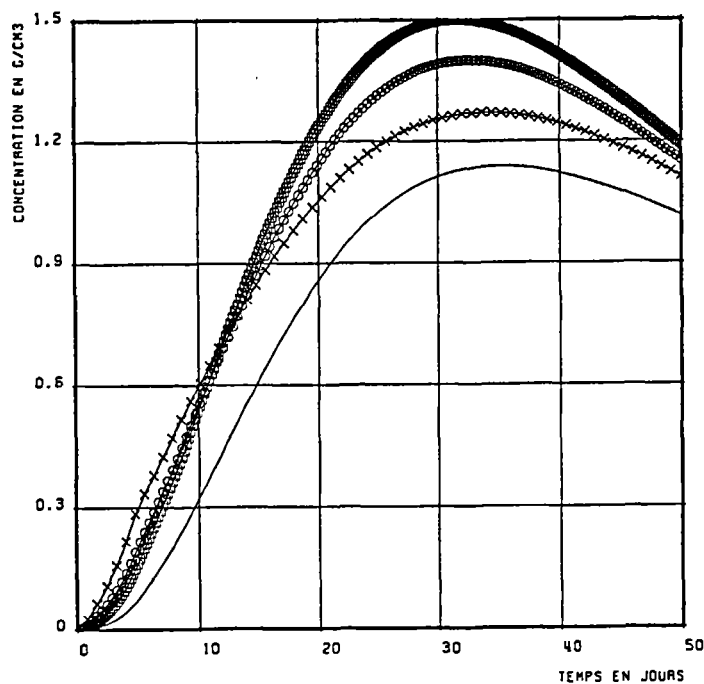


Fig. 39a - Test b - Evolution de la concentration en phase aqueuse à 30 cm - maillage grossier. (— analytique, TAFETAS : X $Co = 1$, $\square Co = 0.25$).

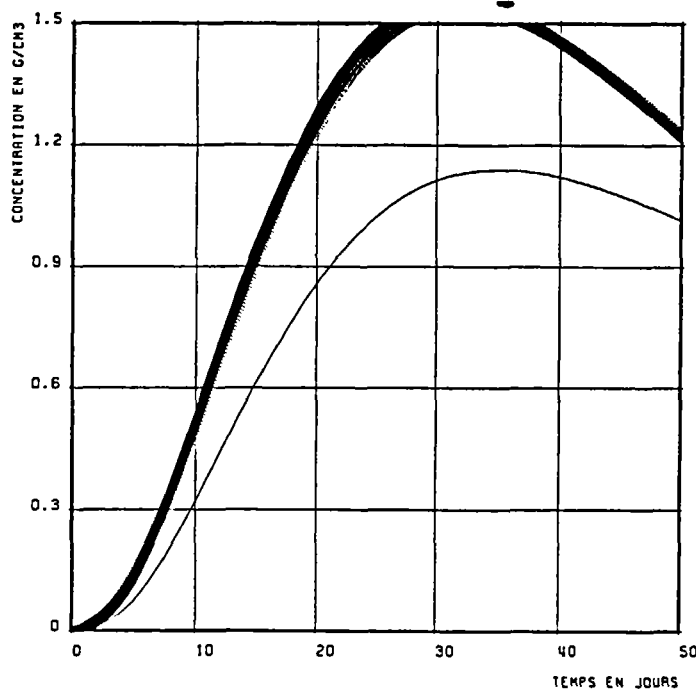


Fig. 39b - Test b - Evolution de la concentration en phase aqueuse à 30 cm - maillage fin. (— analytique, TAFETAS : X $Co = 0.77$, $\square Co = 0.385$).

Fig. 39 - Test du CXTFIT - Test b - Comparaison des évolutions de concentration à 30 cm, simulées par TAFETAS et des résultats analytiques.

Conclusion

Les exemples présentés dans ce volume 4 doivent permettre à tout utilisateur de trouver un ou plusieurs exemples-guide dans la préparation de simulations avec TAFFETAS.

Chacun des sujets suivants a fait l'objet d'une illustration type permettant d'appréhender une difficulté particulière :

- écoulements permanents 2D ;
- écoulements permanents 3D ;
- écoulements transitoires 1D, 2D ou 3D ;
- écoulements 2D et 3D couplés (fractures et matrice) ;
- transport d'un soluté dans un écoulement quelconque ;
- transfert de chaleur dans un écoulement quelconque ;
- transport de plusieurs solutés et de chaleur dans un écoulement quelconque (2D ou 3D, permanent ou transitoire) ;
- écoulement et transferts couplés via la viscosité ;
- écoulement et transferts couplés via la densité ;
- maillages auto-adaptatifs en écoulement ou/et en transfert ;
- calage des paramètres (calage généralisé) ;
- couplage transport - géochimie.

Liste des figures

- Fig. 1 - Trajectoires en rotation autour de deux barrières (Test de symétrie des écoulements).
- Fig. 2 - Trajectoires en rotation autour de deux barrières (Test de symétrie des écoulements).
- Fig. 3 - Propagation d'un signal sinusoïdal en pression dans un aquifère (LINBAR16 et MIXBAR16).
- Fig. 4 - Test HYDROCOIN numéro 6.
- Fig. 4bis - Extension horizontale des différentes structures (couches géologiques).
- Fig. 4ter - Vue schématique du domaine de modélisation indiquant les systèmes géologiques et les conditions aux limites
- Fig. 5a - Affectation du maillage pour traiter l'exemple de la figure 4ter, et isopotentiels calculés.
- Fig. 5b - Coupe horizontale en $Z = 0$ m.
- Fig. 5c - Coupe horizontale en $Z = 1\,200$ m.
- Fig. 5d - Coupe verticale en $X = 300$ km.
- Fig. 6a - Modélisation 2D des écoulements : Site de Neuvy Boin.
- Fig. 6b - Modélisation 3D des écoulements : Site de Neuvy Boin.
- Fig. 6c - Coupe verticale dans le modèle à 4 couches. Organisation des isopotentiels.
- Fig. 7a - Modélisation 2D en domaine à double porosité : site de Tayma (Arabie Saoudite).
- Fig. 7b - Modélisation 2D en domaine à double porosité : site de Tabuk (Arabie Saoudite).
- Fig. 8 - Modélisation 3D en domaine à double porosité (site d'ÄSPÖ: Suède).

- Fig. 9 - Modélisation 2D d'un pompage dans un écoulement régional : méthode conforme.
- Fig. 10 - Modélisation 2D d'un pompage dans un écoulement régional : méthode mixte hybride.
- Fig. 11 - Test HYDROCOIN numéro 2.
- Fig. 12 - Test HYDROCOIN numéro 2 (suite).
- Fig. 13 - Site de Finnsjön (Suède).
- Fig. 14 - Trajectoires 3D : Benchmark Sauty - Kinzelbach.
- Fig. 15 - Comportement des trajectoires autour d'un bloc de faible perméabilité.
- Fig. 16 - Comportement des trajectoires autour d'un bloc de faible perméabilité.
- Fig. 17 - Transport monodimensionnel : Comparaison après 40 s entre solutions analytiques exactes et résultats numériques calculés avec TAFFETAS.
- Fig. 18 - Transport 2D.
- Fig. 19 - Transport tridimensionnel avec diffusion dans la matrice depuis une fracture.
- Fig. 20a - Transport tridimensionnel avec une fracture.
- Fig. 20b - Champs des concentrations en fonction du temps dans le plan $Y = 80$ m.
- Fig. 21 - Test d'un traçage multicomposant : (7 composants simultanément) (a : arithmétique / b : logarithmique).
- Fig. 22a - Doublet géothermique : Exemple 2D (maillage autour de l'injecteur, trajectoires et vecteurs vitesses).
- Fig. 22b - Doublet géothermique : champ de température dans le doublet après 10 et 20 ans.
- Fig. 23 - Comparaison intercode des courbes calculées pour la production du doublet géothermique de Chatenay Malabry (modèle 3D avec aquifère 2D).
- Fig. 24 - Comparaison entre solution analytique exacte et solution numérique de TAFFETAS : méthode des éléments finis conformes linéaires avec le schéma d'intégration temporelle de Leismann et Frind.

- Fig. 25 - Comparaison entre solution analytique exacte et solution numérique de TAFFETAS : méthode des particules (Random Walk).
- Fig. 26 - Comparaison entre solution analytique exacte et solution numérique de TAFFETAS : méthode des caractéristiques (MOC).
- Fig. 27 - Comparaison des variations de pressions.
- Fig. 28 - Couplage densitaire : Doublet dans un aquifère incliné ($\alpha = 10^\circ$).
- Fig. 29 - Pompage en milieu homogène : fichier ADAPFLOW.DAT.
- Fig. 30 - Iso-concentrations après 100, 200 et 300 s : comparaison avec une solution analytique (en pointillé).
- Fig. 31 - Adaptation simultanée du maillage avec un critère hydrodynamique (gradient de charge) et un critère de transport (gradient de concentration).
- Fig. 32 - Calage automatique en régime permanent.
- Fig. 33 - Calage automatique en régime transitoire : hydrodynamique et transfert de masse.
- Fig. 34 - Test de la silice - comparaison des historiques de concentration et pH simulés avec TAFFETAS et des résultats analytiques. (—analytique, +++ TAFFETAS).
- Fig. 35 - Test de la silice - comparaison des cartes de concentration à 150 jours, simulées avec TAFFETAS et la solution analytique. (—analytique, — TAFFETAS).
- Fig. 36 - Test du ciment - comparaison des distributions spatiales de Na^+ et Ca^{++} obtenues après 200 ans avec MARTHE version 5.5 et TAFFETAS. (+++ MARTHE, □□□ TAFFETAS).
- Fig. 37 - Test du ciment - comparaison des distributions spatiales de CaOH^+ et pH obtenues après 200 ans avec MARTHE version 5.5. et TAFFETAS. (+++ MARTHE, □□□ TAFFETAS).
- Fig. 38 - Test du CXTFIT - test a - comparaison des évolutions de concentration à 30 cm, simulées par TAFFETAS et des résultats analytiques (—analytique, +++ TAFFETAS).
- Fig. 39 - Test du CXTFIT - test b - comparaison des évolutions de concentration à 30 cm, simulées par TAFFETAS et des résultats analytiques.