



HAL
open science

Modélisation du transport réactif dans les eaux souterraines : généralisation des méthodes ELLAM : (Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method)

Fanilo Heninkaja Ramasomanana

► **To cite this version:**

Fanilo Heninkaja Ramasomanana. Modélisation du transport réactif dans les eaux souterraines : généralisation des méthodes ELLAM : (Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method). Sciences de la Terre. Université de Strasbourg, 2012. Français. NNT : 2012STRAH001 . tel-00737926

HAL Id: tel-00737926

<https://theses.hal.science/tel-00737926>

Submitted on 3 Oct 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

École Doctorale Science de la Terre,
de l'Univers et de l'Environnement

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE DE STRASBOURG

Discipline : Mécanique des Fluides

Présentée par

Fanilo RAMASOMANANA

**Modélisation du transport réactif dans les eaux souterraines :
Généralisation des méthodes ELLAM
(Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method)**

Soutenue le 31 Mai 2012

Membres du Jury

Directeur de thèse :	M. A. YOUNES,	Chargé de Recherche, LHYGES Strasbourg
Rapporteur interne :	M. R. MOSE,	Professeur, ENGEES Strasbourg
Rapporteur externe :	M. M. BUES,	Professeur, ENSG-INPL Nancy
Rapporteur externe :	M. J.R. de DREUZY,	Chargé de Recherche, Géosciences Rennes
Examineur :	M. P. ACKERER,	Directeur de Recherche, LHYGES Strasbourg
Examineur :	M. T. MARA,	Maître de Conférences, Université de La Réunion

Avant-propos

Les travaux de recherche qui ont fait l'objet de ce mémoire ont été réalisés au sein du Laboratoire d'Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg (LHyGeS).

Pour m'avoir initié à la recherche et pour la confiance qu'il m'a accordé depuis mon Master, mes premiers remerciements vont à mon directeur de thèse, Anis Younes, Chargé de Recherche au CNRS. Sa disponibilité, ses conseils et son soutien tout au long de ces années m'ont permis de mener à bien ce travail. Qu'il trouve ici toute ma reconnaissance.

Je voudrais également remercier Monsieur Philippe Ackerer, Directeur de Recherche au CNRS, pour m'avoir accueilli au sein du LHyGeS et de m'avoir offert de très bonnes conditions de travail. Les échanges que nous avons eus m'ont été très précieux.

Je remercie les membres du jury pour avoir jugé ce travail, leurs regards critiques m'ont été d'une grande utilité : Messieurs Michel Bues, Professeur à l'ENSG-INPL Nancy, Jean-Raynald de Dreuzy, Chargé de Recherche à Géosciences Rennes, Robert Mosé, Professeur à l'ENGEEES Strasbourg, Thierry Mara, Maître de Conférences à l'Université de La Réunion.

Je voudrais associer à ces travaux Monsieur Marwan Fahs, Ingénieur d'étude au CNRS, qui m'a apporté une aide considérable ainsi que Messieurs François Lehmann et Benjamin Belfort, Maîtres de Conférences à l'IUT de Schiltigheim, pour les discussions fructueuses au laboratoire et leurs conseils avisés durant mon monitorat à l'IUT.

Je pense aussi à tous les collègues et amis que j'ai côtoyés durant cette aventure : Omnia Azzam, Solène Cotel, Emna Errais, Noura Fajraoui, Marie Lefrancq, Elodie Maillard, Salsabil Marzougui, Morgane Mey, Laurianne Schneider, Raphaël di Chiara, Simon Lecluse, Ivan Toloni, Nicolas Trottier, Ali Zidane et une mention spéciale à Sana Ounaies...

J'adresse un grand merci à l'ensemble du personnel du LHyGeS, à la communauté Malgache de Strasbourg, à tous mes amis avec qui j'ai partagé mes joies et mes peines et qui ont su me soutenir dans les moments difficiles.

Enfin, mes dernières pensées vont à toute ma famille, aussi bien à Madagascar qu'en France. Je voudrais exprimer ma gratitude pour leurs présences, leurs encouragements et leurs aides sans lesquels je n'aurais pas pu atteindre cet objectif.

« Izay adala hono no toa an-drainy, koa mahatoky an'ialahy i Dada sy Neny ry Miaro kely... »

SOMMAIRE

Avant-propos	1
Sommaire	3
Introduction générale	9
Chapitre 1	13
Écoulement et transport en milieu poreux : Notions de base	
1.1 Le milieu poreux	14
1.1.1 Définition	14
1.1.2 La granulométrie	14
1.1.3 La porosité	14
<i>La porosité totale</i>	14
<i>La porosité cinématique</i>	14
1.1.4 La perméabilité	15
<i>La perméabilité intrinsèque</i>	15
<i>La perméabilité</i>	15
1.2 L'hydrodynamique en milieu poreux	15
1.2.1 La loi de Darcy	15
1.2.2 Les relations constitutives	18
1.2.3 L'équation de continuité	19
1.2.4 L'équation de l'hydrodynamique	19
1.2.5 Les conditions initiales et conditions aux limites	19
1.3 Le transport en milieux poreux	19
1.3.1 L'advection	19
1.3.2 La diffusion moléculaire	20
1.3.3 La dispersion cinématique	20
1.3.4 La dispersion	21
1.3.5 L'équation d'advection-dispersion	21
1.3.6 L'équation d'advection-dispersion-réaction	22
1.4 Couplage écoulement-transport	22
1.5 Conclusion	23

Chapitre 2 **25****Résolution de l'écoulement en milieux poreux variablement saturés avec les EFMH**

2.1 Introduction	25
2.2 La méthode des éléments finis mixtes hybrides (EFMH)	26
2.2.1 Définition	26
2.2.2 Mise en œuvre des EFMH	28
<i>Discrétisation de la loi de Darcy</i>	29
<i>Discrétisation de l'équation de Richards</i>	30
<i>Système à résoudre</i>	31
<i>Le code de calcul</i>	33
2.3 Optimisation de la méthode des éléments finis mixtes hybrides pour la modélisation des écoulements variablement saturés	35
2.3.1 Variably Saturated Flow Modeling	37
2.3.2 Numerical Approaches for Solving the Richards Equation	38
<i>The Standard Mixed Hybrid Finite Element Method</i>	38
<i>The Lumped Mixed Hybrid Finite Element Method</i>	39
2.3.3 Results and Discussion	40
<i>One-Dimensional Infiltration under a Constant-Head Boundary Condition</i>	40
<i>A Two-Dimensional Infiltration into Initially Dry Soil</i>	41
<i>A Technique for Improving the Monotonicity with Quadrangular Elements</i>	43
2.3.4 Summary and Conclusions	44
2.3.5 Appendix	45
2.3.6 References	45
2.4 Conclusion	47

Chapitre 3 **49****Quelques méthodes de résolution du problème de transport**

3.1 Introduction	50
3.2 Les méthodes eulériennes	50
3.2.1 Les méthodes eulériennes classiques	50
3.2.2 Les différences finies amont	51
3.2.3 Les méthodes d'ordre supérieur	51
3.2.4 La méthode des éléments finis discontinus (EFD)	52

3.3 Les méthodes lagrangiennes	52
3.3.1 Définition	52
3.3.2 La méthode de vitesse de diffusion (VD)	53
<i>Discretisation particulaire</i>	53
<i>Transformation de l'équation d'advection-dispersion</i>	53
<i>Mise en œuvre de la méthode de vitesse de diffusion</i>	54
3.3.3 Avantages et inconvénients des méthodes Lagrangiennes	58
3.4 Les méthodes Euléro-Lagrangiennes	58
3.4.1 La méthode des caractéristiques (MOC)	58
<i>Forward-tracking</i>	58
<i>Calcul de la dispersion</i>	60
<i>Mise à jour des concentrations des particules</i>	60
<i>Avantages et inconvénients de la MOC</i>	61
3.4.2 La méthode modifiée des caractéristiques (MMOC)	62
<i>Backward-tracking</i>	62
<i>Calcul de la dispersion</i>	63
<i>Avantages et inconvénients de la MMOC</i>	64
3.5 Les méthodes ELLAM	65
3.5.1 Définition des fonctions test	66
3.5.2 Écriture variationnelle	68
3.5.3 Calcul de l'intégrale de masse au pas de temps (n+1)	70
3.5.4 Calcul de l'intégrale d'échange par dispersion	71
3.5.5 Calcul de l'intégrale de masse au pas de temps (n)	71
<i>Approche backward-tracking</i>	72
<i>Approche forward-tracking</i>	73
3.5.6 Calcul de la masse entrante par la frontière	74
<i>Approche backward-tracking</i>	74
<i>Approche forward-tracking</i>	75
3.5.7 Calcul de la masse sortante par la frontière	76
3.5.8 Les problèmes numériques de la méthode ELLAM	78
<i>Les oscillations non physiques</i>	78
<i>La diffusion numérique</i>	80
3.6 Conclusion	81
Chapitre 4	83
<hr/>	
La formulation C_ELLAM pour la modélisation du transport réactif	
4.1 Introduction	84
4.2 La formulation C_ELLAM	85

4.2.1	Le backward-tracking	85
4.2.2	Le forward-tracking	86
4.2.3	Mise à jour des concentrations	87
4.2.4	Le code de calcul	88
4.3	Résolution de l'équation d'advection-dispersion en milieu fortement hétérogène avec la méthode C_ELLAM	89
4.3.1	Introduction	90
4.3.2	The Eulerian–Lagrangian Localized Adjoint Method for ADE	92
4.3.3	Efficiency of the scheme in the case of a complex velocity field	93
	<i>Test problem definition</i>	94
	<i>The advection dominant case</i>	95
	<i>The advection-diffusion case</i>	96
4.3.4	Efficiency of the ELLAM in highly heterogeneous domains including injection and pumping wells	100
4.3.5	Conclusion	102
4.3.6	References	102
4.4	Couplage chimie-transport avec la méthode C_ELLAM	104
4.4.1	Les approches de résolution	104
	<i>Approche par séparation d'opérateurs (OS)</i>	104
	<i>Approche globale (GA)</i>	105
4.4.2	Le couplage C_ELLAM-SNIA	105
4.5	Modélisation du transport multi-espèces en milieux poreux saturés/non saturés avec la méthode C_ELLAM	106
4.5.1	Introduction	108
4.5.2	The Mathematical Model	109
4.5.3	The Numerical Model	110
	<i>The ELLAM Formulation for Transport in the Unsaturated Zone</i>	111
	<i>The Numerical Strategy</i>	112
4.5.4	Numerical Experiments	112
	<i>The Degradation of the Tetrachloroethene PCE</i>	113
	<i>The m-Xylene Degradation in Saturated Flow Regime</i>	114
	<i>The m-Xylene Degradation in Variably Saturated Flow Regime</i>	115
4.5.5	Conclusion	118
4.5.6	References	118
4.6	Conclusion	121

Chapitre 5	123
Estimation de la macrodispersion dans les milieux poreux hétérogènes avec la méthode C_ELLAM	
5.1 Introduction	126
5.2 Mathematical models and numerical methods	127
5.3 Set-up of the numerical experiments	129
5.4 Results and discussion	131
5.5 Concluding remarks	141
5.6 References	142
5.7 Conclusion	146
Conclusion générale et perspectives	147
Bibliographie	149
Liste des figures	161

Introduction générale

Dans le cycle de l'eau, les eaux souterraines jouent un rôle primordial et constituent une réserve d'eau potable non négligeable. La compréhension des différents mécanismes et phénomènes entrant en jeu au niveau des eaux souterraines est donc indispensable pour une meilleure gestion d'une ressource qui a des intérêts socio-économiques importants. La complexité d'accès au milieu souterrain rend parfois difficile voire impossible l'étude in-situ de ces mécanismes et peut engendrer des coûts d'expérimentation très élevés. C'est ainsi que la modélisation apparaît comme un outil intéressant permettant d'évaluer nos connaissances en essayant de reproduire les phénomènes observés et de prévoir le devenir des contaminants dans les sols afin de mieux comprendre les processus mis en jeu.

C'est dans cette optique que nous apportons, dans ce travail, une contribution à quelques méthodes numériques utilisées pour la simulation d'écoulement et de transfert de polluants en milieu poreux saturé/non saturé. Pour ce faire, le modèle doit prendre en compte les processus physiques (advection, dispersion, diffusion moléculaire, filtration, décomposition physique, etc....) à travers les équations de conservation de la masse (équations aux dérivées partielles) ainsi que les processus chimiques ou biologiques (décroissance radioactive, dissolution/précipitation, oxydoréduction, sorption, biodégradation, etc....) par les lois d'action de masse.

La propagation d'un contaminant dans les milieux souterrains dépend en premier lieu des caractéristiques de l'écoulement qui le transporte. Il est donc nécessaire, dans un premier temps, de déterminer de manière précise le champ de vitesse. Les méthodes numériques classiques de type différences finies, éléments finis et volumes finis approchent dans un premier temps la charge et en déduisent ensuite la vitesse par dérivation de cette charge. La méthode des Eléments Finis Mixtes Hybrides (EFMH) permet une approximation simultanée des pressions et du champ de vitesse avec le même ordre de convergence. Par ailleurs, elle est bien adaptée aux équations elliptiques et paraboliques et s'avère très performante pour modéliser des milieux très hétérogènes, discrétisés avec des maillages irréguliers [Mosé *et al.*, 1994 ; Younes, 1998 ; Rees *et al.*, 2004 ; Belfort, 2006]. Cependant, des oscillations non physiques peuvent apparaître lors de la modélisation des fronts raides d'infiltration [Farthing *et al.*, 2003 ; Belfort and Lehmann, 2005].

Le champ de vitesse obtenu par la résolution du problème d'écoulement est ensuite utilisé dans l'équation d'advection-dispersion qui traduit la progression du polluant dans les milieux souterrains. La plupart des modèles existants pour la résolution de cette équation sont basés sur des méthodes eulériennes. Or, il est connu que ces méthodes génèrent souvent des oscillations non physiques et/ou de la diffusion numérique dans les régions où la nature hyperbolique de l'équation devient prépondérante. Afin d'éviter ces problèmes, ces méthodes imposent des contraintes de discrétisation spatiale et temporelle liées au nombre de Peclet de maille (Pe) et au nombre de Courant-Friederichs-Lewy (CFL). Cependant, ces contraintes sont très fortes et induisent souvent des temps de calcul prohibitifs liés à des maillages trop fins et/ou à des pas de temps trop petits.

Pour surmonter ces difficultés, des méthodes euléro-lagrangiennes (ELM) [Konikow and Bredehoeft, 1978 ; Douglas and Russell, 1982] ont vu le jour. Ces méthodes combinent un schéma lagrangien pour la résolution de la partie advection et un schéma eulérien pour la partie dispersion. Le traitement lagrangien du terme d'advection permet ainsi l'utilisation de grands pas de temps. Toutefois, la séparation des opérateurs d'advection et de dispersion engendre, d'une part, des problèmes de conservation de la masse et/ou de la diffusion numérique dus à des interpolations et, d'autre part, ne permet pas un traitement correct des conditions aux limites de type mixte.

La méthode ELLAM (Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method) développée par Celia *et al.* [1990a] constitue une amélioration des méthodes ELM. L'idée de base de cette méthode consiste à choisir des fonctions test qui dépendent à la fois de l'espace et du temps. Contrairement aux autres méthodes euléro-lagrangiennes, la méthode ELLAM est conservative et permet de traiter rigoureusement toutes les conditions aux limites. De plus, elle permet de s'affranchir des conditions de CFL tout en maintenant la stabilité et la précision de la solution [Russell and Celia, 2002 ; Younes and Ackerer, 2005].

Cependant, la résolution de l'opérateur de transport avec l'approche ELLAM standard proposée par Celia *et al.* [1990a] peut parfois présenter (i) des oscillations non-physiques dans le cas des maillages non structurés (milieu hétérogène) et/ou (ii) de la diffusion numérique due aux interpolations lors de l'utilisation de plusieurs pas de temps. Pour pallier ces problèmes, une nouvelle formulation de la méthode ELLAM (C_ELLAM) a été développée par Younes *et al.* [2006a] pour des maillages triangulaires non structurés. Cette dernière permet de surmonter les problèmes numériques rencontrés par la formulation standard. En effet, cette nouvelle approche utilise d'une part (i) des points stratégiques d'intégration en nombre très limité (généralement 1 par élément) permettant à la fois d'éviter les oscillations non physiques et d'améliorer les temps de calcul et d'autre part (ii) des caractéristiques continues le long de la simulation où seules les variations de concentration dues à la dispersion sont interpolées à chaque pas de temps évitant ainsi la diffusion numérique.

Cette thèse s'organise en deux parties. La **première partie** porte sur les différentes méthodes de résolution des problèmes d'écoulement et de transport dans les milieux poreux.

Dans le *premier chapitre*, nous rappelons les notions de base sur les modèles physiques et mathématiques, qui régissent l'écoulement des eaux souterraines et le transport en milieu poreux.

Le *deuxième chapitre* se focalise sur la résolution du problème d'écoulement avec la méthode EFMH. Dans un premier temps, nous motivons notre choix en faveur de cette méthode et nous détaillons sa mise en œuvre. Dans un deuxième temps, nous proposons une procédure de condensation de la masse afin d'éviter les oscillations non physiques lors de la résolution des problèmes d'écoulement en milieu non saturé.

La résolution du problème de transport est abordée dans le *troisième chapitre* avec une synthèse des différentes classes de méthodes utilisées dans la littérature. Une attention particulière est portée sur les méthodes ELM qui sont à l'origine du développement des méthodes ELLAM. Par la suite, une mise en œuvre détaillée de ces méthodes ELLAM est présentée.

La **deuxième partie** de cette thèse se concentre sur la modélisation des problèmes de transport avec la méthode C_ELLAM. Cette nouvelle formulation a été appliquée sur des problèmes de transport simple en milieu homogène [Younes *et al.*, 2006a].

Dans le *quatrième chapitre*, nous utilisons, dans un premier temps, la formulation C_ELLAM pour la résolution du transport dans des milieux fortement hétérogènes. Le code de calcul initial développé par Younes *et al.* [2006a] a été amélioré pour tenir compte de la variation du coefficient de dispersion due à la forte hétérogénéité du domaine lors de l'utilisation de grand pas de temps. De plus, une procédure permettant d'améliorer les temps de calcul pour les maillages fins et/ou avec plusieurs pas de temps a été développée. Dans un deuxième temps, nous développons le couplage du schéma C_ELLAM avec une approche séquentielle non itérative (SNIA) pour la résolution du transport réactif pour des régimes d'écoulement aussi bien saturé que non-saturé.

Le *cinquième chapitre* de cette thèse est consacré à l'utilisation du code de calcul élaboré avec le schéma C_ELLAM pour la détermination des coefficients asymptotiques de dispersion dans les formations géologiques. En effet, le développement d'un code de calcul précis et performant pour la résolution du transport en milieu fortement hétérogène nous permet d'utiliser ce schéma dans la détermination de la macrodispersion qui, basée sur une méthode Monte Carlo, nécessite de réaliser un très grand nombre de simulations pour avoir des résultats fiables [Gelhar and Axness, 1983 ; Dagan, 1989 ; de Dreuzy *et al.*, 2007].

Chapitre 1

Écoulement et transport en milieu poreux : Notions de base

- 1.1 Le milieu poreux**
 - 1.1.1 Définition
 - 1.1.2 La granulométrie
 - 1.1.3 La porosité
 - La porosité totale*
 - La porosité cinématique*
 - 1.1.4 La perméabilité
 - La perméabilité intrinsèque*
 - La perméabilité*
- 1.2 L'hydrodynamique en milieu poreux**
 - 1.2.1 La loi de Darcy
 - 1.2.2 Les relations constitutives
 - 1.2.3 L'équation de continuité
 - 1.2.4 L'équation de l'hydrodynamique
 - 1.2.5 Les conditions initiales et conditions aux limites
- 1.3 Le transport en milieu poreux**
 - 1.3.1 L'advection
 - 1.3.2 La diffusion moléculaire
 - 1.3.3 La dispersion cinématique
 - 1.3.4 La dispersion
 - 1.3.5 L'équation d'advection-dispersion
 - 1.3.6 L'équation d'advection-dispersion-réaction
- 1.4 Couplage écoulement-transport**
- 1.5 Conclusion**

Dans ce premier chapitre, nous présentons brièvement quelques notions fondamentales liées à la description d'un milieu poreux. L'objectif est ici de rappeler l'origine physique des équations aux dérivées partielles (EDP) que nous allons traiter dans la suite de ce travail. Ces équations se réfèrent à l'hydrodynamique et au transfert de masse en milieu poreux. L'hydrodynamique des écoulements en milieu poreux est décrite par un système d'équations composé de la loi de Darcy et de l'équation de continuité. Le transport linéaire de masse qui est associé au mouvement de l'eau est un processus relativement complexe. Il peut être décrit par l'équation d'advection-dispersion.

1.1 Le milieu poreux

1.1.1 Définition

Un milieu poreux désigne l'ensemble des matériaux formés d'une phase solide et d'un espace libre nommé « espace poreux ». Ces deux phases du milieu poreux interagissent et donnent lieu à de nombreux phénomènes physiques (écoulement de fluide, propagation d'ondes...). Le sol peut-être assimilé à un milieu poreux formé par des agrégats solides (particules minérales, éléments organiques) entre lesquels ils existent des espaces vides pouvant être remplis de gaz ou de liquides. Le milieu poreux est dit saturé en eau si les pores sont exclusivement remplis d'eau. Si une phase gazeuse y est également présente, le milieu est dit non saturé en eau.

On caractérise généralement le milieu poreux par sa granulométrie, sa porosité et sa perméabilité.

1.1.2 La granulométrie

Les premières informations sur les propriétés d'un milieu poreux sont fournies par l'analyse granulométrique. Elle consiste à la détermination de la distribution de la taille des particules du sol. On obtient ainsi une courbe granulométrique représentant le pourcentage des éléments dont le diamètre est inférieur ou égal à un diamètre donné. L'analyse de cette courbe fournit alors des informations sur la perméabilité ainsi que sur l'homogénéité du milieu poreux.

1.1.3 La porosité

La porosité totale

La *porosité totale* n [-] d'un milieu poreux représente la densité des pores pouvant être occupée par un fluide liquide ou gazeux. Elle est exprimée par le rapport entre le volume des espaces vides et le volume total du milieu poreux :

$$n = \frac{\text{Volume des vides}}{\text{Volume total}} \quad (1.1)$$

La porosité cinématique

Une partie de l'eau contenue dans le milieu poreux est liée à celui-ci et ne peut pas circuler. La *porosité cinématique* n_c [-] est définie comme étant le rapport du volume des vides occupés par le fluide mobile sur le volume total du milieu poreux. :

$$n_c = \frac{\text{Volume d'eau qui peut circuler}}{\text{Volume total}} \quad (1.2)$$

1.1.4 La perméabilité

La perméabilité intrinsèque

La *perméabilité intrinsèque* k $[L^2]$ est la propriété d'un corps poreux de se laisser traverser par un fluide. Cette constante caractéristique d'un milieu poreux est liée à la forme des grains et à la porosité cinématique. Elle est donc indépendante des caractéristiques du fluide et ne dépend que de la structure et de la connectivité des pores.

La perméabilité

La *perméabilité* ou conductivité hydraulique K $[L.T^{-1}]$ est le paramètre reliant la vitesse d'écoulement au gradient hydraulique dans la loi de Darcy (1.5). Elle caractérise l'aptitude du milieu à se laisser traverser par un fluide sous l'effet d'un gradient de charge. Elle varie en fonction du milieu poreux considéré et dépend de la perméabilité intrinsèque k , de la viscosité dynamique μ $[M.L^{-1}.T^{-1}]$ et de la masse volumique ρ $[M.L^{-3}]$ du fluide qui y circule.

Le coefficient de perméabilité K et la perméabilité intrinsèque k sont des coefficients scalaires si le milieu poreux est isotrope ou bien si l'écoulement est unidirectionnel. Dans le cas d'un milieu tridimensionnel et anisotrope, le coefficient de conductivité hydraulique est défini par un tenseur symétrique de la forme :

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{bmatrix} \quad (1.3)$$

avec $K_{ij} = \frac{k_{ij}\rho g}{\mu}$;

où g est l'accélération de la pesanteur $[L.T^{-2}]$.

1.2 L'hydrodynamique en milieu poreux

L'équation générale des écoulements en milieux poreux variablement saturés (présence de zones saturées et non saturées en eau) est déduite de la loi de Darcy et du principe de conservation de masse (ou équation de continuité).

1.2.1 La loi de Darcy

C'est en 1856 que Darcy a établi une loi empirique selon laquelle le débit Q $[L^3.T^{-1}]$ traversant un milieu poreux est proportionnel à la section de passage S $[L^2]$, à la

différence de charge $\Delta H = H_1 - H_2$ [L] et inversement proportionnel à la distance L [L] séparant les points de charge H_1 et H_2 . Pour un écoulement unidirectionnel avec un fluide homogène incompressible dans un milieu poreux saturé ayant une conductivité hydraulique K [L.T⁻¹], la loi de Darcy peut s'écrire :

$$\frac{Q}{S} = K \frac{H_1 - H_2}{L} \quad (1.4)$$

La vitesse de Darcy ou vitesse de filtration peut alors s'exprimer en fonction du gradient de pression et de la gravité [Bear, 1979] :

$$\mathbf{q} = -\frac{\mathbf{k}}{\mu} (\nabla p + \rho g \nabla z) \quad (1.5)$$

où \mathbf{q} : le vecteur vitesse de Darcy [L.T⁻¹] ;

\mathbf{k} : le tenseur de perméabilité intrinsèque du milieu [L²] ;

p : la pression [M.L⁻¹.T⁻²] ;

z : la cote définie selon un axe vertical ascendant [L].

La vitesse réelle \mathbf{V} [L.T⁻¹] du fluide est obtenue à partir de la vitesse de filtration \mathbf{q} par la relation :

$$\mathbf{V} = \frac{\mathbf{q}}{n_c} \quad (1.6)$$

Lorsque la masse volumique est constante, l'équation (1.5) se ramène à la loi empirique établie par Darcy [1856] :

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K} \nabla H \quad (1.7)$$

où $H = \frac{p}{\rho g} + z = h + z$: la charge hydraulique [L] ;

$\mathbf{K} = \frac{\mathbf{k} \rho g}{\mu}$: le tenseur de conductivité hydraulique [L.T⁻¹].

Dans le cas des écoulements en régime non saturé, la conductivité hydraulique varie en fonction de la teneur en eau θ [-] ou de la pression h [L]. L'équation de Darcy prend alors la forme généralisée (Darcy-Buckingham):

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}(h) \nabla (h + z) \text{ ou } \mathbf{q} = -\mathbf{K}(\theta) \nabla (h(\theta) + z) \quad (1.8)$$

Il existe des relations qui relient la conductivité hydraulique à la pression ou à la teneur en eau et qui dépendent du sol considéré. En général, la diminution de la teneur en eau entraîne une baisse générale de la conductivité hydraulique.

1.2.2 Les relations constitutives

La loi de Darcy, modifiée par Buckingham (1.8), tient compte de l'interdépendance entre les variables d'état h et θ et de leur influence sur la conductivité hydraulique (ou perméabilité). Différents modèles (Brooks-Corey, Brutsaert, van Genuchten,...) ont été proposés dans la littérature pour décrire la courbe de rétention d'eau. Cette courbe traduit la relation entre h et θ , et l'évolution de la conductivité hydraulique $K(h)$. Le modèle de van Genuchten, modifié récemment par l'introduction d'une pression d'entrée d'air pour améliorer son efficacité à proximité de la saturation [Vogel et al., 2001 ; Ippisch et al., 2006], compte parmi les plus utilisés par les modélisateurs.

La saturation effective S_e [-], qui relie h et θ , peut-être définie par l'équation suivante [van Genuchten, 1980] :

$$S_e(h) = \frac{\theta(h) - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \begin{cases} \frac{1}{\left(1 + |\alpha h|^n\right)^{(1-1/n)}} & h < h_e \\ 1 & h \geq h_e \end{cases} \quad (1.9)$$

où θ_s [-] représente la teneur en eau à saturation, θ_r [-] la teneur en eau résiduelle, α [L⁻¹] un paramètre de forme lié à la taille moyenne des pores, n [-] un paramètre lié à la distribution des tailles de pores et h_e [L] la pression d'entrée d'air.

La conductivité hydraulique est caractérisée par la relation :

$$K(S_e) = \begin{cases} K_s S_e^{1/2} \left[\frac{1 - \left[1 - (S_E^* S_e)^{1/m}\right]^m}{1 - \left(1 + S_E^{*1/m}\right)^m} \right]^2 & , S_e < S_E^* \\ K_s & , S_e \geq S_E^* \end{cases} \quad (1.10)$$

où K_s [L.T⁻¹] est la conductivité à la saturation ;

$S_E^* = \left[1 + (\alpha h_e)^n\right]^{-m}$ est la saturation effective à la pression h_e ;

$m = 1 - 1/n$.

1.2.3 L'équation de continuité

Cette équation exprime le principe de conservation de la masse. Pour un régime d'écoulement non saturé, elle s'écrit sous la forme :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = f_{ps} \quad (1.11)$$

où f_{ps} représente le terme puits/source $[\text{T}^{-1}]$.

En régime permanent, la charge et la teneur en eau sont constantes et l'équation (1.11) prend alors la forme suivante :

$$\nabla \cdot \mathbf{q} = f_{ps} \quad (1.12)$$

1.2.4 L'équation de l'hydrodynamique

Pour un fluide incompressible, de masse volumique et de viscosité dynamique constantes, l'équation de l'hydrodynamique est obtenue en associant la loi de Darcy (1.8) à l'équation de continuité (1.11) :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla \cdot (-\mathbf{K}(\theta) \nabla H) = f_{ps} \quad (1.13)$$

où $H(\theta) = h(\theta) + z$, si on considère θ comme variable principale.

Dans le cas où h est la variable principale, on peut écrire :

$$c(h) \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot (-\mathbf{K}(h) \nabla H) = f_{ps} \quad (1.14)$$

avec $c(h) = \frac{\partial \theta}{\partial h}$ la capacité capillaire $[\text{L}^{-1}]$.

Les équations (1.13) et (1.14) constituent les deux formes de l'équation de Richards qui est une EDP parabolique non linéaire. En régime permanent, ces équations se réduisent à l'équation elliptique suivante :

$$\nabla \cdot (-\mathbf{K} \nabla H) = f_{ps} \quad (1.15)$$

D'une manière plus générale et en tenant compte de la compressibilité du milieu, l'équation de Richards décrivant les écoulements en milieux poreux saturés et non saturés s'écrit :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + S_s S_w(\theta) \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot (-\mathbf{K}(h) \nabla H) = f_{ps} \quad (1.16)$$

où S_s est le coefficient d'emmagasinement spécifique [L^{-1}] ;
 S_w est la saturation relative de la phase liquide [-].

1.2.5 Les conditions initiales et conditions aux limites

En plus de l'équation de continuité (1.11) et la loi de Darcy (1.8) qui décrivent l'écoulement d'un fluide dans un milieu poreux, il faut spécifier les paramètres du sol ainsi que les données qui expriment l'état initial ($t = 0$) et les conditions imposées aux limites du domaine d'étude.

Les conditions aux limites peuvent être de trois types :

- conditions de Dirichlet où la charge est imposée ;
- conditions de Neumann où le flux est imposé ;
- conditions de Cauchy ou conditions mixtes lorsque le flux est imposé en fonction de la charge.

1.3 Le transport en milieux poreux

Lors de son déplacement dans les réseaux poreux du sol, l'eau peut, entre autres, entraîner des éléments sous forme dissoutes. Plusieurs phénomènes physiques et chimiques peuvent intervenir dans le transport de ces solutés. Dans cette première partie, nous considérons le cas d'un soluté inerte (ou non réactif) où seuls les processus physiques sont pris en compte.

Les mécanismes physiques qui régissent le transfert d'un traceur en milieu poreux sont l'advection, la diffusion moléculaire et la dispersion cinématique.

1.3.1 L'advection

L'advection (ou encore la convection) correspond à la migration des solutés lors du déplacement de l'eau dans le milieu poreux. C'est le phénomène par lequel le contaminant se déplace avec le mouvement de l'eau qui est régi par la loi de Darcy. Le déplacement moyen du contaminant par advection est directement proportionnel à la vitesse moyenne d'écoulement de l'eau. Lorsque le soluté ne réagit pas avec le milieu, la vitesse de transfert du soluté est donc celle du fluide qui se déplace. L'advection est décrite par l'équation hyperbolique suivante :

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q}C) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t \in [0, T] \quad (1.17)$$

où $C(\mathbf{x}, t)$ [$M.L^{-3}$] est la concentration au point \mathbf{x} du domaine d'étude Ω à l'instant t et T [T] la durée simulée.

1.3.2 La diffusion moléculaire

La diffusion moléculaire est un phénomène indépendant de la vitesse du fluide car elle se produit même en l'absence d'écoulement. Elle est liée à l'existence de gradient de concentration dans le fluide et provient de l'agitation des molécules qui tend à homogénéiser la concentration du soluté dans le milieu (migration des molécules des zones à fortes concentrations vers celles à faibles concentrations).

Le flux massique de soluté transporté uniquement par diffusion est calculé selon une loi de Fick :

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{D}_m \nabla C) = 0 \quad (1.18)$$

où \mathbf{D}_m [$L^2.T^{-1}$] est le tenseur diagonal de diffusion moléculaire dans le milieu poreux.

1.3.3 La dispersion cinématique

Selon de Marsily [1981], la dispersion cinématique est « un phénomène de mélange essentiellement lié à l'hétérogénéité des vitesses microscopiques, quelle qu'en soit l'échelle d'observation, au sein d'un milieu poreux ». Du fait de la microstructure du milieu poreux, la vitesse du fluide varie en magnitude et en direction. Cette variation des vitesses entraîne une dilution du soluté, appelée *dispersion cinématique*. Ce phénomène s'explique principalement par :

- des profils paraboliques des vitesses à l'intérieur des pores, nulles sur les parois et maximales au centre des capillaires ;
- des dimensions variables des pores ayant pour conséquence une variation des vitesses d'un pore à l'autre et même au sein d'un même pore ;
- un cheminement localement différent qui peut-être plus ou moins long par rapport à la direction principale de l'écoulement.

En fonction de la direction principale de l'écoulement, on peut distinguer :

- la dispersion longitudinale qui a lieu suivant la direction principale de l'écoulement ;
- la dispersion transversale qui se déroule suivant le plan orthogonal à la direction de l'écoulement.

L'équation de transport par dispersion est donnée par :

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{D}_c \nabla C) = 0 \quad (1.19)$$

où \mathbf{D}_c [$L^2.T^{-1}$] est le tenseur de dispersion cinématique.

1.3.4 La dispersion

La dispersion résulte de l'action combinée de ces deux phénomènes généralement indissociables : la dispersion cinématique et la diffusion moléculaire. L'équation de transport par dispersion-diffusion se rapproche alors d'une équation de type parabolique et est donnée par :

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla C) = 0 \quad (1.20)$$

où $\mathbf{D} = \mathbf{D}_c + \mathbf{D}_m$ est le tenseur de dispersion dont les éléments ont pour expression générale :

$$D_{ij} = (\alpha_T |\mathbf{q}| + D_m) \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{q_i q_j}{|\mathbf{q}|} \quad i, j = 1, 2 \quad (1.21)$$

où :

- δ_{ij} : le symbole de Kronecker ;
- α_L : la dispersivité longitudinale [L] ;
- α_T : la dispersivité transversale [L] ;
- D_m : le coefficient de diffusion moléculaire [L².T⁻¹] ;
- q_i et q_j : les composantes de la vitesse de Darcy \mathbf{q} [L.T⁻¹].

1.3.5 L'équation d'advection-dispersion

Le modèle mathématique décrivant le transport d'un soluté conservatif, c'est-à-dire sans interaction avec la matrice solide ni dégradation, est donné par l'équation d'advection-dispersion (1.22). Cette équation intègre les phénomènes d'advection, de diffusion moléculaire et de dispersion cinématique :

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{q} C) - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla C) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t \in [0, T] \quad (1.22)$$

Les conditions aux limites associées sont soit :

- de type Dirichlet (concentration imposée) ;
- de type Neumann (gradient de concentration imposé) ;
- de type Cauchy (flux lié à la concentration).

Les concentrations initiales $C_0(\mathbf{x}, 0)$ sont connues sur tout le domaine Ω .

1.3.6 L'équation d'advection-dispersion-réaction

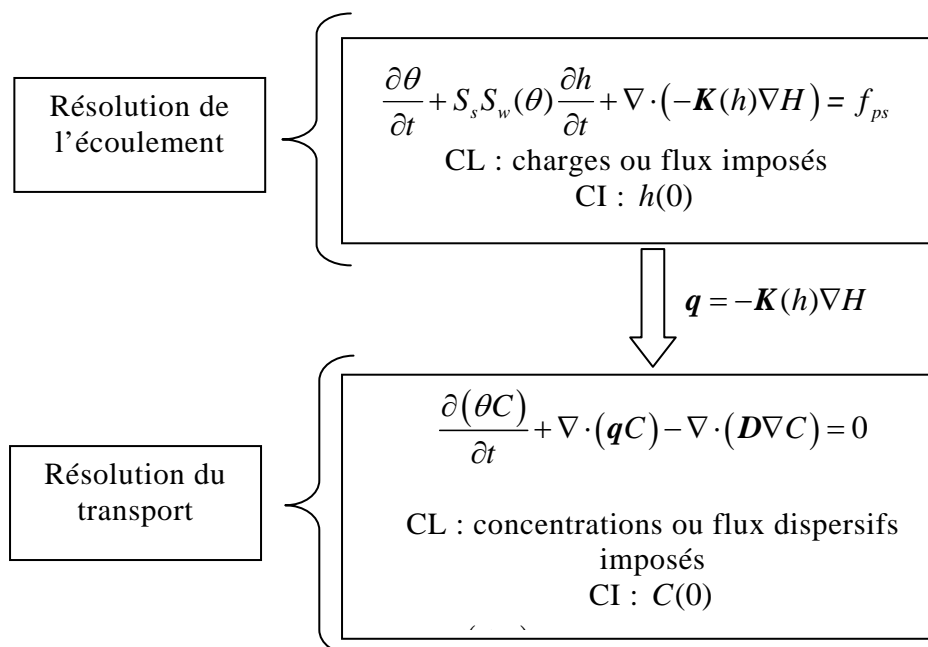
Pour les problèmes de transport réactif, l'équation (1.22) est modifiée en rajoutant un opérateur de chimie $R(C)$ pouvant inclure des processus biologiques, chimiques ou radioactifs :

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + L(C) + R(C) = 0 \quad (1.23)$$

où $L(C)$ est l'opérateur de transport rassemblant les phénomènes d'advection et de dispersion.

1.4 Couplage écoulement-transport

Le couplage des équations d'écoulement et de transport est relativement simple lorsque la présence du soluté n'affecte pas le déplacement du fluide. Afin de résoudre le problème de transport, il est d'abord nécessaire de connaître les vitesses obtenues par la résolution du problème d'écoulement. Pour chaque instant t de la discrétisation temporelle, la vitesse de l'écoulement est approchée en résolvant la loi de Darcy (1.8) et l'équation de continuité (1.11) indépendamment du problème de transport (1.22). La vitesse, ainsi déterminée, est, par la suite, utilisée pour simuler le transfert de polluant aux mêmes instants t .



Dans ce travail, nous nous intéressons uniquement à des problèmes où les processus physiques et chimiques du transport n'affectent pas l'hydrodynamique. Le champ de vitesse obtenu par la résolution de l'écoulement reste inchangé sur l'intervalle de temps

considéré pour la résolution du transport et ceci aussi bien en régime permanent qu'en régime transitoire.

1.5 Conclusion

Nous avons présenté, dans ce chapitre, les équations de l'hydrodynamique et du transport dans les milieux poreux saturés et non saturés. Il s'agit d'un système d'EDP pouvant être de type hyperbolique, parabolique ou elliptique. Sauf cas simples souvent éloignés des réalités du terrain, ce système n'admet pas de solution analytique. Les méthodes d'approximation numérique sont alors des outils indispensables à la résolution de ces types de problèmes.

Dans le chapitre suivant, nous développons la méthode des éléments finis mixtes hybrides pour la résolution des équations décrivant les écoulements d'eau souterraine en milieu poreux.

Chapitre 2

Résolution de l'écoulement en milieux poreux variablement saturés avec les EFMH

2.1 Introduction

2.2. La méthode des éléments finis mixtes hybrides

2.2.1. Définition

2.2.2. Mise en œuvre des EFMH

Discrétisation de la loi de Darcy

Discrétisation de l'équation de Richards

Système à résoudre

Le code de calcul

2.3 Optimisation de la méthode des éléments finis mixtes hybrides pour la modélisation des écoulements variablement saturés

2.3.1 Variably Saturated Flow Modeling

2.3.2 Numerical Approaches for Solving the Richards Equation

The Standard Mixed Hybrid Finite Element Method

The Lumped Mixed Hybrid Finite Element Method

2.3.3 Results and Discussion

One-Dimensional Infiltration under a Constant-Head Boundary Condition

A Two-Dimensional Infiltration into Initially Dry Soil

A Technique for Improving the Monotonicity with Quadrangular Elements

2.3.4 Summary and Conclusions

2.3.5 Appendix

2.3.6 References

2.4 Conclusion

Le but de ce chapitre est d'expliquer dans un premier temps notre choix quant à l'adoption de la méthode des EFMH pour la résolution de l'hydrodynamique. Nous détaillons, dans un deuxième temps, la mise en œuvre du schéma des EFMH et, par la suite, nous proposons une amélioration de la résolution des problèmes d'écoulement en milieu poreux non saturé par une procédure de condensation de la masse.

2.1 Introduction

Généralement, les méthodes eulériennes sont le plus couramment utilisées pour la résolution du problème d'écoulement. Parmi les plus connues, nous citons les

Volumes Finis (VF), les Différences Finies (DF) et les Eléments Finis (EF). Nous distinguons ensuite pour chacune de ces méthodes un ensemble de sous-classes et de mises en œuvre alternatives. Des études détaillées sur l'application des techniques classiques de résolution à des problèmes d'hydrogéologie sont présentées par *Remson et al.* [1971] et *Wang and Anderson* [1982]. Chacune de ces méthodes a ses propres avantages et ses inconvénients.

Pour permettre la résolution des problèmes de transport en milieu fortement hétérogène (cf. chapitre 4), plusieurs propriétés sur la méthode de résolution de l'écoulement sont souhaitables :

- la connaissance précise du champ de vitesse ;
- la continuité des flux entre les éléments du maillage ;
- la résolution sur des maillages tenant compte des hétérogénéités (maillages triangulaires non structurés) ;
- la prise en compte de l'anisotropie du milieu (tenseur de conductivité hydraulique plein).

Les méthodes des DF et des VF permettent le calcul d'une charge moyenne par maille. Elles donnent un bilan de masse exact au niveau de chaque élément. La discrétisation de l'équation régissant l'écoulement par les DF est facile à mettre en œuvre mais ne peut être appliquée que sur des maillages rectangulaires (2D) ou cubiques (3D). De même, la méthode des VF sur un maillage triangulaire nécessite des triangles vérifiant le critère de Delaunay. Ce critère est difficilement vérifié dans le cas des tétraèdres (3D). Par ailleurs, les approches DF et VF ne sont pas adaptées à la résolution des problèmes où la conductivité hydraulique \mathbf{K} est représentée par un tenseur plein discontinu en espace.

La méthode des EF consiste à approcher la charge hydraulique par des polynômes de degré $k \geq 1$. Contrairement aux DF et VF, la méthode des EF permet la discrétisation de domaines à géométrie complexe. De plus, cette approche traite rigoureusement les cas où le tenseur de conductivité hydraulique \mathbf{K} est plein. Cependant, les flux ne sont pas définis d'une manière unique entre deux éléments adjacents. Ces discontinuités posent des problèmes pour tracer les lignes de courant ou lors de la simulation du transport.

Avec les méthodes VF, DF et EF, le champ de vitesse se calcule en post-traitement par différenciation de la charge hydraulique. Le calcul de la vitesse à partir de celle-ci peut générer des erreurs supplémentaires notamment lorsque le gradient de la charge est faible. C'est pour permettre un calcul direct et plus précis des flux qu'une formulation mixte a été développée.

2.2 La méthode des éléments finis mixtes hybrides

2.2.1 Définition

L'idée de base des méthodes mixtes est d'approcher simultanément la charge hydraulique H et la vitesse de l'écoulement \mathbf{q} . Cette approche a été employée pour

la première fois pour des écoulements potentiels par *Meissner* [1973]. Les travaux de *Raviart and Thomas* [1977] constituent la principale base mathématique de la mise en œuvre des Eléments Finis Mixtes (EFM).

La méthode des EFM assure un bilan de masse exact au niveau de chaque élément et les ordres de précision pour la charge H et la vitesse \mathbf{q} sont les mêmes. En outre, elle est bien adaptée aux équations elliptiques et paraboliques et s'avère très performante pour modéliser des milieux très hétérogènes, discrétisés avec des maillages irréguliers.

Avec les EFM de plus bas degré, la vitesse \mathbf{q}_E varie linéairement à l'intérieur de chaque élément E du maillage :

$$\mathbf{q}_E = \sum_{i=1}^{nf} Q_{E,i} \boldsymbol{\omega}_{E,i} \quad (2.1)$$

où $Q_{E,i}$ est le flux sur la facette i de l'élément E ;

nf désigne le nombre de facettes de l'élément E .

$\boldsymbol{\omega}_{E,i}$ sont les fonctions vectorielles d'interpolation de l'espace de Raviart-Thomas d'ordre zéro (RT_0) définies par facette et par élément (figure-1).

$$\boldsymbol{\omega}_{E,i} = \begin{cases} \boldsymbol{\omega}_{E,i} & \text{sur } E \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (2.2)$$

Ainsi, la connaissance des flux sur les facettes de l'élément E permet de déterminer la vitesse en tout point de cet élément.

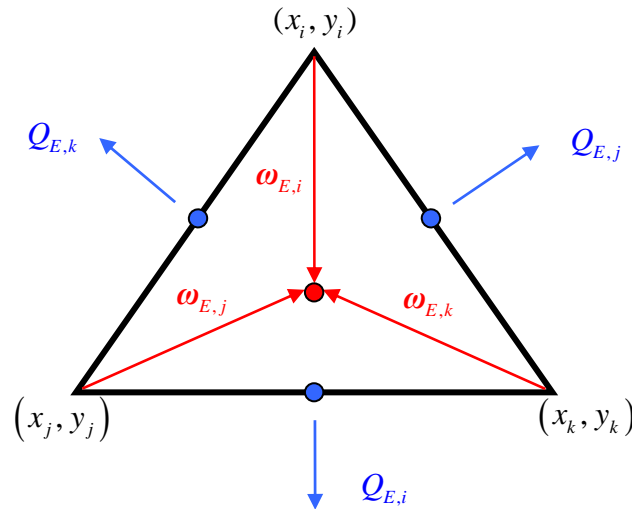


Figure-1. Les fonctions d'interpolation (RT_0) dans le cas des triangles.

La méthode des EFM associée à un espace de Raviart-Thomas d'ordre zéro (RT_0) aboutit à un système d'équations dont les inconnues sont les charges moyennes par maille et les flux à travers les facettes. Cependant, cette méthode présente une difficulté numérique liée à une matrice symétrique et non définie positive associée au système linéaire à résoudre.

La formulation mixte hybride [Arnold and Brezzi, 1985 ; Chavent and Jaffré, 1986] permet de supprimer cet inconvénient en choisissant comme inconnues du système les multiplicateurs de Lagrange qui correspondent à la charge moyenne par facette. Ces inconnues servent à imposer la continuité des flux entre les éléments du maillage. La méthode EFMH permet ainsi de réduire le problème à la résolution d'un système linéaire dont la matrice associée est symétrique et définie positive.

Les EFM ont été comparés aux méthodes numériques classiques. D'un point de vue numérique, Ackerer *et al.* [1990] et Mosé [1990] ont montré que le champ de vitesse obtenu par les EFM dans le cas d'un pompage dans un milieu homogène est plus précis que celui obtenu avec les DF. Kaaschieter [1990] et Mosé *et al.* [1994] ont montré que la méthode des EFMH était plus robuste que la méthode des EF.

Malgré ces avantages, la solution obtenue par la méthode EFM n'est pas inconditionnellement stable lors de l'utilisation de petits pas de temps en régime transitoire. En effet, même si le système linéaire obtenu possède une matrice symétrique définie positive, celle-ci n'est pas, en général, une M-matrice. Une M-matrice est une matrice non singulière dont les éléments diagonaux sont positifs ($m_{ii} > 0$) et les éléments hors-diagonaux négatifs ou nuls ($m_{ij} \leq 0$). La propriété M-matrice est très importante en physique car elle garantit le principe du maximum discret, *i.e.*, dans un domaine sans termes puits/source, il ne peut y avoir d'extremum locaux dans la solution obtenue. Cette propriété permet d'obtenir des résultats en adéquation avec la physique (sans oscillations numériques).

Pour les équations elliptiques, Brezzi and Fortin [1991] ont montré que les maillages triangulaires composés d'éléments dont les angles sont inférieures à $\pi/2$ conduisent à une M-Matrice. Younes *et al.* [2006b] ont proposé une procédure de condensation de la masse permettant d'obtenir une M-Matrice, pour des problèmes elliptiques en régime transitoire indépendamment du maillage utilisé.

Les oscillations non physiques peuvent être plus importantes lors de la modélisation des écoulements en milieux poreux variablement saturés notamment pour des problèmes d'infiltration d'eau dans des sols initialement secs. Dans la suite de ce travail, nous allons mettre en œuvre cette procédure de condensation de la masse pour la résolution de l'équation de Richards.

2.2.2 Mise en œuvre des EFMH

L'écoulement dans les milieux poreux est régi par la combinaison de la loi de Darcy généralisée et l'équation de continuité :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial \theta}{\partial t} + S_s S_w(\theta) \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = f_{ps} & \text{sur } \Omega \times (0, T), \\ \mathbf{q} = -\mathbf{K}(h) \nabla H & \text{sur } \Omega \times (0, T), \\ H = H_0 & \text{sur } \Omega, \\ H = H_D & \text{sur } \partial\Omega_D \times (0, T), \\ \mathbf{q} = \mathbf{q}_N & \text{sur } \partial\Omega_N \times (0, T). \end{array} \right. \quad (2.3)$$

où Ω est le domaine d'étude, T la durée simulée et H_0 la distribution de la charge initiale dans le domaine à $t=0$. H_D et q_N décrivent les conditions aux limites de type Dirichlet sur $\partial\Omega_D$ et Neumann sur $\partial\Omega_N$.

La solution H du problème (2.3) est approchée sur l'élément E par les quantités suivantes :

- H_E (resp. θ_E) : la valeur moyenne de H (resp. θ) sur E ;
- $TH_{E,i}$ (resp. $T\theta_{E,i}$) : la valeur moyenne de H (resp. θ) sur l'arête(2D)/facette(3D) i de l'élément E ;
- $q_E \in (RT_0)$ l'approximation de $q = -K(h)\nabla H$.

Discrétisation de la loi de Darcy

On rappelle que la charge s'exprime par la relation $H = h + z$, avec z la cote (orienté du bas vers le haut) et h la pression d'eau. On a la relation :

$$q = -K\nabla H \quad (2.4)$$

avec $K = K(h)$.

On peut réécrire l'équation (2.4) en inversant le tenseur de perméabilité supposé inversible :

$$K^{-1}q = -\nabla H \quad (2.5)$$

L'écriture variationnelle s'obtient en intégrant l'équation (2.5) sur tout le domaine Ω :

$$\int_{\Omega} K^{-1}q\omega_i dS = \int_{\Omega} -\nabla H\omega_i dS \quad (2.6)$$

Par définition des fonctions ω_i sur un élément E ($\omega_i = \omega_{E,i}$ sur E), cette équation devient :

$$\int_E K_E^{-1}q_E\omega_{E,i} dS = \int_E -\nabla H_E\omega_{E,i} dS \quad (2.7)$$

En utilisant la relation (2.1), le terme de gauche peut s'écrire :

$$\int_E K_E^{-1}q_E\omega_{E,i} dS = \int_E K_E^{-1} \left(\sum_{j=1}^{nf} Q_{E,j}\omega_{E,j} \right) \omega_{E,i} dS \quad (2.8)$$

ou encore se mettre sous la forme :

$$\int_E K_E^{-1}q_E\omega_{E,i} dS = \sum_{j=1}^{nf} Q_{E,j} \int_E \omega_{E,i} K_E^{-1}\omega_{E,j} dS \quad (2.9)$$

En posant $M_{E,ij} = \int_E \boldsymbol{\omega}_{E,i} \mathbf{K}_E^{-1} \boldsymbol{\omega}_{E,j} dS$, la matrice locale associée à l'élément E , pour la facette i , le terme du premier membre devient :

$$\int_E \mathbf{K}_E^{-1} \mathbf{q}_E \boldsymbol{\omega}_{E,i} dS = \sum_{j=1}^{\text{nf}} M_{E,ij} Q_{E,j} \quad (2.10)$$

En appliquant la formule de Green au membre de droite de l'équation (2.6) sur un élément E du domaine Ω , on obtient :

$$\begin{aligned} \int_E -\nabla H_E \boldsymbol{\omega}_{E,i} dS &= \int_E H_E \nabla \cdot \boldsymbol{\omega}_{E,i} dS - \int_{\partial E} H_E \boldsymbol{\omega}_{E,i} \cdot \mathbf{n}_{\partial E} dl \\ &= \int_E H_E \nabla \cdot \boldsymbol{\omega}_{E,i} dS - \sum_{j=1}^{\text{nf}} \int_{E_j} H_E \boldsymbol{\omega}_{E,i} \cdot \mathbf{n}_{E_j} dl \\ &= H_E \int_E \nabla \cdot \boldsymbol{\omega}_{E,i} dS - \sum_{j=1}^{\text{nf}} TH_{E,j} \int_{E_j} \boldsymbol{\omega}_{E,i} \cdot \mathbf{n}_{E_j} dl \\ &= H_E - TH_{E,i} \end{aligned} \quad (2.11)$$

où \mathbf{n}_{E_j} est le vecteur normal à la facette j de l'élément E .

En combinant les relations (2.10) et (2.11), on obtient :

$$\sum_{j=1}^{\text{nf}} M_{E,ij} Q_{E,j} = H_E - TH_{E,i} \quad (2.12)$$

La matrice $M_{E,ij}$ étant inversible, les flux sortant de l'élément E s'expriment alors :

$$Q_{E,i} = \alpha_{E,i} H_E - \sum_{j=1}^{\text{nf}} M_{E,ij}^{-1} TH_{E,j} \quad (2.13)$$

avec $\alpha_{E,i} = \sum_{j=1}^{\text{nf}} M_{E,ij}^{-1}$.

Discrétisation de l'équation de Richards

Comme $H = h + z$, alors $\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}$. La formulation mixte de l'équation de Richards est alors intégrée sur chaque élément E telle que :

$$\int_E \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} + S_s S_w(\theta) \frac{\partial H}{\partial t} \right) dS + \int_E \nabla \cdot \mathbf{q} dS = \int_E f_{ps} dS \quad (2.14)$$

En choisissant une discrétisation de premier ordre en temps, on a :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\theta_E^{n+1} - \theta_E^n}{\Delta t^n} \text{ et } \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{H_E^{n+1} - H_E^n}{\Delta t^n} \quad (2.15)$$

où $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$ est le pas de temps.

D'autre part, l'approximation du flux par les fonctions de base $\omega_{E,i}$ de l'espace de Raviart-Thomas d'ordre zéro (RT_0) selon l'équation (2.1) nous donne :

$$\int_E \nabla \cdot \mathbf{q} dS = \sum_{i=1}^{nf} Q_{E,i} \int_E \nabla \cdot \omega_{E,i} dS = \sum_{i=1}^{nf} Q_{E,i} \quad (2.16)$$

$$\text{car } \int_E \nabla \cdot \omega_{E,i} dS = 1.$$

La discrétisation implicite de l'équation (2.14) nous donne alors :

$$|E| \left(\frac{\theta_E^{n+1} - \theta_E^n}{\Delta t^n} + S_{s,E} S_{w,E}^{n+1} \frac{H_E^{n+1} - H_E^n}{\Delta t^n} \right) + \sum_{i=1}^{nf} Q_{E,i}^{n+1} = |E| f_{ps,E}^{n+1} \quad (2.17)$$

où $|E|$ représente la surface de l'élément E .

Systeme à résoudre

L'équation discrétisée du problème d'écoulement s'obtient en combinant les relations (2.13) et (2.17) :

$$|E| \left(\frac{\theta_E^{n+1} - \theta_E^n}{\Delta t^n} + S_{s,E} S_{w,E}^{n+1} \frac{H_E^{n+1} - H_E^n}{\Delta t^n} \right) + \sum_{i=1}^{nf} \left(\alpha_{E,i} H_E^{n+1} - \sum_{j=1}^{nf} M_{E,ij}^{-1} T H_{E,j}^{n+1} \right) = |E| f_{ps,E}^{n+1} \quad (2.18)$$

En raison des non-linéarités importantes entre h , θ et K , la résolution du système (2.18) nécessite l'emploi d'une méthode itérative de linéarisation. Dans ce développement, nous retenons la méthode de Picard qui est facile à mettre en œuvre et adaptée à notre problème.

La teneur en eau est ainsi approchée par un développement de Taylor à l'ordre 1 en fonction de la charge [Celia et al., 1990b] :

$$\theta_E^{n+1,k+1} \approx \theta_E^{n+1,k} + C_E^{n+1,k} (H_E^{n+1,k+1} - H_E^{n+1,k}) \quad (2.19)$$

où C_E correspond à la capacité capillaire et k l'indice d'itérations.

Ainsi, en introduisant la relation (2.19) dans l'équation (2.18), le système final devient :

$$\beta_E^{n+1,k} H_E^{n+1,k+1} + D_E^{n+1,k} - \sum_{i=1}^{nf} (\alpha_{E,i}^{n+1,k} TH_{E,i}^{n+1,k+1}) = |E| f_{ps,E}^{n+1} \quad (2.20)$$

avec

$$\beta_E^{n+1,k} = \frac{|E|}{\Delta t^n} (C_E^{n+1,k} + S_{s,E} S_{w,E}^{n+1,k}) + \sum_{i=1}^{nf} \alpha_{E,i}^{n+1,k} \quad (2.21)$$

$$D_E^{n+1,k} = \frac{|E|}{\Delta t^n} (\theta_E^{n+1,k} - C_E^{n+1,k} H_E^{n+1,k} - \theta_E^n - S_{s,E} S_{w,E}^{n+1,k} H_E^n)$$

Donc la charge H peut s'exprimer :

$$H_E^{n+1,k+1} = \frac{\sum_{i=1}^{nf} (\alpha_{E,i}^{n+1,k} TH_{E,i}^{n+1,k+1}) - D_E^{n+1,k} + |E| f_{ps,E}^{n+1}}{\beta_E^{n+1,k}} \quad (2.22)$$

En introduisant cette relation dans l'équation de Darcy discrétisée (2.13), le flux s'écrit :

$$Q_{E,i}^{n+1,k+1} = \sum_{j=1}^{nf} \left(\frac{\alpha_{E,i}^{n+1,k} \alpha_{E,j}^{n+1,k}}{\beta_E^{n+1,k}} - (M_{E,ij}^{n+1,k})^{-1} \right) TH_{E,j}^{n+1,k+1} - \left(\frac{D_E^{n+1,k} - |E| f_{ps,E}^{n+1}}{\beta_E^{n+1,k}} \right) \alpha_{E,i}^{n+1,k} \quad (2.23)$$

Enfin, en écrivant la continuité du flux et de la charge entre 2 éléments adjacents E et E' ayant la facette ou l'arête i en commun :

$$Q_{E,i} + Q_{E',i} = 0 \text{ et } TH_{E,i} = TH_{E',i} \quad (2.24)$$

il vient :

$$\sum_{j=1}^{nf} N_{E,ij}^{n+1,k} TH_{E,j}^{n+1,k+1} + \sum_{j=1}^{nf} N_{E',ij}^{n+1,k} TH_{E',j}^{n+1,k+1} = F_{E,ij}^{n+1,k} + F_{E',ij}^{n+1,k} \quad (2.25)$$

Avec

$$N_{E,ij}^{n+1,k} = \frac{\alpha_{E,i}^{n+1,k} \alpha_{E,j}^{n+1,k}}{\beta_E^{n+1,k}} - (M_{E,ij}^{n+1,k})^{-1} \quad (2.26)$$

$$F_{E,ij}^{n+1,k} = \left(\frac{D_E^{n+1,k} - |E| f_{ps,E}^{n+1}}{\beta_E^{n+1,k}} \right) \alpha_{E,i}^{n+1,k}$$

On obtient ainsi un système matriciel de la forme $[M] \cdot \{TH_{E,i}^{n+1,k+1}\} = \{R_i^{n+1,k}\}$ où $\{TH_{E,i}^{n+1,k+1}\}$ est le vecteur contenant les charges moyennes par facette à déterminer et $\{R_i^{n+1,k}\}$ regroupe tous les termes connus (puits/source, pression imposée, flux imposé,...).

Ainsi, pour deux éléments voisins E et E' séparés par la facette i , les coefficients de la matrice $[M]$ sont donnés par les relations suivantes :

- pour les coefficients diagonaux :

$$m_{ii} = \tilde{m}_{E,ii} + \tilde{m}_{E',jj}$$

$$\text{avec } \tilde{m}_{E,ii} = \frac{(\alpha_{E,i}^{n+1,k})^2}{\beta_E^{n+1,k}} - (M_{E,ii}^{n+1,k})^{-1};$$

- pour les coefficients hors-diagonaux :

si la facette j n'appartient pas au même élément que la facette i , alors :

$$m_{ij} = 0.$$

si l'élément E contient les facettes i et j , alors :

$$m_{ij} = \frac{\alpha_{E,i}^{n+1,k} \alpha_{E,j}^{n+1,k}}{\beta_E^{n+1,k}} - (M_{E,ij}^{n+1,k})^{-1}.$$

Les valeurs de ces coefficients déterminent si la matrice de calcul obtenue est une M-matrice ou non.

Le code de calcul

Le code de calcul comprend :

- une phase d'initialisation pour la lecture des données (maillage, pas de temps, paramètres des sols) ;
- deux boucles de calcul, une première sur le temps et une autre sur les itérations à laquelle on attribue un critère de convergence ;
- un module de calcul pour calculer la matrice $[M]$ et pour déterminer les différentes valeurs de $\mathbf{K}(h)$, $\theta(h)$ et $C(h)$ à chaque itération k . Pour cette étude, nous avons choisi \mathbf{K} comme moyenne des conductivités de chaque facette de la maille E [Belfort and Lehmann, 2005].

L'organigramme suivant nous décrit le code de calcul élaboré en langage Fortran pour la résolution du problème d'écoulement :

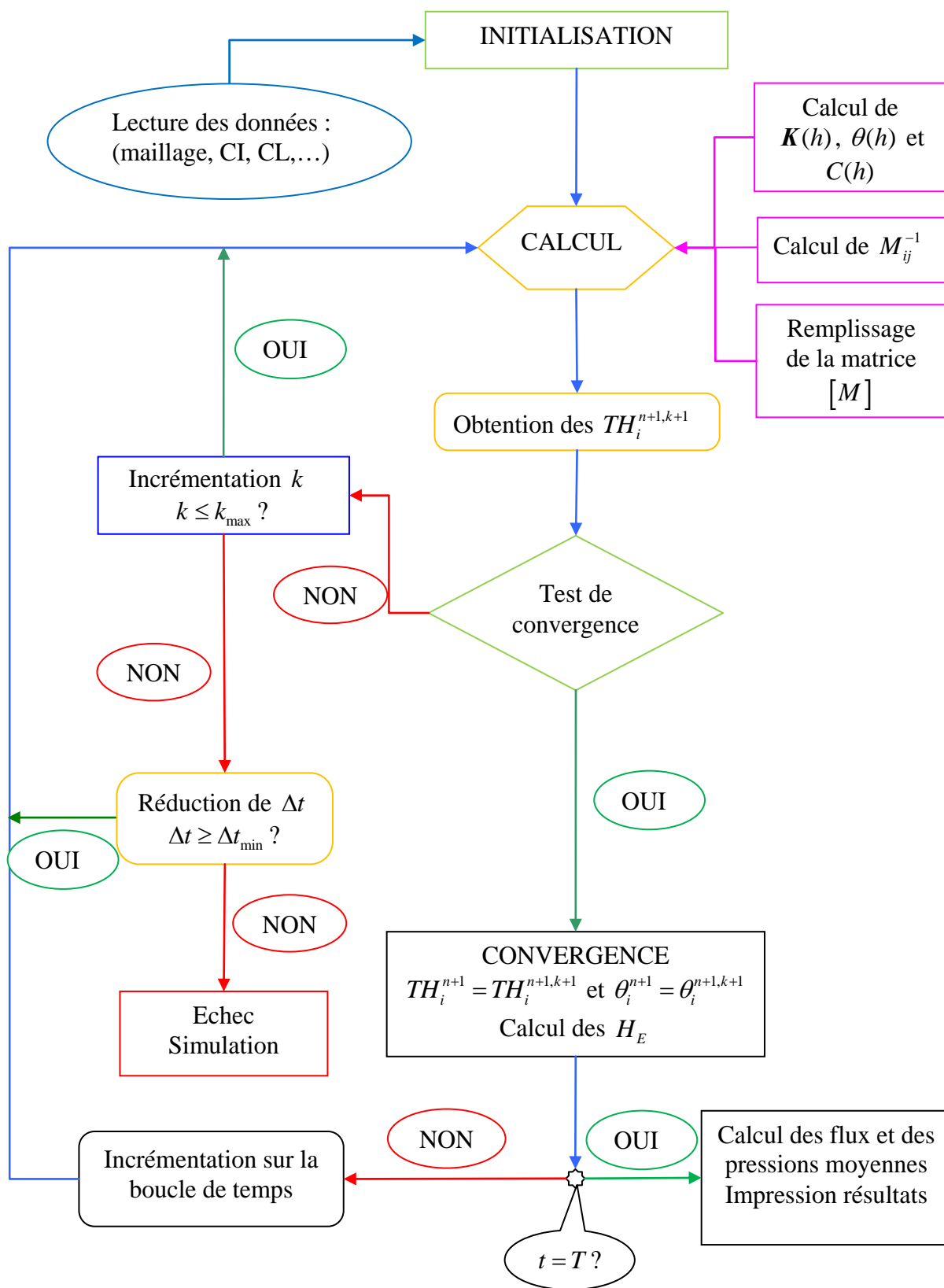


Figure-2. Le code de calcul pour la résolution de l'hydrodynamique.

2.3 Optimisation de la méthode des éléments finis mixtes hybrides pour la modélisation des écoulements variablement saturés

Le développement de méthodes de résolution précises et efficaces des problèmes d'infiltration dans un milieu initialement sec demeure un défi pour les modélisateurs. En effet, la modélisation avec les EFMH de fronts raides d'infiltration peut provoquer l'apparition d'oscillations non physiques. Afin d'éviter ce problème, nous proposons d'étendre une nouvelle procédure de condensation de la masse [Younes *et al.*, 2006b] pour la résolution de l'équation de Richards. Dans cet article, la formulation standard des EFMH est comparée au schéma avec condensation de la masse (EFMHC) pour des problèmes d'infiltration en 1D et en 2D. Une discussion portée sur la propriété M-matrice ainsi que différents cas-tests soulignent l'importance des maillages triangulaires dont tous les angles sont aigus ($\leq \pi/2$) afin de réduire voire supprimer les oscillations non physiques. En effet, contrairement à la formulation standard, le schéma EFMHC ainsi développé permet d'obtenir une M-matrice sans aucune contrainte sur le pas de temps utilisé.

An Efficient Lumped Mixed Hybrid Finite Element Formulation for Variably Saturated Groundwater Flow

Benjamin Belfort,* Fanilo Ramasomanana, Anis Younes, and François Lehmann

Accurate numerical simulation of infiltration in the vadose zone remains a challenge, especially when very sharp fronts are modeled. In this work, we used the mixed hybrid finite element (MHFE) method, which allows a simultaneous approximation of both pressure head and velocity and can handle general irregular grids with highly heterogeneous permeability. For many problems dealing with unsaturated water flow, however, the MHFE solutions exhibit significant unphysical oscillations. To avoid this phenomenon, we developed an efficient mass-lumping scheme with the MHFE method for solving the mixed form of the Richards equation. In this work, the standard and lumped MHFE formulations were compared and the ability of the lumped formulation to reduce unphysical oscillations was determined for one- and two-dimensional infiltration problems. Theoretical analysis based on the M -matrix property, which guarantees the discrete maximum principle, and practical test cases performed in this study underline the advantage of using an acute triangulation to completely remove the unphysical oscillations. Indeed, contrary to the standard approach, the lumped formulation satisfies the M -matrix property without any constraint on the time step size to be used.

ABBREVIATIONS: MHFE, mixed hybrid finite element; RE, Richards equation; RT0, lowest order Raviart–Thomas method.

PREDICTION of accurate fluid movement in porous media is an important issue for scientists and engineers who are interested in the management of water resources. Computational simulations have received much attention to achieve this predictive role. Even if its validity is still discussed, the Richards equation (RE) is a valuable model to predict water movement and solute transport in variably saturated media (Simunek and Bradford, 2008).

From a mathematical point of view, the RE can be a highly nonlinear parabolic equation under unsaturated conditions, or a partial differential equation (PDE) of elliptic type for a fluid-saturated incompressible porous media. Among the various numerical schemes that can be used to solve the RE, the mixed finite element method is well suited for the discretization of elliptic and parabolic PDEs on heterogeneous domains. Moreover, it is locally conservative, can handle general irregular grids, and allows simultaneous approximation of both pressure and velocity.

Consequently, this method has been used extensively during the last few years (Mosé et al., 1994; Bergamaschi et al., 1998; Younes et al., 1999, 2006; Ackerer et al., 1999; Chavent et al., 2003, among others). For practical applications, the lowest order mixed method of Raviart–Thomas (RT0) is frequently applied and was considered in this study. The RT0 uses a piecewise constant approximation for pressure (Brezzi and Fortin, 1991). The velocity space has three degrees of freedom for triangular elements and four for quadrangular elements. In their original form, the mixed methods require the resolution of algebraic equations that typically lead to indefinite systems (Chavent and Jaffré, 1986; Brezzi and Fortin, 1991).

The most widely used approach to circumvent this mathematical difficulty is the hybridization technique (Roberts and Thomas, 1990). It consists in introducing pressure Lagrange multipliers at the element edges. The MHFE method leads to a symmetric and positive definite matrix, which generally does not satisfy the M -matrix property (Raviart and Thomas, 1977; Thomas, 1977; Wheeler and Pezzyńska, 2002). This property (which requires a nonsingular matrix with $m_{ii} > 0$ and $m_{ij} \leq 0$) has nonetheless a nice physical impact, as the scheme in this case satisfies the discrete maximum principle, i.e., local maxima or minima will not appear in the numerical solution for a domain without local sources or sinks. Therefore, the resulting numerical state variable and its related fluxes are consistent with the physics.

For elliptic problems, the matrix obtained with the MHFE method is an M -matrix in the case of a weakly acute triangulation (all angles are $< \pi/2$) (Brezzi and Fortin, 1991). This condition on the angles is not sufficient for parabolic problems. A first

Laboratoire d'Hydrologie et Géochimie de Strasbourg, Université de Strasbourg, CNRS/UMR 7517, 1 rue Blessig, F-67084 Strasbourg, France. Received 11 July 2008. *Corresponding author (benjamin.belfort@unistra.fr).

Vadose Zone J. 8:352–362
doi:10.2136/vzj2008.0108

© Soil Science Society of America
677 S. Segoe Rd. Madison, WI 53711 USA.
All rights reserved. No part of this periodical may be reproduced or transmitted in any form or by any means, electronic or mechanical, including photocopying, recording, or any information storage and retrieval system, without permission in writing from the publisher.

approach to preserve the M -matrix property is to change the Raviart–Thomas finite element space for the flux variable (Marini and Pietra, 1990). Another way commonly used in finite element methods is mass lumping (Segerlind, 1984). In the literature, a mass-lumping procedure has been combined with the MHFE method by using a suitable quadrature formula to diagonalize the elemental matrix. This works nicely on rectangular meshes, where numerical quadrature makes the mixed approximation equivalent to finite differences (Weiser and Wheeler, 1988; Chavent and Roberts, 1991; Arbogast et al., 1998). An extension of this lumping procedure to triangular grids has been performed in specific studies (Baranger et al., 1994; Sacco and Saleri, 1997; Micheletti and Sacco, 1999; Micheletti et al., 2001).

On the other hand, a new mass-lumping procedure, suitable for any shape of element, was developed by Younes et al. (2006) without any quadrature formulas. The basic idea of the method is (i) to calculate steady-state fluxes using the standard MHFE method, and then (ii) to add the accumulation and sink–source terms directly on the edges where the MHFE method is seen as an edge–face-centered finite volume method. This scheme was shown to be efficient to reduce unphysical oscillations for transient simulations of the saturated flow problem (Younes et al., 2006).

This study deals specifically with unsaturated flow and the unphysical oscillations that can appear mainly ahead of sharp moisture fronts. Such numerical difficulties have been underscored for finite element (Milly, 1985; Celia et al., 1990; Pan et al., 1996; Ju and Kung, 1997; Karthikeyan et al., 2001) and MHFE (Farthing et al., 2003; Belfort and Lehmann, 2005) methods. Indeed, the nonlinear RE can be much more sensitive to unphysical oscillations, and convergence problems may be encountered with the MHFE method.

The primary goal of this work was to describe how the mass-lumping formulation proposed in Younes et al. (2006) can be efficiently extended to the mixed form of the RE. Then, our objective was to show how the lumped formulation can improve the monotonicity and the efficiency of the MHFE method for unsaturated flow problems on general triangular and quadrangular meshes. Finally, numerical simulations were performed for one- and two-dimensional infiltration problems to verify the benefit of the lumped MHFE formulation compared with the standard one.

Variably Saturated Flow Modeling

Water flow in variably saturated porous media can be described by the Jacob–Richards equation, which combines the mass conservation equation (Eq. [1a]) and the Darcy–Buckingham law (Eq. [1b]) (Freeze, 1971; Narasimhan, 2004, 2006):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + S_s S_w(\theta) \frac{\partial H}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = f \quad \text{in } \Omega \quad [1a]$$

$$\mathbf{q} = -K(h) \cdot \nabla H \quad [1b]$$

$$\begin{aligned} H &= H_e && \text{on } \partial\Omega_D \\ -K(h) \frac{\partial H}{\partial \eta} &= g && \text{on } \partial\Omega_N \end{aligned} \quad [1]$$

where H and h are the piezometric and pressure heads, respectively, such that $H = h + z$; z is the depth taken positive upward; S_s the specific storage coefficient; $S_w (= \theta/\theta_s)$ is the relative saturation of the aqueous phase; θ is the volumetric water content; θ_s is the saturated water content; \mathbf{q} is the water velocity; f is a source–sink term; and K is the hydraulic conductivity. Generally, under unsaturated conditions, the porous media and the fluid are assumed to be incompressible ($S_s = 0$). In this case, the Jacob–Richards equation reduces to the well-known RE. Equation [1] will be referred to here as the RE.

The domain Ω is a bounded polygonal open set of \mathbb{R}^2 , $\partial\Omega_D$ and $\partial\Omega_N$ are partitions of the boundary $\partial\Omega$ of Ω corresponding to Dirichlet and Neumann conditions, with either a fixed piezometric head H_e for Dirichlet boundaries or a fixed flux g for Neumann boundaries, and η is the unit outward vector normal to the boundary $\partial\Omega$.

Equation [1a] can be written in several forms with either the water content or the pressure head as the main unknowns. According to the chosen form, some care and specific adaptations have to be taken into account to conserve mass or to simulate variably saturated flow (Celia et al., 1990; Rathfelder and Abriola, 1994; Mansell et al., 2002).

The interdependencies of pressure head, hydraulic conductivity, and water content are characterized using constitutive relations. According to recent studies (Vogel et al., 2001; Ippisch et al., 2006; Schaap and van Genuchten, 2006), the standard Mualem–van Genuchten model (Mualem, 1976; van Genuchten, 1980) has to be modified by adding an air-entry value (h_e). The effective saturation (S_e) is given by

$$S_e = \begin{cases} = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \frac{1}{S_E^*} \left[1 + (\alpha |h|)^n \right]^{-m}, & h < -h_e \\ = 1, & h \geq -h_e \end{cases} \quad [2]$$

where θ_s and θ_r are the saturated and residual volumetric water contents, respectively, α is a parameter related to the mean pore size, n is a parameter reflecting the uniformity of the pore-size distribution and $m = 1 - 1/n$.

The saturation at the cut-off point h_e is

$$S_E^* = \left[1 + (\alpha h_e)^n \right]^{-m} \quad [3]$$

The conductivity–saturation relationship becomes

$$K(S_e) = \begin{cases} K_s S_e^{1/2} \left\{ \frac{1 - \left[1 - (S_E^* S_e)^{1/m} \right]^m}{1 - (1 - S_E^{*1/m})^m} \right\}^2, & S_e < S_E^* \\ K_s, & S_e \geq S_E^* \end{cases} \quad [4]$$

where S_e is given by Eq. [2], $n > 1$, and K_s is the saturated conductivity (usually assumed as a scalar but could be a tensor for the general case).

Ippisch et al. (2006) show that the modified van Genuchten model is equivalent to the classical one for $n \gg 2$ and $\alpha h_e < 1$. Away from saturated conditions, both models behave similarly.

Numerical Approaches for Solving the Richards Equation

The Standard Mixed Hybrid Finite Element Method

In this work, the general mixed form of the RE was chosen because of the additional calculations necessary to treat both water content and pressure head in the lumped MHFE formulation. The approach could easily be adapted to solve the pressure head form of the RE.

Discretization of the Richards Equation

The solution H of the system Eq. [1] is approximated over an element E by the following quantities:

$$\begin{aligned} H_E \in \mathbb{R} &: \text{the mean value of } H \text{ over the element } E \\ \text{TH}_{E,i} \in \mathbb{R} &: \text{the mean value of } H \text{ over the edge } E_i \\ \mathbf{q}_E \in \mathbf{X}_E &: \text{the approximation of } \mathbf{q} = -K(h) \nabla H \text{ over } E \end{aligned} \quad [5]$$

where \mathbf{X}_E is the RT0 (Raviart and Thomas, 1977; Brezzi and Fortin, 1991; Chavent and Roberts, 1991) and \mathbf{q}_E is determined as

$$\mathbf{q}_E = \sum_{i=1}^{\text{ne}} Q_{E,i} \boldsymbol{\omega}_{E,i} \quad [6]$$

where $Q_{E,i}$ denotes the flux leaving E through the i th edge, taken positive outward, and ne is the number of edges of E ($\text{ne} = 3$ for a triangle and $\text{ne} = 4$ for a quadrangle).

The basis function $\boldsymbol{\omega}_{E,i}$ (see Fig. 1 in the case of a triangular element E) is verified by (Brezzi and Fortin, 1991)

$$\int_{E_j} \boldsymbol{\omega}_{E,i} \boldsymbol{\eta}_{E,j} = \delta_{ij} \quad [7]$$

where $\boldsymbol{\eta}_{E,j}$ is the unit outward vector normal to the edge E_j of the element E .

The variational formulation of the flux law (Eq. [1b]) using Eq. [7] leads to

$$\begin{aligned} \int_E K_E^{-1} \mathbf{q}_E \boldsymbol{\omega}_{E,i} &= \sum_{j=1}^{\text{ne}} Q_{E,j} \int_E \boldsymbol{\omega}_{E,i} K_E^{-1} \boldsymbol{\omega}_{E,j} \\ &= - \int_E \nabla H \boldsymbol{\omega}_{E,i} = H_E - \text{TH}_{E,i} \end{aligned} \quad [8]$$

where K_E is the value of the parameter K in the element E .

We introduce now local matrix notations for the element E :

$$M_{E,ij} = \int_E \boldsymbol{\omega}_{E,i} K_E^{-1} \boldsymbol{\omega}_{E,j} \quad [9]$$

The matrix \mathbf{M} is symmetric and positive definite.

Equation [8] can be written as

$$\begin{aligned} Q_{E,i} \\ = \sum_{j=1}^{\text{ne}} M_{E,ij}^{-1} (H_E - \text{TH}_{E,j}) &= \alpha_{E,i} H_E - \sum_{j=1}^{\text{ne}} M_{E,ij}^{-1} \text{TH}_{E,j} \end{aligned} \quad [10]$$

with

$$\alpha_{E,i} = \sum_{j=1}^{\text{ne}} M_{E,ij}^{-1}$$

Using a fully implicit time discretization and the property Eq. [7] of the RT0 basis functions, the mass balance Eq. [1a] takes the following discretized form:

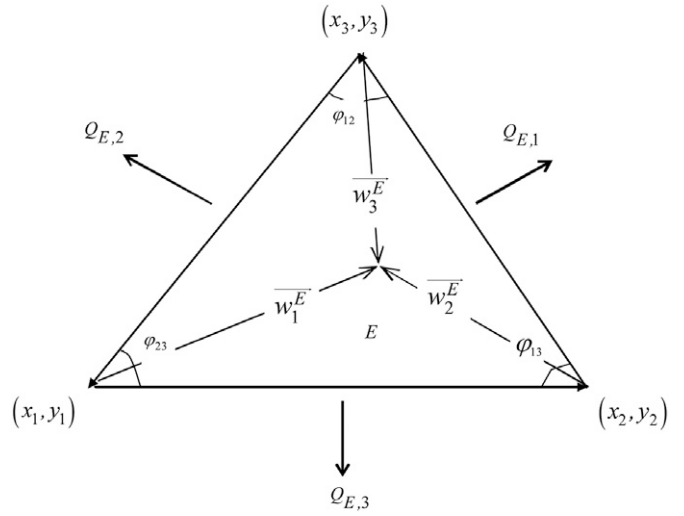


FIG. 1. Vectorial basis functions with the lowest order Raviart–Thomas space (RT0) on triangles; $Q_{E,i}$ refers to the flux leaving edge E_i (x_i, y_i) are the coordinates of the vertex opposite to the edge e_i , $\varphi_{E,ijk}$ is the corresponding vertex angle and $\boldsymbol{\omega}_{E,i}$ is the vectorial basis function of the vertex opposite to the edge E_i ($i \neq j \neq k$ and i, j , and $k \in \{1, 2, 3\}$).

$$\begin{aligned} |E| \left[\frac{\theta_E^{n+1} - \theta_E^n}{\Delta t^n} + S_{s,E} \frac{H_E^{n+1} - H_E^n}{\Delta t^n} \right] \\ + \sum_{i=1}^{\text{ne}} Q_{E,i}^{n+1} = |E| f_E^{n+1} \end{aligned} \quad [11]$$

where $|E|$ is the area of the element E , n is the time level, and Δt^n is the time step size between the new and the old time levels ($\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$).

Due to the high nonlinearities of the relationships among h , θ , and K , the water content is expanded using a first-order Taylor series with respect to the piezometric head (Celia et al., 1990):

$$\theta_E^{n+1,k+1} \simeq \theta_E^{n+1,k} + C_E^{n+1,k} (H_E^{n+1,k+1} - H_E^{n+1,k}) \quad [12]$$

where C_E is the soil moisture capacity of the element E and k is the iteration level.

Substituting Eq. [10] and [12] into Eq. [11] gives the mean piezometric head over the element E :

$$\begin{aligned} H_E^{n+1,k+1} &= \frac{1}{\beta_E^{n+1,k}} \left[\sum_{i=1}^{\text{ne}} (\alpha_{E,i}^{n+1,k} \text{TH}_{E,i}^{n+1,k}) - \right. \\ &\left. \frac{|E|}{\Delta t^n} (\theta_E^{n+1,k} - C_E^{n+1,k} H_E^{n+1,k} - \theta_E^n - S_{s,E} S_{w,E}^{n+1,k} H_E^n) \right. \\ &\left. + |E| f_E^{n+1} \right] \end{aligned} \quad [13]$$

with

$$\beta_E^{n+1,k} = \frac{|E|}{\Delta t^n} (C_E^{n+1,k} + S_{s,E} S_{w,E}^{n+1,k}) + \alpha_E^{n+1,k} \quad [14]$$

$$\alpha_E^{n+1,k} = \sum_{i=1}^{\text{ne}} \alpha_{E,i}^{n+1,k}$$

According to this linearization strategy, Eq. [10] becomes

$$Q_E^{n+1,k+1} = \sum_{i=1}^{\text{ne}} N_{E,ij}^{n+1,k} \text{TH}_{E,j}^{n+1,k+1} + F_{E,i}^{n+1,k} \quad [15]$$

with

$$N_{E,ij}^{n+1,k} = \frac{\alpha_{E,i}^{n+1,k} \alpha_{E,j}^{n+1,k}}{\beta_E^{n+1,k}} - \left(M_{E,ij}^{n+1,k} \right)^{-1} \quad [16]$$

and

$$F_{E,i}^{n+1,k} = \frac{\alpha_{E,i}^{n+1,k}}{\beta_E^{n+1,k}} \left[|E| f_E^{n+1} - \frac{|E|}{\Delta t^n} \left(\theta_E^{n+1,k} - C_E^{n+1,k} H_E^{n+1,k} - \theta_E^n - S_{s,E} S_w^{n+1,k} H_E^n \right) \right] \quad [17]$$

Note that for general quadrangular elements, the local matrix \mathbf{N}_E cannot be evaluated easily and we resort to numerical integration. On the other hand, for triangular elements (see notations on Fig. 1), the matrix \mathbf{N}_E can be evaluated algebraically in the case of a scalar conductivity K_E (Younes et al., 2004):

$$\mathbf{N}_E^{n+1,k} = \begin{pmatrix} \frac{r_{23}^2}{|E|} & -2 \cot(\varphi_{E,12}) & -2 \cot(\varphi_{E,13}) \\ -K_E^{n+1,k} \left(-2 \cot(\varphi_{E,12}) & \frac{r_{31}^2}{|E|} & -2 \cot(\varphi_{E,23}) \right) \\ -2 \cot(\varphi_{E,13}) & -2 \cot(\varphi_{E,23}) & \frac{r_{12}^2}{|E|} \end{pmatrix} \quad [18]$$

$$- \frac{1}{3} \gamma_E^{n+1,k} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

in which r_{ij} is the edge vector from node i toward node j ,

$$\gamma_E^{n+1,k} = \frac{K_E^{n+1,k} (\beta_E^{n+1,k} - \alpha_E^{n+1,k})}{3K_E^{n+1,k} + (\beta_E^{n+1,k} - \alpha_E^{n+1,k})\ell} \quad [19]$$

and

$$\ell = \sum_{j=1}^3 M_{E,ij} = \frac{\|r_{12}\|^2 + \|r_{23}\|^2 + \|r_{31}\|^2}{48|E|} \geq \frac{\sqrt{3}}{12} \quad [20]$$

Equation [15] is used to form the final system to solve. The scalar unknowns correspond to the mean piezometric head on the cell edges ($\text{TH}_{E,j=1,\dots,\text{ne}}$) and the final system of equations is obtained using continuity properties between adjacent elements:

- For all interior edges, the continuity of the normal component of the velocity and edge piezometric head between the two adjacent cells E and E' is written as

$$\text{TH}_{E,i} = \text{TH}_{E',j} \quad \text{and} \quad Q_{E,i} + Q_{E',j} = 0 \quad [21]$$

- For a Dirichlet boundary edge E_i with a prescribed pressure TH_i^{bc} , we have

$$\text{TH}_{E,i} = \text{TH}_i^{\text{bc}} \quad [22]$$

- For a Neumann boundary edge with a given flux $Q_{N,i}$,

$$Q_{E,i} + Q_{N,i} = 0 \quad [23]$$

The resulting system matrix is symmetric and positive definite.

Type M Matrix Condition for the Standard Mixed Hybrid Finite Element Formulation

If a matrix is of type M , then it has a nonnegative inverse, i.e., all the elements of the inverse matrix are nonnegative. This implies the validity of the discrete maximum principle and thus monotonicity of the discretization. The M -matrix property requires a nonsingular matrix with positive diagonal entries and nonpositive off-diagonal entries.

In the case of the standard MHFE formulation, each line i of the global matrix represents the flux continuity between the two elements E and E' sharing the edge i , i.e., the sum of the two fluxes $Q_{E,i}$ and $Q_{E',j}$. Therefore, using Eq. [15], we can see that the global matrix is an M -matrix if both local matrices \mathbf{N}_E and $\mathbf{N}_{E'}$ are of type M .

For one-dimensional problems, it was shown in Belfort and Lehmann (2005) that \mathbf{N}_E is an M -matrix if the time size is larger than a critical value that depends mainly on the soil moisture capacity and conductivity. For two-dimensional rectangular meshes, the matrix \mathbf{N}_E can never be of type M (cf. Appendix). Finally, with triangular meshes, the matrix \mathbf{N}_E is an M -matrix if the triangulation is acute and if the time step is also great enough (cf. Appendix). Note that the criteria on the time step length may be difficult to respect under unsaturated conditions where conductivity, soil moisture capacity, and saturation change at each iteration.

The Lumped Mixed Hybrid Finite Element Method Discretization of the Richards Equation

With the lumped formulation of the MHFE method, the stationary and accumulation parts of the flux are separated (see Younes et al. [2006] for details), and it is written as

$$Q_{E,i} = \bar{Q}_{E,i} + \frac{Q_{E,s}}{\text{ne}} - \frac{|E|}{\text{ne}} \left(\frac{\partial \text{TH}_{E,i}}{\partial t} + S_s S_w \frac{\partial \text{TH}_{E,i}}{\partial t} \right) \quad [24]$$

where $Q_{E,s}$ is the sink-source term over the element E , defined by $Q_{E,s} = \int_E f dE$ and $\bar{Q}_{E,i}$ is the flux corresponding to the stationary problem without sink-source terms. Notice that $\bar{Q}_{E,i}$ is given by Eq. [10]; due to stationary conditions, the mean piezometric head H_E can be expressed only in terms of traces of piezometric heads $\text{TH}_{E,i=1,\dots,\text{ne}}$. The accumulation term of Eq. [24] is also expanded according to Eq. [12] with edge state variables.

Furthermore, using a fully implicit time discretization, we obtain (see Younes et al., 2006)

$$Q_{E,i}^{n+1,k+1} = \sum_{j=1}^{\text{ne}} \tilde{N}_{E,ij}^{n+1,k} \text{TH}_{E,j}^{n+1,k+1} + F_{E,i}^{n+1,k} \quad [25]$$

where the local matrix $\tilde{\mathbf{N}}_E$ obtained with the lumped formulation is given by

$$\tilde{N}_{E,ij}^{n+1,k} = \frac{\alpha_{E,i}^{n+1,k} \alpha_{E,j}^{n+1,k}}{\alpha_E^{n+1,k}} - \left(M_{E,ij}^{n+1,k} \right)^{-1} - \lambda_{E,i}^{n+1,k} \text{TH}_{E,i}^{n+1,k+1} \delta_{ij} \quad [26]$$

where

$$\alpha_E^{n+1,k} = \sum_{i=1}^{\text{ne}} \alpha_{E,i}^{n+1,k} \quad [27]$$

$$\lambda_{E,i}^{n+1,k} = \frac{|E|}{ne\Delta t^n} \left(TC_{E,i}^{n+1,k} + S_{s,E} S_{w,E,i}^{n+1,k} \right) \quad [28]$$

and

$$F_{E,i}^{n+1,k} = \frac{|E|}{ne} f_E^{n+1} - \frac{|E|}{ne\Delta t^n} \left(T\theta_{E,i}^{n+1,k} - TC_{E,i}^{n+1,k} TH_{E,i}^{n+1,k} - T\theta_{E,i}^n - S_{s,E} S_{w,E,i}^{n+1,k} TH_{E,i}^n \right) \quad [29]$$

The global lumped MHFE system matrix is also obtained using continuity of fluxes and traces of piezometric head between adjacent elements. The obtained matrix is also symmetric and positive definite.

Type M Matrix Condition for the Lumped Mixed Hybrid Finite Element Formulation

As above, the global M -matrix property is verified if the local matrix $\tilde{\mathbf{N}}_E$ is of type M .

In the case for one-dimensional problems, the lumped formulation leads always to a local matrix of type M (Belfort and Lehmann, 2005). For two-dimensional rectangular elements, as with the standard formulation, the M -matrix property can never be obtained (cf. Appendix).

Concerning triangular elements (see notations on Fig. 1), the local matrix Eq. [26] of the lumped formulation is given by

$$\tilde{\mathbf{N}}_E^{n+1,k} = -K_E^{n+1,k} \begin{pmatrix} \frac{r_{23}^2}{|E|} & -2 \cot(\varphi_{E,12}) & -2 \cot(\varphi_{E,13}) \\ -2 \cot(\varphi_{E,12}) & \frac{r_{31}^2}{|E|} & -2 \cot(\varphi_{E,23}) \\ -2 \cot(\varphi_{E,13}) & -2 \cot(\varphi_{E,23}) & \frac{r_{12}^2}{|E|} \end{pmatrix} - \frac{1}{3} \gamma_E^{n+1,k} \begin{pmatrix} \lambda_{E,1}^{n+1,k} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{E,2}^{n+1,k} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{E,3}^{n+1,k} \end{pmatrix} \quad [30]$$

Since $\lambda_{E,i}^{n+1,k}$ are all positive, the local matrix $\tilde{\mathbf{N}}_E$ is always of type M for an acute triangulation. In this case and contrary to the standard MHFE scheme, the lumped formulation allows a global M -matrix to be obtained regardless of the size of the time step (see Younes et al. [2006] and the Appendix).

Results and Discussion

Two numerical models based on the standard and lumped formulations of the MHFE method were developed for resolution of the RE. Both use a linearization technique based on the fixed point method (Picard iteration) and an absolute convergence criterion function of the piezometric head variations. The codes can obviously be improved, for instance with a Newton Raphson linearization technique (Bergamaschi and Putti, 1999), high-order temporal approximations (Farthing et al., 2003), adaptive time stepping (Kavetski et al., 2001) or grid refinement (Mansell et al., 2002) techniques. These sophisticated strategies have not been investigated, however, since we mainly focused in this work on unphysical oscillation problems. Note that all

theses techniques can easily be implemented with the lumped MHFE formulation.

In the numerical codes, the hydraulic conductivity K_E of the element E is updated at each iteration using the arithmetic mean (Belfort and Lehmann, 2005):

$$K_E^{n+1,k} = \frac{1}{ne} \sum_i^{ne} K_E \left(Th_{E,i}^{n+1,k} \right) \quad [31]$$

in which $Th_{E,i}^{n+1,k}$ is the mean pressure head over the edge E_i , given by

$$Th_{E,i}^{n+1,k} = TH_{E,i}^{n+1,k} - z_{E,i} \quad [32]$$

Numerical experiments are performed with both codes to simulate the infiltration of water into an unsaturated porous medium (Celia et al., 1990). Parameters describing the soil are reported in Table 1. Since only unsaturated conditions are present in the domain, the air-entry value and the storage coefficient have no significant effects and were fixed to zero. Furthermore, to show the effect of the time step length on the unphysical oscillations, a fixed time strategy was adopted.

We simulated both one- and two-dimensional infiltration problems. Different spatial discretizations were studied in two dimensions (general quadrangular elements, general triangulation, Delaunay triangulation, and acute triangulation). Parameters and initial and boundary conditions for both one- and two-dimensional problems are given in Table 1.

One-Dimensional Infiltration under a Constant-Head Boundary Condition

The one-dimensional infiltration problem was solved using a fixed time step of $\Delta t = 1$ s and different spatial discretizations (Δz varying from 1 to 5 cm).

A reference solution, which coincides with the quasi-analytical solution developed by Philip (1957), was evaluated

TABLE 1. Description of parameters and simulation conditions.

Variable	Value
Characteristic	
Residual volumetric water content (θ_r)	0.102
Saturated volumetric water content (θ_s)	0.368
Mean pore size parameter α , cm ⁻¹	0.033
Pore size distribution uniformity parameter n	2
Saturated hydraulic conductivity (K_s), cm s ⁻¹	9.22×10^{-3}
Dimension	
Depth z , cm	[0,100]
x , cm (two dimensions)	[0,50]
Initial pressure head [$h(t=0)$], cm	-1000
Boundary condition	
Upper	
Mean piezometric head over the edge (TH), cm	
One dimension ($z = 100$, t)	25
Two dimensions (x , $z = 100$) $\forall x \in [0,20]$	25
Flux (Q), cm s ⁻¹	
Two dimensions (x , $z = 100$) $\forall x \in [20,50]$	0
Lower TH, cm (one and two dimensions) (x , $z = 0$, t)	-1000
Lateral flux, cm s ⁻¹ (two dimensions)	0

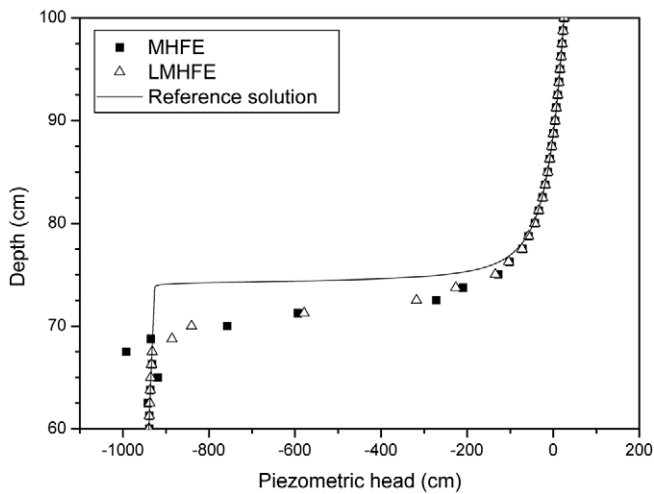


FIG. 2. Illustration of the infiltration front for the upper 40 cm of the soil with a constant nodal spacing $\Delta z = 2.5$ cm using the mixed hybrid finite element (MHFE) and lumped mixed hybrid finite element (LMHFE) methods.

numerically using a small time step and nodal spacing (0.1 s and 0.1 cm).

The wetting fronts after 6 h of infiltration obtained with the standard and lumped formulations are compared with the reference solution in Fig. 2. To obtain a good visual comparison of the MHFE schemes, results are given only for the upper 40 cm of the soil profile. Figure 2 shows clearly that the standard MHFE solution produces important unphysical oscillations. These undesired oscillations were eliminated with the lumped MHFE formulation.

The computational efficiency of the proposed mass-lumping technique was verified by means of comparisons. Figure 3 represents the global error as a function of the global CPU time with mesh refinement (different Δz). The global error, GE_{err} , is defined by

$$GE_{err} = \frac{\int_{z=0}^{z=L} |Th_{cal}(z) - Th_{ref}(z)| dz}{\int_{z=0}^{z=L} |Th_{ref}(z)| dz} \quad [33]$$

where Th_{cal} is the edge value of the pressure head (Eq. [32]) calculated with a formulation of the MHFE method, and Th_{ref} is the reference pressure head obtained with a very fine grid system.

The results in Fig. 3 show that the lumped formulation is more efficient than the standard MHFE formulation. Indeed, in general, the lumped formulation requires 2.5 times less CPU time than the standard formulation to achieve a fixed accuracy.

A Two-Dimensional Infiltration into Initially Dry Soil

For this problem, we considered the infiltration of water into a 50- by 100-cm rectangular domain. Boundary conditions are described in Table 1. All sides of the flow region were considered to be impervious, except for a strip of 20-cm length at the surface where ponded infiltration with a 25-cm piezometric head was imposed. At the bottom, a prescribed piezometric head was fixed to a value of -1000 cm (see Fig. 4). The simulations were performed for 1 d. Four different spatial discretizations were used in this example: a general quadrangular mesh of 1250 cells (2575

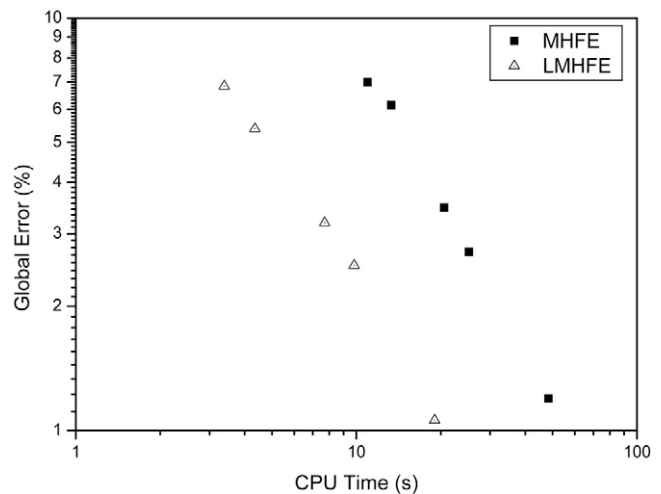


FIG. 3. Global error vs. CPU time for the mixed hybrid finite element (MHFE) and lumped mixed hybrid finite element (LMHFE) methods; each mark corresponds to a uniform nodal spacing (successively 1, 2, 2.5, 4, and 5 cm).

edges), a general triangular mesh of 2500 cells (3825 edges), a Delaunay triangulation of 1716 cells (2632 edges), and an acute triangulation of 2048 cells (3136 edges). The general quadrangular mesh is depicted in Fig. 4. Simulations were performed using either a small time step of 5 s or a large time step of 200 s and with both the standard and the lumped formulations of the MHFE method.

The expected numerical solution should be bounded. In this problem, the values of the piezometric head solution $TH_{E,i}$ at

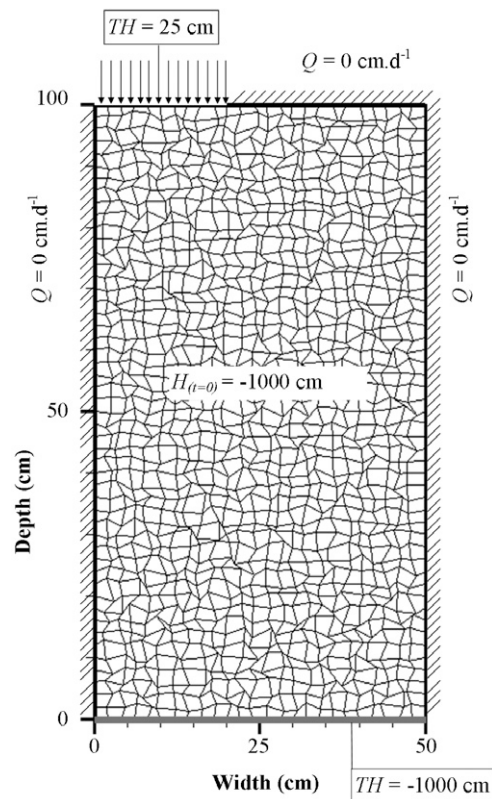


FIG. 4. Illustration of the two-dimensional test case; TH is the mean piezometric head prescribed at the boundary, Q is the flux, and $H_{(t=0)}$ is the initial value of the mean piezometric head.

element edges should be between 25 cm (the upper Dirichlet boundary condition) and -1000 cm (the lower Dirichlet boundary condition). Because of the violation of the discrete maximum principle, the obtained numerical solution gives values less than -1000 cm. To quantify how badly the solution violates the maximum principle, we computed the minimum value of the (computed) piezometric head (H_{\min}) as well as the relative sizes as a percentage of the area where the maximum principle is violated (errg):

$$\text{errg} = \frac{\Omega(\text{TH}_E < -1000 \text{ cm})}{\Omega} \quad [34]$$

The results in Table 2 show that strong unphysical oscillations appear with the standard MHFE method even with the large time steps ($\Delta t = 200$ s). Indeed the minimum values reach -1313.78 cm with quadrangles, and about 12% of the area can be involved in unphysical oscillations. Similar unphysical results were obtained with the standard MHFE formulation for all kinds of triangulations. If we reduce the time step size, the unphysical oscillations become more important and the nonlinear problem may not converge. Indeed, results with the standard formulation using a small time step of 5 s cannot be obtained since convergence problems are encountered with all meshes.

The results obtained with the lumped formulation are given in Tables 3 and 4. The results with the large time step of 200 s show that the mass-lumping formulation allowed a great reduction of the unphysical oscillations compared with the standard

approach. For the quadrangular mesh, the minimum value reached -1022.90 cm and <3% of the area contained undesired oscillations. In the case of a general or Delaunay triangulation, <0.2% of the area was affected. The lumped formulation eliminated all unphysical oscillations when combined with an acute triangulation (Table 3).

Contrary to the standard formulation, the decrease in the time step size did not reduce the ability of the lumped formulation to solve the nonlinear problem. Results with the four discretizations are given in Table 4, when a small time step of 5 s was used. As with large time steps, the unphysical oscillations with the lumped formulation remained significant for quadrangles (minimum value -1028 cm). For triangular meshes, the unphysical oscillations were eliminated from the solution with the acute triangulation, but still existed for the general and Delaunay triangulations (Table 4).

Mazzia (2008) has recently shown that for the elliptic case with constant coefficients, the standard MHFE is monotonic for Delaunay-type meshes with the property that no circumcenters of boundary elements with Dirichlet conditions lie outside the domain. Indeed, if we consider an interior edge i shared by two elements E and F (see Fig. 5), the Delaunay criterion can be written

- for an interior edge i ,

$$\cot \varphi_{E,i} + \cot \varphi_{F,i} > 0 \quad [35]$$

TABLE 2. Standard mixed hybrid finite element results for the proportion of area where the maximum principle is violated (errg) (Eq. [34]) and the minimum value of the piezometric head (H_{\min}) with a large time step of 200 s.

Time	Quadrangles		General triangles		Delaunay triangles		Acute triangles	
	errg	H_{\min}	errg	H_{\min}	errg	H_{\min}	errg	H_{\min}
s	%	cm	%	cm	%	cm	%	cm
1,600	9.34	-1313.78	2.91	-1171.42	2.96	-1186.42	5.68	-1273.77
7,600	10.20	-1246.62	3.72	-1123.92	3.90	-1100.46	8.69	-1207.30
25,000	11.90	-1195.94	5.08	-1116.42	4.75	-1079.93	11.00	-1168.23
36,000	11.79	-1151.03	4.79	-1121.63	5.09	-1000.11	11.00	-1156.38
86,400	10.82	-1173.43	4.28	-1114.14	5.06	-1064.50	10.50	-1110.57

TABLE 3. Lumped mixed hybrid finite element results for the proportion of area where the maximum principle is violated (errg) and the minimum value of the piezometric head (H_{\min}) with a large time step of 200 s.

Time	Quadrangles		General triangles		Delaunay triangles		Acute triangles	
	errg	H_{\min}	errg	H_{\min}	errg	H_{\min}	errg	H_{\min}
s	%	cm	%	cm	%	cm	%	cm
1,600	1.34	-1009.12	0.06	-1000.039	0.02	-1009.90	0.00	-1000.00
7,600	2.14	-1007.58	0.04	-1000.42	0.03	-1000.02	0.00	-1000.00
25,000	2.83	-1022.90	0.00	-1000.00	0.09	-1000.01	0.00	-1000.00
36,000	2.68	-1022.35	0.10	-1001.42	0.03	-1000.11	0.00	-1000.00
86,400	1.98	-1005.71	0.17	-1003.08	0.00	-1000.00	0.00	-1000.00

TABLE 4. Lumped mixed hybrid finite element results for the proportion of area where the maximum principle is violated (errg) and the minimum value of the piezometric head (H_{\min}) with a small time step of 5 s.

Time	Quadrangles		General triangles		Delaunay triangles		Acute triangles	
	errg	H_{\min}	errg	H_{\min}	errg	H_{\min}	errg	H_{\min}
s	%	cm	%	cm	%	cm	%	cm
1,600	1.11	-1011.16	0.04	-1000.032	1.49×10^{-4}	-1009.70	0.00	-1000.00
7,600	2.02	-1007.02	0.04	-1000.33	2.61×10^{-4}	-1000.01	0.00	-1000.00
25,000	2.86	-1028.01	0.03	-1000.02	9.06×10^{-4}	-1000.02	0.00	-1000.00
36,000	2.64	-1024.43	0.10	-1001.78	0.03	-1000.11	0.00	-1000.00
86,400	1.90	-1005.72	0.17	-1003.28	0.00	-1000.00	0.00	-1000.00

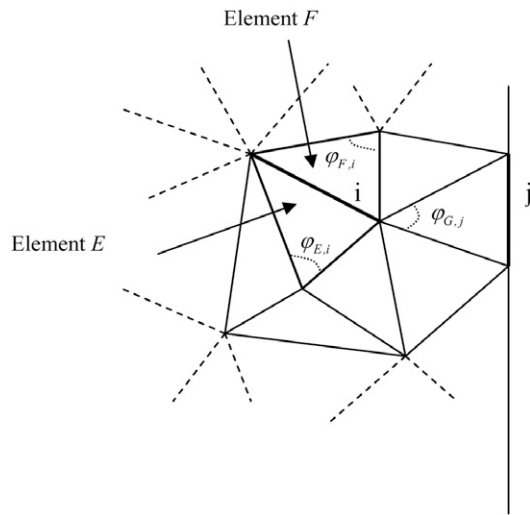


FIG. 5. Illustration of the Delaunay criterion; $\varphi_{E,i}$ is the vertex angle opposite to the edge E_j .

- for a Dirichlet boundary edge j ,

$$\cot \varphi_{G,j} > 0 \quad [36]$$

With the lumped formulation, the accumulation terms (terms with a time derivative) are added only on the diagonal part. Therefore, the system matrix of the lumped formulation for the parabolic case should have the same behavior as the system matrix of the standard formulation for the elliptic case. The Delaunay criterion (Eq. [35–36]) is hence expected to be valid for transient simulations with the lumped MHFE formulation.

The results in Tables 3 and 4 show, however, that this criterion was not sufficient to avoid unphysical oscillations for the infiltration problem treated here. This occurred because the cotangent of the angles in the lumped formulation are always multiplied by conductivities (Eq. [30]). Therefore, the previous criteria are valid only in the homogeneous case. For heterogeneous porous media, Eq. [35–36] should be weighted by conductivities, which leads to the following equations:

$$K_E \cot \varphi_{E,i} + K_F \cot \varphi_{F,i} > 0 \quad [37]$$

$$K_E K_G \cot \varphi_{G,j} > 0 \quad [38]$$

In the case of unsaturated flow, K_E and K_F are nonlinear functions of the pressure head. According to the piezometric heads distribution and the flow process, the conductivity field can vary over several orders of magnitude. This situation is typically encountered for infiltration problems in dry soils. Therefore, even if Eq. [35–36] are verified, the criteria of Eq. [37–38] may not be fulfilled and the maximum principle is violated. On the other hand, for an acute triangulation, Eq. [37–38] are always verified. In this case, the M -matrix property remains satisfied, which guarantees that the discrete maximum principle is respected. This is shown numerically in Tables 3 and 4, where the results with the lumped MHFE formulation do not contain any unphysical oscillation.

TABLE 5. Total CPU time with the standard mixed hybrid finite element (MHFE) and the lumped MHFE formulations.

Method	Quadrangles	General triangles	Delaunay triangles	Acute triangles
	s			
MHFE	108.28	152	99.79	124.35
Lumped MHFE	89.33	131	79.43	96.25

For this two-dimensional test case, the efficiency of the lumped formulation is demonstrated in Table 5 for the case in which simulations were achieved with a large time step of 200 s. The total computational time required can be compared for both methods. The results of this table show that the standard formulation requires between 15 and 30% more CPU time than the lumped formulation to perform the entire simulation. This increase in time is due to the increased effort required to iterate to reach a solution. Thus, because the monotonicity of the system is improved with the lumped formulation, the scheme is more efficient than the standard one.

A Technique for Improving the Monotonicity with Quadrangular Elements

The results of Tables 3 and 4 show that in contrast to triangles, the unphysical oscillations with the lumped formulation remained significant with quadrangles (minimum value -1028 cm). Indeed, it was shown in Younes et al. (2006) that the lumped MHFE formulation can never give an M -Matrix even for a homogeneous problem with rectangular discretization.

To improve the monotonicity of the lumped MHFE formulation for a general quadrangular mesh, we suggest changing the local matrix of the quadrangles. The basic idea of this technique is to consider each quadrangular element E as an aggregation of two triangles A and B (Fig. 6).

Using Eq. [25] for each triangle, the fluxes $Q_{A,i}$ and $Q_{B,i}$ are only a function of the edge piezometric heads $TH_{A,j}$ and $TH_{B,j}$. The continuity of the interior flux and the piezometric head between triangles A and B (see Fig. 6 for the notations and the numbering) is written as

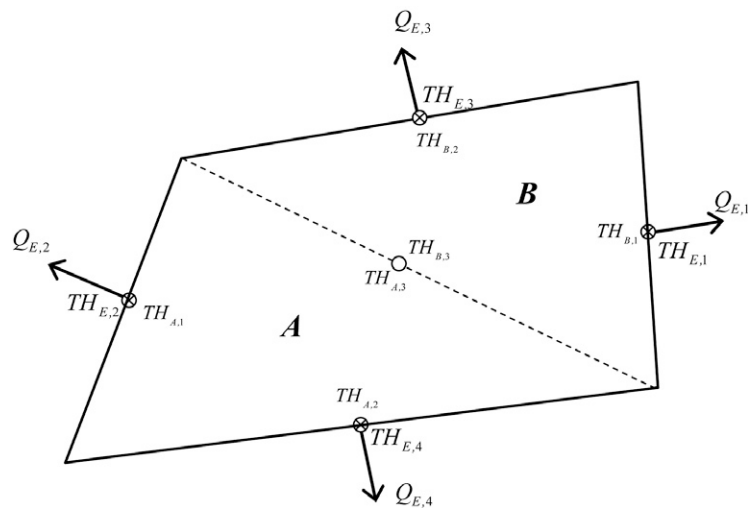


FIG. 6. Subdivision of a quadrangular cell E into two triangular elements A and B ; TH is the mean piezometric head over the edge, Q is the flux.

$$Q_{A,3}^{n+1} + Q_{B,3}^{n+1} = \sum_{j=1}^3 \tilde{N}_{A,3j} \text{TH}_{A,j}^{n+1} + F_{A,3}^{n+1} + \sum_{j=1}^3 \tilde{N}_{B,3j} \text{TH}_{B,j}^{n+1} + F_{B,3}^{n+1} \quad [39]$$

$$\text{TH}_{\text{int}}^{n+1} = \text{TH}_{A,3}^{n+1} = \text{TH}_{B,3}^{n+1}$$

Since this interior piezometric head did not appear in our initial quadrangular discretization, the basic idea consists in simplifying the system related to the local triangulation by keeping only the piezometric head at the exterior edges, i.e., those of the quadrangular element E . To this end, Eq. [39] provides an expression of the interior piezometric head,

$$\text{TH}_{\text{int}}^{n+1} = \frac{-1}{\tilde{N}_{A,33} + \tilde{N}_{B,33}} \left(\sum_{j=1}^2 \tilde{N}_{A,3j} \text{TH}_{A,j}^{n+1} + F_{A,3}^{n+1} + \sum_{j=1}^2 \tilde{N}_{B,3j} \text{TH}_{B,j}^{n+1} + F_{B,3}^{n+1} \right) \quad [40]$$

Fluxes at exterior edges of the triangles are simplified by inserting Eq. [40] into Eq. [25]. This approach gives the expression of the fluxes $Q_{E,i}$ across the edges of a quadrangular element E with a modified matrix $\tilde{\mathbf{N}}_E$ and a modified vector \mathbf{f}_E . For instance, the flux across the first edge of the element E becomes

$$Q_{E,1}^{n+1} = \left(\tilde{N}_{B,11} - \frac{\tilde{N}_{B,13} \tilde{N}_{B,31}}{\tilde{N}_{A,33} + \tilde{N}_{B,33}} \right) \text{TH}_{E,1}^{n+1} + \left(\frac{-\tilde{N}_{A,31} \tilde{N}_{B,13}}{\tilde{N}_{A,33} + \tilde{N}_{B,33}} \right) \text{TH}_{E,2}^{n+1} + \left(\tilde{N}_{B,12} - \frac{\tilde{N}_{B,13} \tilde{N}_{B,32}}{\tilde{N}_{A,33} + \tilde{N}_{B,33}} \right) \text{TH}_{E,3}^{n+1} + \left(\frac{-\tilde{N}_{A,32} \tilde{N}_{B,13}}{\tilde{N}_{A,33} + \tilde{N}_{B,33}} \right) \text{TH}_{E,4}^{n+1} - \frac{\tilde{N}_{B,13}}{\tilde{N}_{A,33} + \tilde{N}_{B,33}} \left(\mathbf{f}_{A,3}^{n+1} + \mathbf{f}_{B,3}^{n+1} \right) + \mathbf{f}_{B,1}^{n+1} \quad [41]$$

Using this formulation, it can be shown that the final system corresponds to an M -matrix if the fictitious triangulation is acute (angles of the triangles A and B are $< \pi/2$).

This subdiscretization has the following advantages:

- The procedure can be applied to only some elements and not necessarily to the whole mesh. This is interesting for nonconvex meshes, which cannot be handled by the standard MHFE method. For example, the nonconvex quadrangular element can be divided in two interior triangles (A , B) by dividing the greatest angle by 2.
- The parameters can change inside each quadrangle, which allows a better description of the spatial variability of the parameters without increasing the CPU time.
- The elemental matrix can be evaluated analytically without any quadrature formula even for distorted quadrangles.
- The developed approach has the same cost as the standard approach. In both formulations, the final system is solved for Lagrange multipliers at quadrangular edges.
- The monotonicity of the discretization is improved to avoid unphysical oscillations.
- The developed procedure is simple to implement (only the local matrix is changed).

Table 6 illustrates how the modified local matrix can improve the solutions of the lumped MHFE method for quadrangular meshes. The results demonstrate that the nonphysical oscillations

are strongly reduced with the proposed technique since the minimum value decreases from -1028.01 to -1003.28 cm. The area affected by oscillations decreases also from 2.86 to 0.24%.

In this example, the unphysical oscillations are strongly reduced but not completely removed because the fictitious triangulation is not acute. In the case where the fictitious triangulation is acute, the maximum principle should be verified and oscillations can be completely removed with the proposed technique.

Summary and Conclusions

A lumped formulation of the MHFE method was developed for the resolution of the RE. Both standard and lumped formulations of the MHFE method were used to simulate infiltration problems in one and two dimensions with different time step sizes and different spatial discretizations.

The results of the infiltration problems may exhibit strong unphysical oscillations ahead of sharp moisture fronts. These oscillations are due to violation of the maximum principle.

The numerical simulations show that:

1. For the one-dimensional infiltration problem, the lumped formulation allows the unphysical oscillations that can appear with the standard approach to be completely eliminated.
2. For a general quadrangular mesh as well as for all kinds of triangulations, strong unphysical oscillations appear in the solution obtained with the standard MHFE formulation. These oscillations increase with small time steps. In this case, convergence problems are encountered and the solution cannot be obtained.
3. The lumped formulation allows these unphysical oscillations to be strongly reduced and results can be obtained even with small time steps. Contrary to the standard formulation, in the case of acute triangulation, the lumped formulation gives an M -matrix that guarantees the maximum principle. Therefore, the unphysical oscillations are completely removed in this case.
4. The lumped formulation reduces the CPU time from 10 to 22% compared with the standard formulation.
5. A subdiscretization technique was proposed to improve the monotonicity of the solution for quadrangular meshes. Each quadrangle is considered as an aggregation of two triangles and a new local matrix for the quadrangle, based on the local matrices of the triangles, is defined. This technique reduces the oscillation without decreasing the computational efficiency of the scheme.

Finally, we would like to emphasize that the improvements in the MHFE scheme through the mass-lumping technique

TABLE 6. Results for the the proportion of area where the maximum principle is violated (errg) and the minimum value of the piezometric head (H_{min}) with the lumped mixed hybrid finite element and a small time step of 5 s.

Time	Quadrangles with standard local matrix		Quadrangles with the modified local matrix	
	errg	H_{min}	errg	H_{min}
s	%	cm	%	cm
1,600	1.11	-1011.16	0.07	-1000.03
7,600	2.02	-1007.02	0.09	-1000.33
25,000	2.86	-1028.01	0.03	-1000.02
36,000	2.64	-1024.43	0.15	-1001.78
86,400	1.90	-1005.72	0.24	-1003.28

depicted here can be incorporated easily in multidimensional codes dealing with variably saturated flow.

Appendix

Local matrix \mathbf{N}_E for a two-dimensional rectangular element E , using the MHFE method (cf. Eq. [16]):

$$\frac{3K_E^2}{K_E(\chi+1/\chi)+\gamma_E/12} \begin{pmatrix} \chi^2 & \chi^2 & 1 & 1 \\ \chi^2 & \chi^2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1/\chi^2 & 1/\chi^2 \\ 1 & 1 & 1/\chi^2 & 1/\chi^2 \end{pmatrix} - 2K_E \begin{pmatrix} 2\chi & \chi & 0 & 0 \\ \chi & 2\chi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2/\chi & 1/\chi \\ 0 & 0 & 1/\chi & 2/\chi \end{pmatrix}$$

and using the LMHFE method (cf. Eq. [26]):

$$\frac{3K_E}{(\chi+1/\chi)} \begin{pmatrix} \chi^2 & \chi^2 & 1 & 1 \\ \chi^2 & \chi^2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1/\chi^2 & 1/\chi^2 \\ 1 & 1 & 1/\chi^2 & 1/\chi^2 \end{pmatrix} - 2K_E \begin{pmatrix} 2\chi & \chi & 0 & 0 \\ \chi & 2\chi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2/\chi & 1/\chi \\ 0 & 0 & 1/\chi & 2/\chi \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \lambda_{E,1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{E,2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{E,3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_{E,4} \end{pmatrix}$$

where $\chi_E = \chi = \Delta z/\Delta x$ and $\gamma_E = (C_E + S_{s,E}S_{w,E})|E|/\Delta t$.

The conditions to satisfy M -matrix criteria for triangular elements, using the MHFE method are $0 \leq \varphi_k \leq 40.89^\circ$ for angles and $\tan(\varphi_k) - 6\ell \leq 18K_E/\gamma_E$ for the time step size, and using the LMHFE method, the criterion for angles is $0 \leq \varphi_k \leq 90^\circ$, where (cf. Fig. 1)

$$\ell = \frac{\|r_{12}\|^2 + \|r_{23}\|^2 + \|r_{31}\|^2}{48|E|}$$

and

$$\gamma_E = \frac{(C_E + S_{s,E}S_{w,E})|E|}{\Delta t}$$

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partly supported by the GdR MoMas CNRS-2439 sponsored by ANDRA, BRGM, CEA, and EDF, whose support is gratefully acknowledged.

References

Ackerer, Ph., A. Younes, and R. Mosé. 1999. Modeling variable density flow and solute transport in porous medium: 1. Numerical model and verification. *Transp. Porous Media* 35:345–373.

Arbogast, T., C.N. Dawson, P.T. Keenan, M.F. Wheeler, and I. Yotov. 1998. Enhanced cell-centered finite differences for elliptic equations on general geometry. *SIAM J. Sci. Comput.* 19:404–425.

Baranger, J., J.F. Maitre, and F. Oudin. 1994. Application de la théorie des éléments finis mixtes à l'étude d'une classe de schémas aux volumes-différences finis pour les problèmes elliptiques. *C.R. Acad. Sci. I. Math.* 319:401–404.

Belfort, B., and F. Lehmann. 2005. Comparison of equivalent conductivities for numerical simulation of one-dimensional unsaturated flow. *Vadose Zone J.* 4:1191–1200.

Bergamaschi, L., S. Mantica, and F. Saleri. 1998. A mixed finite element–finite volume formulation of the black-oil model. *SIAM J. Sci. Comput.* 20:970–997.

Bergamaschi, L., and M. Putti. 1999. Mixed finite elements and Newton-type linearizations for the solution of Richards' equation. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 45:1025–1046.

Brezzi, F., and M. Fortin. 1991. *Mixed and hybrid finite element methods.* Springer-Verlag, Berlin.

Celia, M.A., E.T. Bouloutras, and R.L. Zarba. 1990. A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water Resour. Res.* 26:1483–1496.

Chavent, G., and J. Jaffré. 1986. *Mathematical models and finite elements for reservoir simulation.* North-Holland, Amsterdam.

Chavent, G., and J.E. Roberts. 1991. A unified physical presentation of mixed, mixed hybrid finite elements and standard finite difference approximations for the determination of velocities in waterflow problems. *Adv. Water Resour.* 14:329–348.

Chavent, G., A. Younes, and Ph. Ackerer. 2003. On the finite volume reformulation of the mixed finite element method for elliptic and parabolic PDE on triangles. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 192:655–682.

Farthing, M.W., C.E. Kees, and C.T. Miller. 2003. Mixed finite element methods and higher order temporal approximations for variably saturated groundwater flow. *Adv. Water Resour.* 26:373–394.

Freeze, R.A. 1971. Three-dimensional, transient, saturated–unsaturated flow in a groundwater basin. *Water Resour. Res.* 7:347–366.

Ippisch, O., H.-J. Vogel, and P. Bastian. 2006. Validity limits for the van Genuchten–Mualem model and implications for parameter estimation and numerical simulation. *Adv. Water Resour.* 29:1780–1789.

Ju, S.-H., and K.-J.S. Kung. 1997. Mass types, element orders and solution schemes for the Richards equation. *Comput. Geosci.* 23:175–187.

Karthikeyan, M., T.-S. Tan, and K.K. Phoon. 2001. Numerical oscillation in seepage analysis of unsaturated soils. *Can. Geotech. J.* 38:639–651.

Kavetski, D., P. Binning, and S.W. Sloan. 2001. Adaptive time stepping and error control in a mass conservative numerical solution of the mixed form of Richards equation. *Adv. Water Resour.* 24:595–605.

Mansell, R.S., L. Ma, L.R. Ahuja, and S.A. Bloom. 2002. Adaptive grid refinement in numerical models for water flow and chemical transport in soil: A review. *Vadose Zone J.* 1:222–238.

Marini, L.D., and P. Pietra. 1990. New mixed finite element schemes for current continuity equations. *COMPEL* 9:257–268.

Mazzia, A. 2008. An analysis of monotonicity conditions in the mixed hybrid finite element method on unstructured triangulations. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 76:351–375.

Micheletti, S., and R. Sacco. 1999. Stabilized mixed finite elements for fluid models in semiconductors. *Comput. Visual. Sci.* 2:139–147.

Micheletti, S., R. Sacco, and F. Saleri. 2001. On some mixed finite element methods with numerical integration. *SIAM J. Sci. Comput.* 23:245–270.

Milly, P.C.D. 1985. A mass-conservative procedure for time-stepping in models of unsaturated flow. *Adv. Water Resour.* 8:32–36.

Mosé, R., P. Siegel, P. Ackerer, and G. Chavent. 1994. Application of the mixed hybrid finite element approximation in a groundwater flow model: Luxury or necessity? *Water Resour. Res.* 30:3001–3012.

Mualem, Y. 1976. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resour. Res.* 12:513–522.

Narasimhan, T.N. 2004. Darcy's law and unsaturated flow. *Vadose Zone J.* 3:1059.

Narasimhan, T.N. 2006. On storage coefficient and vertical strain. *Ground Water* 44:488–491.

Pan, L., A.W. Warrick, and P.J. Wierenga. 1996. Finite element methods for modeling water flow in variably saturated porous media: Numerical oscillation and mass-distributed schemes. *Water Resour. Res.* 32:1883–1889.

Philip, J.R. 1957. Theory of infiltration: 1. The infiltration equation and its solution. *Soil Sci.* 83:435–448.

Rathfelder, K., and L.M. Abriola. 1994. Mass conservative numerical solutions of the head-based Richards equation. *Water Resour. Res.* 30:2579–2586.

Raviart, P.A., and J.M. Thomas. 1977. A mixed finite element method for second order elliptic problems. p. 292–315. *In* I. Galligani and E. Magenes

- (ed.) Mathematical aspects of finite element methods. Proc. Conf., Rome. 10–12 Dec. 1975. Lect. Notes Math. 606. Springer, New York.
- Roberts, J.E., and J.M. Thomas. 1990. Mixed and hybrid methods. P. 523–640. In P.G. Ciarlet and J.L. Lyons (ed.) Handbook of numerical analysis. Vol. 2. Finite element methods (Part 1). North-Holland, Amsterdam.
- Sacco, R., and F. Saleri. 1997. Stabilized mixed finite volume methods for convection–diffusion problems. *East West J. Numer. Math.* 5:291–311.
- Schaap, M.G., and M.Th. van Genuchten. 2006. A modified Mualem–van Genuchten formulation for improved description of the hydraulic conductivity near saturation. *Vadose Zone J.* 5:27–34.
- Seegerlind, L.J. 1984. Applied finite element analysis. 2nd ed. John Wiley & Sons.
- Simunek, J., and S.A. Bradford. 2008. Vadose zone modeling: Introduction and importance. *Vadose Zone J.* 7:581–586.
- Thomas, J.M. 1977. Sur l'Analyse Numérique des Méthodes d'Eléments Finis Hybrides et Mixtes. Ph.D. diss. Université Pierre et Marie Curie, Paris.
- van Genuchten, M.Th. 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 44:892–898.
- Vogel, T., M.Th. van Genuchten, and M. Cislerova. 2001. Effect of the shape of the soil hydraulic functions near saturation on variably-saturated flow predictions. *Adv. Water Resour.* 24:133–144.
- Weiser, A., and M.F. Wheeler. 1988. On convergence of block-centered finite differences for elliptic problems. *SIAM J. Numer. Anal.* 25:351–375.
- Wheeler, M.F., and M. Peszynska. 2002. Computational engineering and science methodologies for modeling and simulation of subsurface applications. *Adv. Water Resour.* 25:1147–1173.
- Younes, A., P. Ackerer, and G. Chavent. 2004. From mixed finite elements to finite volumes for elliptic PDEs in two and three dimensions. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 59:365–388.
- Younes, A., P. Ackerer, and F. Lehmann. 2006. A new mass lumping scheme for the mixed hybrid finite element method. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 67:89–107.
- Younes, A., Ph. Ackerer, R. Mosé, and G. Chavent. 1999. A new formulation of the mixed finite element method for solving elliptic and parabolic PDE with triangular elements. *J. Comput. Phys.* 149:148–167.

2.4 Conclusion

La résolution d'un problème de transport en milieu souterrain nécessite, au préalable, la connaissance de l'hydrodynamique du milieu considéré. Dans ce chapitre, nous avons expliqué les raisons pour lesquelles nous avons opté pour la méthode des EFMH. La continuité des flux entre les éléments du maillage est un critère important pour la résolution du problème de transport. Par ailleurs, cette première étape nous a permis de développer une procédure d'optimisation du schéma existant pour la résolution des écoulements variablement saturés. En effet, la condensation de la masse permet d'améliorer la convergence et la précision lors de la résolution de l'équation de Richards avec la méthode des EFMH. De plus, nous avons pu voir que lorsque le maillage de calcul est formé par des triangles dont les angles sont inférieurs ou égaux à $\pi/2$, la formulation EFMHC permet de supprimer totalement les oscillations non physiques.

Chapitre 3

Quelques méthodes de résolution du problème de transport

3.1 Introduction

3.2 Les méthodes eulériennes

- 3.2.1 Les méthodes eulériennes classiques
- 3.2.2 Les différences finies amont
- 3.2.3 Les méthodes d'ordre supérieur
- 3.2.4 Les méthodes des éléments finis discontinus (EFD)

3.3 Les méthodes lagrangiennes

- 3.3.1 Définition
- 3.3.2 La méthode de vitesse de diffusion (VD)
 - Discrétisation particulière*
 - Transformation de l'équation d'advection-dispersion*
 - Mise en œuvre de la méthode de vitesse de diffusion*
- 3.3.3 Avantages et inconvénients des méthodes lagrangiennes

3.4 Les méthodes euléro-lagrangiennes

- 3.4.1 La méthode des caractéristiques (MOC)
 - Forward-tracking*
 - Calcul de la dispersion*
 - Mise à jour des concentrations des particules*
 - Avantages et inconvénients de la MOC*
- 3.4.2 La méthode modifiée des caractéristiques (MMOC)
 - Backward-tracking*
 - Calcul de la dispersion*
 - Avantages et inconvénients de la MMOC*

3.5 Les méthodes ELLAM

- 3.5.1 Définition des fonctions test
- 3.5.2 Ecriture variationnelle de la méthode ELLAM
- 3.5.3 Calcul de l'intégrale de masse au pas de temps (n+1)
- 3.5.4 Calcul de l'intégrale d'échange par dispersion
- 3.5.5 Calcul de l'intégrale de masse au pas de temps (n)
 - Approche backward-tracking*
 - Approche forward-tracking*
- 3.5.6 Calcul de la masse entrante par la frontière
 - Approche backward-tracking*
 - Approche forward-tracking*
- 3.5.7 Calcul de la masse sortante par la frontière
- 3.5.8 Les problèmes numériques de la méthode ELLAM
 - Les oscillations non physiques*
 - La diffusion numérique*

3.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous passons en revue quelques méthodes de résolution du problème de transport que nous pouvons trouver dans la littérature. Nous portons une attention particulière aux méthodes euléro-lagrangiennes qui sont à l'origine du développement des méthodes ELLAM. Enfin, nous présentons la mise en œuvre détaillée de la méthode ELLAM.

3.1 Introduction

Le transport de polluant non réactif dans les eaux souterraines peut être décrit par l'équation d'advection-dispersion qui est une équation aux dérivées partielles (EDP). Il est bien connu que la résolution de cette équation génère souvent des oscillations non physiques et/ou de la diffusion numérique dans les régions où la nature hyperbolique de l'équation devient prépondérante.

Il existe trois grandes classes de méthodes pour la résolution de cette équation d'advection-dispersion :

- *les méthodes eulériennes* : l'équation d'advection-dispersion est résolue sur un maillage fixe. Comme nous l'avons vu dans le chapitre-2, les principales méthodes numériques correspondantes sont les VF, les DF et les EF. Ces méthodes conservent la masse et sont faciles à mettre en œuvre ;

- *les méthodes lagrangiennes* : l'équation de transport est résolue à l'aide d'un ensemble de particules discrètes qui se déplacent par rapport au référentiel fixe. Toutes les données et les variables qui constituent le problème (coordonnées spatiales, vitesses, concentration,...) sont indexées et liées à chacune des particules. La méthode lagrangienne de base est le « particle-tracking » ;

- *les méthodes euléro-lagrangiennes* : la partie « advection » de l'équation de transport est résolue par une approche lagrangienne tandis que la partie « dispersion » est résolue par une approche eulérienne.

Chacune de ces méthodes propose des techniques et des améliorations afin d'éviter les problèmes numériques rencontrés lors de la résolution de l'équation de transport, plus particulièrement en présence de fronts raides (advection dominante) et/ou en cas de maillages non structurés.

3.2 Les méthodes eulériennes

3.2.1 Les méthodes eulériennes classiques

Les méthodes eulériennes le plus souvent utilisées pour la résolution de l'équation d'advection-dispersion sont les EF, les VF et les DF. Elles utilisent un maillage fixe et les dérivées spatiales sont approchées en utilisant les variables dans les mailles ou les nœuds voisins. Selon les cas, les méthodes eulériennes classiques permettent soit le calcul d'une concentration aux nœuds du maillage (EF), soit le calcul d'une concentration moyenne par maille (DF).

Cependant, ces méthodes classiques sont inadaptées à la résolution de l'équation d'advection-dispersion car des oscillations non physiques et/ou de la diffusion numérique peuvent apparaître lorsque le terme d'advection est prédominant.

Pour pallier ces problèmes numériques, les méthodes eulériennes classiques imposent des contraintes de discrétisations spatiale et temporelle liées au nombre de Péclet de maille (Pe) ainsi qu'au nombre de Courant-Friederichs-Lewy (CFL).

Dans le cas unidimensionnel, ces deux critères s'écrivent tels que [Daus *et al.*, 1985] :

$$\text{Pe} = \frac{V\Delta x}{D} \ll 2 \text{ et } \text{CFL} = \frac{V\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (3.1)$$

où Δx et Δt sont respectivement les pas d'espace et de temps.

Le respect de ces contraintes impose des restrictions très strictes quant à la taille des mailles et des pas de temps. Ceci peut induire des besoins en place mémoire très importants et/ou à des temps de calcul prohibitifs.

3.2.2 Les différences finies amont

Les DF amont utilisent un traitement non symétrique pour l'advection qui dépend du sens de la vitesse d'écoulement (figure-3). Ainsi, l'information est recherchée par une différence backward pour $V > 0$ et une différence forward pour $V < 0$.

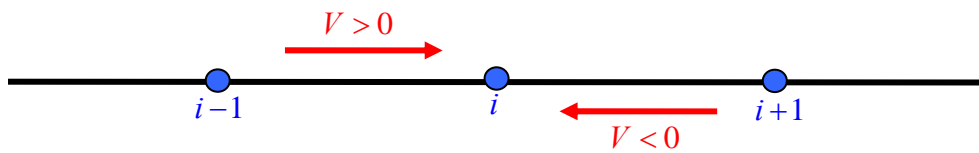


Figure-3. Schéma des différences finies amont.

Les DF amont permettent d'éviter les oscillations non physiques générées par les schémas eulériens classiques mais présentent, par contre, une dispersion numérique importante parce qu'ils ne sont que du premier ordre [Peyret and Taylor, 1983].

3.2.3 Les méthodes d'ordre supérieur

Les méthodes Eulériennes d'ordre supérieur ont été développées dans le but de construire des schémas précis et non oscillants pour la résolution de la partie hyperbolique de l'équation de transport [Roe, 1986]. L'idée de base de ces schémas est d'approcher la solution par un polynôme sur chaque élément du maillage. Cependant, la solution obtenue n'est pas nécessairement continue à l'interface de deux mailles voisines.

Dans le cas unidimensionnel, la concentration est représentée par sa valeur moyenne au niveau de chaque maille. Sa variation est déterminée par les deux flux aux interfaces. Chaque flux est déterminé à partir de la valeur moyenne de la concentration dans les mailles à gauche et à droite de l'interface en résolvant le

problème de Riemann exactement. Le schéma ainsi obtenu est un schéma du premier ordre.

Les schémas d'ordre supérieur s'obtiennent en approchant la concentration dans chaque maille par des polynômes de degré $k > 1$. Pour tous ces schémas, la difficulté réside dans la monotonie de la solution : la valeur de la concentration à l'interface ne doit être ni inférieure à la plus petite des concentrations des mailles voisines ni supérieure à la plus grande de ces concentrations. Ces schémas nécessitent parfois une procédure de limitation de pente qui peut engendrer de la diffusion numérique [Peyret and Taylor, 1983].

3.2.4 La méthode des éléments finis discontinus (EFD)

La méthode des éléments finis discontinus est une méthode eulérienne d'ordre supérieur basée sur la formulation des EF. La différence réside dans le fait que la variable calculée peut être discontinue au niveau des interfaces entre les différents éléments du maillage. Cette méthode a été introduite par Reed and Hill [1973] pour résoudre l'équation de transport de neutrons. Chavent and Salzano [1982] ont construit un schéma EFD explicite en temps utilisant des polynômes discontinus et linéaires par morceaux pour résoudre le transport en milieu poreux. Chavent and Cockburn [1989] ont adapté un limiteur de pente afin d'avoir un schéma stable pour des $CFL \leq 1/2$. Cette procédure de limitation de pente a été améliorée par Cockburn and Shu [1991] avec l'introduction d'une méthode de Runge-Kutta.

La méthode des EFD donne des résultats satisfaisants même sur un maillage irrégulier. Notons que ces méthodes utilisent une discrétisation explicite en temps et nécessitent par conséquent un strict respect du critère de Courant pour garantir la stabilité de la solution.

Les méthodes eulériennes classiques sont simples, conservent la masse et sont faciles à mettre en œuvre. Néanmoins, lorsque le processus d'advection est prédominant dans le transport, ces méthodes entraînent des oscillations non physiques et/ou de la dispersion numérique excessive. Ces erreurs peuvent être réduites en respectant des contraintes sur les discrétisations temporelle (CFL) et spatiale (Pe) mais l'effort de calcul engendré peut devenir important. Malgré les variantes des schémas eulériens classiques, le respect du Pe et du CFL demeure l'inconvénient majeur de cette classe de méthode.

3.3 Les méthodes lagrangiennes

3.3.1 Définition

Contrairement aux méthodes eulériennes, les méthodes lagrangiennes (ou particulières) ne requièrent aucun maillage. Elles consistent à représenter le nuage de polluant par un grand nombre de particules discrètes. Une masse M^P et une position $\mathbf{x}_P \in \Omega$ sont associées à chaque particule P . Ces particules subissent un déplacement déterministe, qui simule l'advection, auquel s'ajoutent des fluctuations aléatoires. Ces fluctuations aléatoires sont dues aux variations de la vitesse autour

d'une vitesse moyenne (vitesse moyenne de pore). Il existe plusieurs méthodes particulières pour modéliser le transport de soluté. Elles se distinguent par leur manière de traiter le terme dispersif.

La méthode la plus fréquemment utilisée est la méthode de marche au hasard [Prickett et al., 1981]. Elle repose sur l'utilisation de méthodes stochastiques pour décrire la composante dispersive du déplacement des particules [Labolle et al., 1996 ; Delay et al., 2005]. Dans ce travail, nous allons nous intéresser à une autre méthode lagrangienne appelée « méthode de vitesse de diffusion » [Degond and Mustieles, 1990].

3.3.2 La méthode de vitesse de diffusion (VD)

Cette méthode permet de transformer l'équation d'advection-dispersion en une équation d'advection pure et de résoudre cette dernière par un schéma lagrangien. Elle est basée sur l'idée que la diffusion d'une quantité scalaire w a une direction préférentielle de déplacement correspondante au gradient ∇w de cette quantité [Lacombe and Mas-Gallic, 1999].

Discrétisation particulière

Comme dans toutes les méthodes lagrangiennes, la concentration $C(\mathbf{x}, t^n)$ au temps n est approchée par un nuage de particules P définies par leur position \mathbf{x}_p^n et leur masse $M^P(t)$ telle que :

$$C(\mathbf{x}, t^n) \approx \sum_P M^P(t) \zeta_\varepsilon(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p^n) \quad (3.2)$$

où $\zeta_\varepsilon(x) = \frac{1}{\varepsilon} \zeta\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)$ est une fonction d'interpolation et ε un paramètre de régularisation proportionnel à la taille des particules. Une fois la valeur de ε fixée, la forme de la fonction ζ_ε est figée.

La fonction d'interpolation ζ vérifie la relation :

$$\int \zeta(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1 \quad (3.3)$$

Transformation de l'équation d'advection-dispersion

En introduisant le terme $\mathbf{q}_D = -\frac{\mathbf{D}}{C(\mathbf{x}, t)} \nabla C(\mathbf{x}, t)$ correspondant à la vitesse de diffusion dans l'équation (1.22), il vient :

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} + \nabla \cdot [(\mathbf{q} + \mathbf{q}_D) C] = 0 \quad (3.4)$$

qui correspond à une équation d'advection pure.

Le terme $\nabla C(\mathbf{x}, t)$ se calcule à l'aide de l'équation (3.2) tel que :

$$\nabla C(\mathbf{x}, t^n) = \sum_P M^P(t) \nabla \left[\zeta_\varepsilon(\mathbf{x} - \mathbf{x}_P^n) \right] \quad (3.5)$$

En coordonnées lagrangiennes, la résolution de l'équation (3.4) revient à résoudre le système suivant :

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{x}_P(t)}{dt} = \mathbf{q}(\mathbf{x}_P, t) + \mathbf{q}_D(\mathbf{x}_P, t) \\ \frac{dM^P(t)}{dt} = 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

La première équation du système (3.6) décrit l'évolution de la particule P animée d'une vitesse $\mathbf{u}_P(t) = \mathbf{q}(\mathbf{x}_P, t) + \mathbf{q}_D(\mathbf{x}_P, t)$ le long des caractéristiques selon la relation :

$$\frac{d\mathbf{x}_P(t)}{dt} = \mathbf{u}_P(t) \quad (3.7)$$

On peut alors déterminer la nouvelle position de la particule au pas de temps t^{n+1} :

$$\mathbf{x}_P^{n+1} = \mathbf{x}_P^n + \mathbf{u}_P^n \Delta t \quad (3.8)$$

La deuxième équation du système (3.6) nous donne la variation temporelle de la masse $M^P(t)$ de la particule P . En l'absence de terme puits/source, cette quantité est nulle.

Mise en œuvre de la méthode de vitesse de diffusion

La première étape consiste à répartir les particules de manière uniforme ou aléatoire dans le domaine en leur attribuant une position \mathbf{x}_P^n ainsi qu'une masse M^P .

Au premier pas de temps, les nouvelles positions des particules sont déterminées en résolvant la première équation du système (3.6) par un schéma Runge-Kutta en temps d'ordre-4. Par la suite, le nouveau champ de concentration peut alors être approché en utilisant la relation (3.2).

La méthode VD est facile à mettre en œuvre et à implémenter dans un code de calcul, elle ne nécessite aucun maillage permettant ainsi de modéliser des géométries complexes. La principale difficulté de cette méthode est le choix du paramètre ε car il détermine la forme de la solution que l'on obtient. En effet, il est évident que si le paramètre ε est trop petit ou trop grand comparé aux distances entre les particules, la solution approchée par la relation (3.2) sera erronée.

➤ Selon *Raviart* [1983], pour des solutions lisses, une valeur $\varepsilon = \sqrt{\Delta x_p}$, où Δx_p est la distance interparticulaire peut suffire pour mener à des résultats cohérents.

Afin d'illustrer cette approche sur un cas simple, nous allons étudier l'évolution d'un front de concentration en 1D pour un problème à advection dominante. Nous allons voir, dans un premier temps, l'influence du pas de temps ($\Delta t = 2.10^{-1}s; 1.10^{-1}s; 2.10^{-2}s$) et, par la suite, celui du nombre de particules ($N_p = 50; 100; 200$) sur la méthode VD.

Les paramètres du problème sont donnés dans le tableau suivant :

Paramètres	Valeurs
$\Omega_{x,t} = [0, L] \times [0, T]$	$[0, 2] \times [0, 2]$
Données	$D = 1.10^{-5} m^2.s^{-1}$, $V = 3.10^{-1} m.s^{-1}$,
Conditions initiales	$x \in [0.2; 0.5], C = 1 mg.l^{-1}$

Tableau-1. Paramètres du cas-test 1.

Pour la première étude, le nombre de particules est fixé à 200 et le paramètre de régularisation choisi tel que $\varepsilon = \sqrt{\Delta x_p}$.

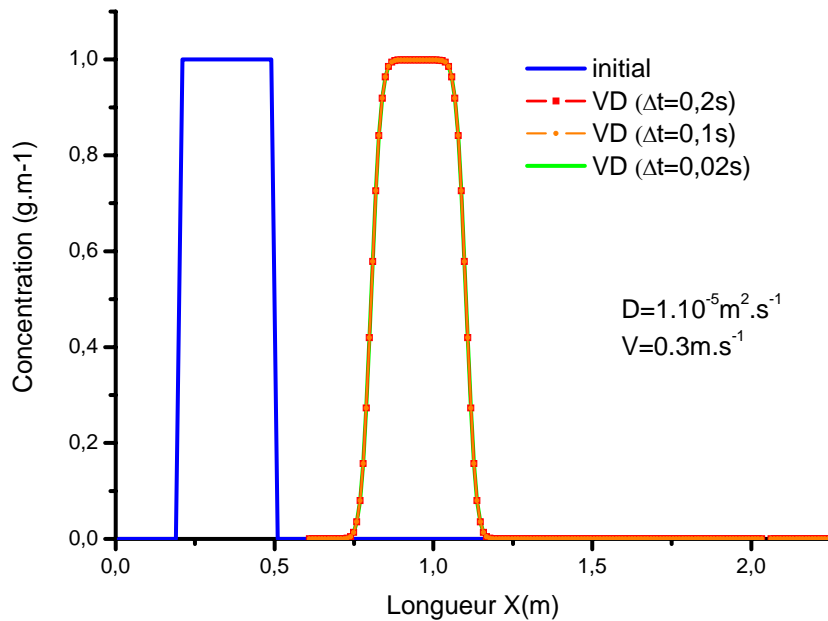


Figure-4. Comparaison de la méthode VD pour différents pas de temps.

La figure-4 nous montre que le pas de temps n'influe pas sur la méthode VD. De plus, la solution obtenue est exempte de diffusion numérique et d'oscillations non physiques.

Dans le deuxième test, nous modifions le nombre de particules initialement distribuées dans le domaine.

On voit clairement sur la figure-5 que le nombre de particules influe considérablement sur la précision de la solution. Un nombre insuffisant de particules entraîne une mauvaise approximation de la solution.

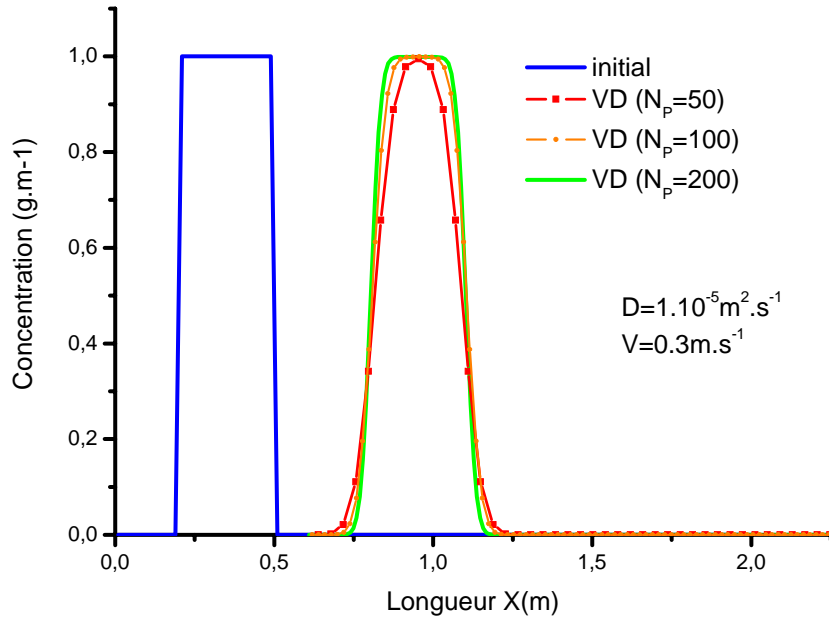


Figure-5. Comparaison de la méthode VD pour différents nombres de particules.

➤ Pour des problèmes présentant des fronts raides, *Chertock and Kurganov* [2006] proposent de déterminer localement pour la fonction de forme ζ_ε un paramètre ε_p dépendant uniquement de la position x_p de la particule P et de ses plus proches voisins tel que :

$$\varepsilon_p = A\sqrt{\Delta\mathbf{x}_p^{\max}} \quad (3.9)$$

où $\Delta\mathbf{x}_p^{\max}$ correspond à la distance interparticulaire maximale et $0 < A \leq 1$.

Afin de mettre en évidence l'influence du paramètre de régularisation ε , nous allons considérer un problème de transport en 1D dont la solution analytique présente de fortes discontinuités [*Chertock and Kurganov, 2006*].

L'équation du transport est donné par :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(V(x,t)C) = 0 \quad (3.10)$$

$$\text{où } V(x,t) = \begin{cases} \frac{1}{2}(x+1), & \text{si } -1 < x < 0 \\ \frac{1}{2}, & \text{si } 0 < x < t \\ 0, & \text{ailleurs} \end{cases}$$

avec les conditions initiales suivantes : $C(x,0) = \begin{cases} 1, & \text{si } -1 < x < 1 \\ 0, & \text{ailleurs} \end{cases}$.

La fonction de forme utilisée est $\zeta_\varepsilon(x) = \frac{1}{\varepsilon\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-x^2}{2\varepsilon^2}}$ et le nombre de particules est fixé à 200. Les résultats obtenus avec deux valeurs du paramètre A (0.25 et 0.75) sont comparés.

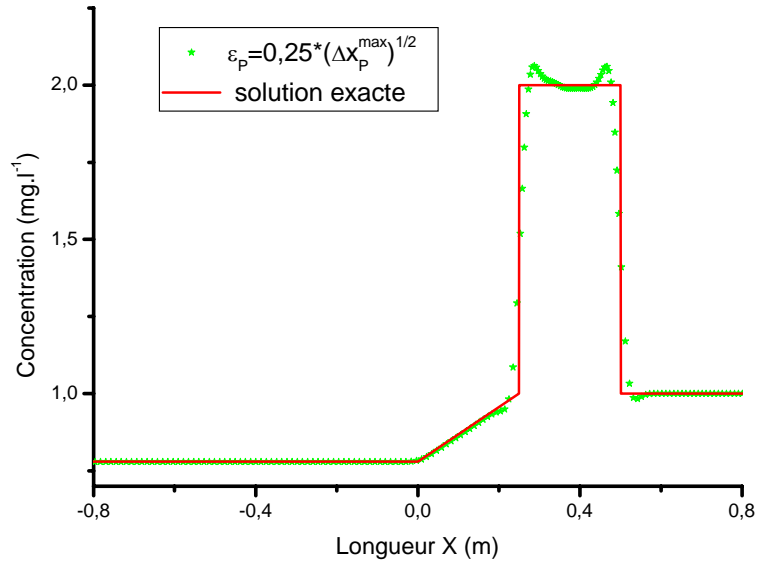


Figure-6. Solution avec $\varepsilon_p = 0.25\sqrt{\Delta x_p^{\max}}$.

On remarque l'apparition d'oscillations au niveau des discontinuités pour la valeur du paramètre $A = 0.25$ (figure-6). Dans le cas où $A = 0.75$, la solution obtenue par la méthode VD (figure-7) présente une mauvaise résolution des discontinuités avec oscillations non physiques moins importantes que dans le cas où $A = 0.25$. L'augmentation du nombre de particules permettrait, dans ces 2 cas, d'améliorer les résultats sans pour autant obtenir une approximation exacte de la solution.

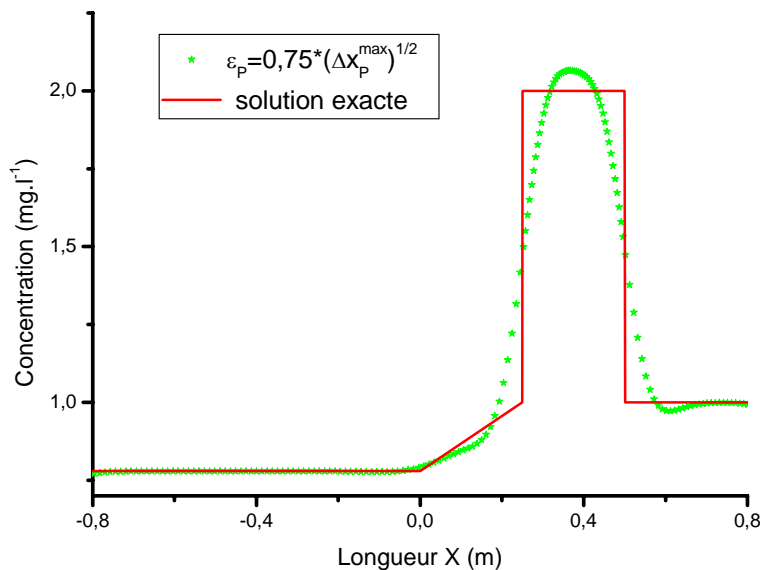


Figure-7. Solution avec $\varepsilon_p = 0.75\sqrt{\Delta x_p^{\max}}$.

Ces deux dernières figures illustrent la difficulté de la résolution des problèmes à front raides avec la méthode VD car il n'est pas évident de déterminer de manière rigoureuse le paramètre de régularisation ε qui permettrait d'obtenir une solution adéquate au problème posé.

3.3.3 Avantages et inconvénients des méthodes lagrangiennes

Les méthodes lagrangiennes sont exemptes de diffusion numérique car elles sont indépendantes de la discrétisation spatiale. De plus, elles permettent de se libérer des contraintes liées aux nombres de Pe et de CFL, et elles sont conservatives car la masse du traceur est discrétisée et transportée par les particules.

Malgré ces avantages, les méthodes lagrangiennes demandent un temps de calcul plus long face aux autres méthodes classiques de résolution de l'équation d'advection-dispersion. En effet, le temps de calcul dépend du nombre de particules N_p utilisées dans les simulations et la précision du calcul est proportionnelle à ce nombre. La faible décroissance de l'erreur (en $\sqrt{N_p}$) montre qu'il ne faut pas rechercher une grande précision.

Par ailleurs, la nature stochastique de ces méthodes ainsi que la discrétisation des concentrations sous forme de paquets de particules entraînent des résultats fluctuants ou bruités. Un lissage des résultats permet de supprimer ces fluctuations mais génère, dans le même temps, de la diffusion numérique.

3.4 Les méthodes euléro-lagrangiennes

D'après leurs appellations, les méthodes ELM combinent un schéma lagrangien et un schéma eulérien pour résoudre l'équation d'advection-dispersion. En effet, la partie advection est résolue par un déplacement de particules le long des caractéristiques tandis que la dispersion se résout à l'aide d'un schéma type différences finies ou éléments finis selon les cas. Les méthodes ELM permettent l'utilisation de grands pas de temps en maintenant la stabilité et la précision de la solution.

3.4.1 La méthode des caractéristiques (MOC)

La méthode des caractéristiques a été développée, en géosciences, par *Konikow and Bredehoeft* [1978]. C'est la plus ancienne et la plus répandue des méthodes ELM. Afin de faciliter les explications sur la MOC, nous allons considérer sa mise en œuvre dans le cas monodimensionnel. La résolution du problème de transport avec la MOC se déroule en trois étapes :

Forward-tracking

Dans un premier temps, on distribue les particules de manière uniforme ou aléatoire sur le domaine. Chaque particule P a une position x_p^n , un poids W^P et une concentration C_p^n qui sont attribués initialement. On fait ensuite avancer l'ensemble

de ces particules jusqu'au nouveau pas de temps en suivant les caractéristiques (forward-tracking) :

$$x_p^{n+1} = x_p^n + V\Delta t \tag{3.11}$$

où x_p^{n+1} l'abscisse de la particule P au pas de temps $n+1$;
 V la vitesse du fluide ;
 Δt le pas de temps.

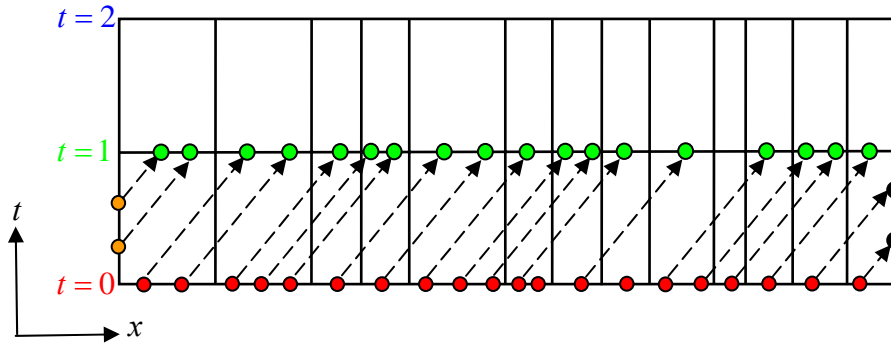


Figure-8. Le forward-tracking avec la MOC.

Il est nécessaire de distinguer les particules initialement dans le domaine (en rouge sur la figure-8) des particules qui représentent la masse entrante dans le domaine au cours du temps (en orange sur la figure-8). En effet, les particules entrantes permettent de tenir compte des conditions aux limites selon le problème considéré.

Les concentrations initiales C_p^n des particules P sont obtenues à l'aide des conditions initiales du problème. Les concentrations des particules correspondent à la concentration de l'élément E où elles se trouvent :

$$C_p^n = C_E^n \tag{3.12}$$

Leurs poids W^P correspondent à la taille de l'élément E divisée par le nombre de particules qui s'y trouvent :

$$W^P = \frac{\Delta x_E}{N_p^{ini}(E)} \tag{3.13}$$

où Δx_E correspond à la longueur de l'élément E ;

$N_p^{ini}(E)$ le nombre de particules initialement dans l'élément E .

Ainsi, toutes les particules se trouvant dans un même élément E ont donc initialement le même poids.

Après le « forward-tracking », les nouvelles concentrations dans les éléments sont calculées en faisant la moyenne des concentrations des particules qui y arrivent. On

obtient ainsi la concentration par « advection » C_E^{adv} dans chacun des éléments après un pas de temps :

$$C_E^{adv} = \sum_{P=1}^{N_P^{adv}(E)} \frac{C_P^n}{N_P^{adv}(E)} \quad (3.14)$$

où $N_P^{adv}(E)$ le nombre de particules arrivant dans l'élément E par advection.

On notera que les particules qui sortent du domaine (en noir sur la figure-8) ne sont pas prises en compte dans ce calcul.

Calcul de la dispersion

Après l'obtention des concentrations par advection dans chaque élément du maillage, on calcule la concentration totale C_E^{n+1} par advection-dispersion à l'aide d'un schéma eulérien de type DF explicite en temps en partant des concentrations obtenues par « advection » :

$$\frac{C_E^{n+1} - C_E^{adv}}{\Delta t} = D \frac{C_{E-1}^{adv} - 2C_E^{adv} + C_{E+1}^{adv}}{\Delta x_E^2} \quad (3.15)$$

Mise à jour des concentrations des particules

Il est nécessaire de mettre à jour la concentration des particules avant d'effectuer le pas de temps suivant. Pour ce faire, on détermine, dans un premier temps, la variation de concentration ΔC_E^{disp} par dispersion dans l'élément E telle que :

$$\Delta C_E^{disp} = C_E^{n+1} - C_E^{adv} \quad (3.16)$$

Deux cas peuvent alors se présenter :

➤ Si $\Delta C_E^{disp} \geq 0$, on rajoute cette variation de concentration à toutes les particules se situant dans l'élément E . Les nouvelles concentrations des particules sont alors obtenues par le calcul :

$$C_P^{n+1} = C_P^n + \Delta C_E^{disp} \quad (3.17)$$

➤ Si $\Delta C_E^{disp} < 0$, le calcul des concentrations des particules se fait par une méthode de pondération, en donnant plus de poids aux particules ayant des concentrations élevées par rapport à celles de faibles concentrations dans le même élément E . On a alors :

$$C_P^{n+1} = C_P^n \left(1 + \frac{\Delta C_E^{disp}}{C_E^{adv}} \right) \quad (3.18)$$

Les nouvelles concentrations des particules ayant été obtenues, on peut alors passer au pas de temps suivant.

Avec cette procédure, la méthode des caractéristiques (MOC) permet d'éviter la diffusion numérique générée par les interpolations successives lorsque l'on utilise plusieurs pas de temps.

Avantages et inconvénients de la MOC

Hormis le fait que la MOC peut être facilement implémentée dans un code de calcul, sa faculté à surmonter la diffusion numérique est son principal avantage. Cependant, il est nécessaire de générer initialement un nombre important de particules afin d'éviter les oscillations non physiques. En effet, dans le cas de maillages déstructurés, le manque ou l'absence de particules dans une maille (figure-9) peut fausser l'évolution d'un front de concentration, il apparaît alors des oscillations purement numériques qui n'ont pas lieu d'être.

L'augmentation du nombre de particules peut permettre de s'affranchir de ce problème mais engendre également un temps de calcul CPU assez conséquent.

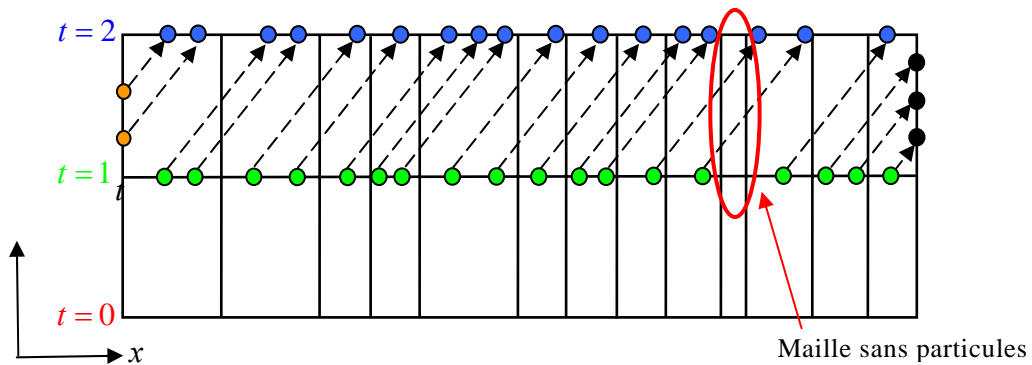


Figure-9. Défaut de masse du au maillage.

Afin d'illustrer le problème cité précédemment, nous allons reprendre le premier cas-test étudié avec la méthode VD dont les paramètres sont dans le tableau-1 dans un domaine que l'on discrétise suivant deux maillages différents :

- un maillage (A) composé de 100 mailles uniformes ;
- un maillage (B) avec 100 mailles non uniformes à l'image de la figure-9.

Pour les 2 maillages, le nombre de particules par maille est fixé à 2 pour obtenir un total de $N_p = 200$ et le pas de temps est fixé à $\Delta t = 1.10^{-1}$ s. Les résultats obtenus sont représentés sur la figure-10.

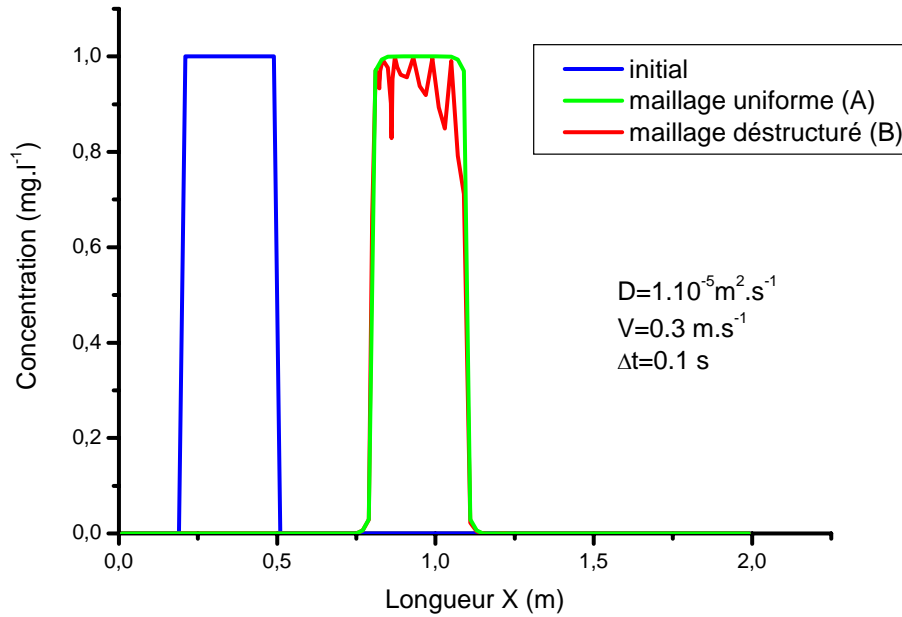


Figure-10. Comparaison de la MOC pour différents maillages.

D'après cette figure, on remarque l'apparition d'oscillations non physiques dans le cas de maillage non uniforme. En augmentant le nombre de particules préalablement définies, on peut diminuer ou supprimer ces oscillations, mais le temps de calcul sera plus important. D'autre part, et d'après les diverses simulations que nous avons effectuées, l'utilisation de plusieurs pas de temps ne crée pas pour autant de la diffusion numérique.

3.4.2 La méthode modifiée des caractéristiques (MMOC)

C'est pour pallier les oscillations rencontrées avec la MOC dans les cas de maillages non structurés que *Douglas and Russell* [1982] ont proposé une modification dans l'implémentation de la méthode des caractéristiques. Le nouveau schéma assure la présence d'au moins une particule dans chaque maille même dans le cas de maillages non uniformes. Contrairement à la MOC, seulement deux étapes sont nécessaires pour sa mise en œuvre :

Backward-tracking

A l'inverse de la MOC, les particules sont ramenées de leurs positions finales à leurs positions initiales. Pour cela, on définit, pour chaque élément E , une particule P ayant pour coordonnées x_p^{n+1} correspondant au centre de l'élément E (dans le cas où l'on a 1 particule par maille), et un poids W^P égal à la longueur Δx_E de l'élément E dans laquelle elle se trouve. Le backtracking consiste donc à déterminer les positions initiales x_p^n de toutes ces particules telles que :

$$x_p^n = x_p^{n+1} - V\Delta t \quad (3.19)$$

Une fois les positions initiales x_p^n déterminées, on interpole les concentrations initiales de toutes les particules à l'aide des concentrations des nœuds voisins selon la relation :

$$C_p^n = (1-\alpha)C_{1,E}^n + \alpha C_{2,E}^n \quad (3.20)$$

Avec
$$\alpha = \frac{x_p^n - x_{1,E}}{x_{2,E} - x_{1,E}} \quad (3.21)$$

où $x_{1,E}$ et $x_{2,E}$ sont les abscisses des deux nœuds de l'élément E ;

$C_{1,E}^n$ et $C_{2,E}^n$ les concentrations initiales des deux nœuds de l'élément E .

La concentration ainsi interpolée devient la concentration par advection de la particule et donc la concentration de l'élément E dans le cas où l'on a 1 particule par maille.

Les particules qui viennent à la frontière ($x=0$) constituent la masse entrante dans le domaine dans le cas où il y a une condition aux limites imposée.

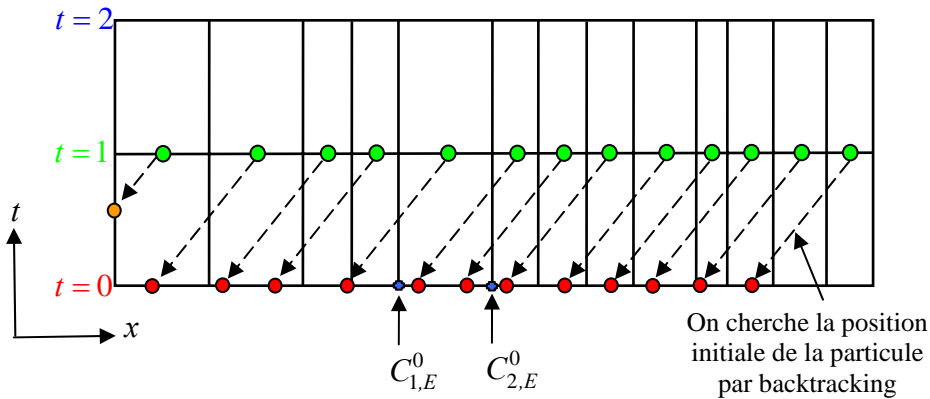


Figure-11. Initialisation et backtracking avec la MMOC.

La MMOC permet de surmonter le problème rencontré avec la MOC sur des maillages non uniformes car aucune maille ne fait l'objet d'un défaut de masse du à l'absence de particules (figure-11).

Calcul de la dispersion

Le calcul de la dispersion se fait par un schéma DF comme il est présenté dans l'équation (3.15). Le système ainsi formé est similaire à celui obtenu avec la MOC. Pour les pas de temps suivants, aucune mise à jour des concentrations des particules n'est nécessaire car celles obtenues après le calcul de la dispersion correspondent aux concentrations moyennes dans tous les éléments du maillage. De nouvelles particules sont alors placées au centre des mailles pour le pas de temps suivant. On revient alors à la première étape avec le « backtracking » pour déterminer les positions de départ des particules. Leurs nouvelles concentrations sont alors

obtenues par une nouvelle interpolation des concentrations aux nœuds selon la relation (3.20).

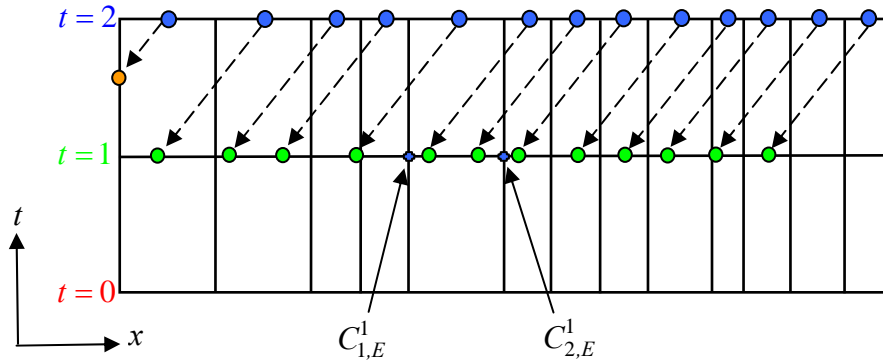


Figure-12. Deuxième pas de temps de calcul avec la MMOC.

Avantages et inconvénients de la MMOC

Nous reprenons le cas-test précédent sur le maillage (B) mais avec quatre pas de temps différents ($\Delta t = 1.10^{-1} s; 5.10^{-1} s; 1 s; 2 s$). Les autres paramètres sont inchangés (Tableau-1).

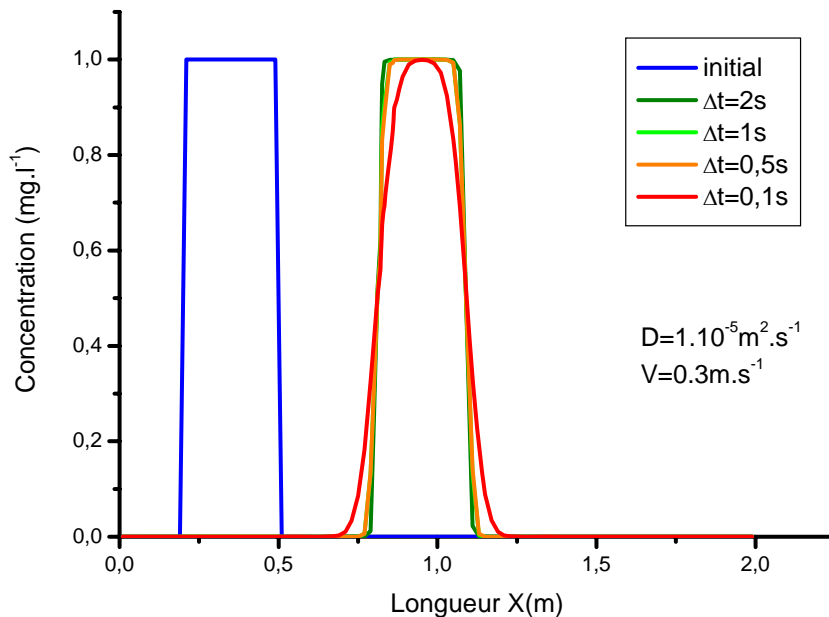


Figure-13. Comparaison de la MMOC pour différents pas de temps.

Les oscillations observées avec la MOC (figure-10) ont disparu avec la MMOC. En effet, malgré un maillage non structuré, l’approche « backtracking » nous assure la présence d’au moins une particule dans chaque élément du maillage évitant ainsi tout défaut de masse. Cependant, on observe bien que le front commence à s’étaler lorsqu’on diminue le pas de temps (figure-13) : ce phénomène est dû à la diffusion numérique qui est l’inconvénient majeur de la MMOC. Cette erreur purement numérique est due aux interpolations faites à chaque pas de temps lorsque l’on

calcule les concentrations initiales des particules. Une interpolation d'ordre supérieur permet de limiter cette diffusion numérique mais introduit en contrepartie des oscillations numériques au niveau des fronts de concentration [Cheng *et al.*, 1984].

La MOC et la MMOC sont des méthodes efficaces pour la résolution de l'équation d'advection-dispersion. Elles sont faciles à implémenter et permettent l'utilisation de grands pas de temps.

La MOC peut être sujette à des oscillations non physiques sur des problèmes avec un maillage à géométrie variable. Ceci peut être évité par l'augmentation du nombre de particules mais engendre un temps de calcul important. Ce problème limite ainsi l'application de cette méthode à des problèmes en 2D avec des maillages rectangulaires uniformes.

La MMOC permet à la fois d'éviter les oscillations non physiques et un gain de temps CPU car, même avec des maillages non uniformes, une particule par maille peut suffire pour la résolution des problèmes. Son principal inconvénient réside dans la diffusion numérique engendrée par les interpolations lorsque l'on utilise plusieurs pas de temps.

Toutefois, les méthodes ELM ne sont pas basées sur le principe de la conservation de la masse par le fait du traitement séparé des termes d'advection et de dispersion. Ceci peut engendrer, dans certains cas, des erreurs sur le bilan de masse. De plus, la formulation des méthodes ELM ne permet pas de traiter de manière rigoureuse toutes les conditions aux limites [Healy and Russell, 1993]. C'est pour pallier ces problèmes qu'une nouvelle classe de méthode a vu le jour au début des années 1990, les méthodes ELLAM (Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method).

3.5 Les méthodes ELLAM

La première méthode ELLAM a été développée par Celia *et al.* [1990a]. Elle combine l'idée d'une fonction test optimale et des méthodes ELM en choisissant une fonction test $\omega_i = \omega_i(x, t)$ qui dépend de l'espace et du temps. Les fonctions test sont définies comme étant solution de l'équation de l'adjoint local. Ainsi, cette formulation est une amélioration des méthodes ELM classiques car elle conserve la masse et permet d'intégrer correctement toutes les conditions aux limites.

Nous rappelons l'équation d'advection-dispersion qui décrit le transport non réactif en milieu poreux :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V}C) - \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla C) = 0 \quad (3.22)$$

avec \mathbf{V} le champ de vitesse, \mathbf{D} le tenseur de dispersion, C la concentration en soluté. Cette équation est développée en détails dans le chapitre-1.

Afin de décrire l'idée générale de la méthode ELLAM, on considère le cas du transport linéaire unidimensionnel. En 1D, l'équation d'advection-dispersion est donnée par:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(VC)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) = 0 \quad (3.23)$$

avec V la vitesse d'écoulement unidimensionnelle et D le coefficient de dispersion.

On cherche à résoudre ce problème sur un domaine $\Omega_{x,t} = [0, L] \times [0, T]$ où L est la longueur du domaine et T la durée simulée. Des conditions initiales ainsi que des conditions aux limites sont associés au problème décrit par l'équation (3.23).

Contrairement aux méthodes ELM, l'utilisation des fonctions test $\omega_i = \omega_i(x, t)$ permet de résoudre les termes d'advection et de dispersion de manière simultanée sans séparation d'opérateurs. Afin de simplifier la présentation, nous prenons un maillage régulier avec un pas constant Δx .

3.5.1 Définition des fonctions test

L'idée des méthodes ELLAM consiste à utiliser des fonctions test discontinues en temps et définies uniquement sur le seul pas de temps $[t^n, t^{n+1}]$ telles que :

$$\omega_i(x, t) = \begin{cases} \omega_i & t^n \leq t \leq t^{n+1} \\ 0 & t < t^n \text{ et } t > t^{n+1} \end{cases} \quad (3.24)$$

A $t = t^{n+1}$, la fonction $\omega_i(x, t^{n+1})$ notée ω_i^{n+1} peut correspondre soit à :

- la *fonction linéaire* des éléments finis et dans ce cas on parle de FE-ELLAM. La fonction ω_i^{n+1} est définie sur le nœud i par :

$$\omega_i^{n+1} = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} & \text{si } x_{i-1} \leq x \leq x_{i+1} \\ \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} & \text{si } x_i \leq x \leq x_{i+1} \\ 0 & \text{si } x < x_i \text{ ou } x > x_{i+1} \end{cases} \quad (3.25)$$

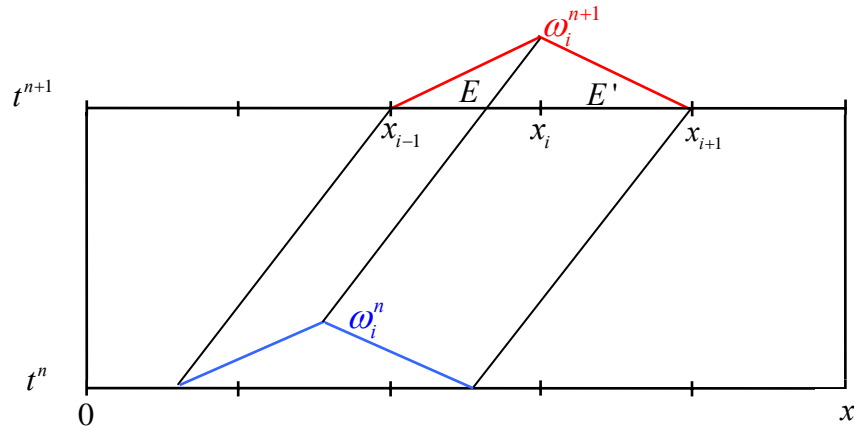


Figure-14. Fonction test pour la méthode FE-ELLAM.

- o la *fonction porte* des volumes finis (1 sur l'élément et 0 ailleurs) et dans ce cas on parle de FV-ELLAM [Healy and Russell, 1993]. La fonction ω_i^{n+1} est définie sur chaque maille de la façon suivante :

$$\omega_i^{n+1} = \begin{cases} 1 & \text{si } x_{i-1/2} \leq x \leq x_{i+1/2} \\ 0 & \text{si } x < x_{i-1/2} \text{ ou } x > x_{i+1/2} \end{cases} \quad (3.26)$$

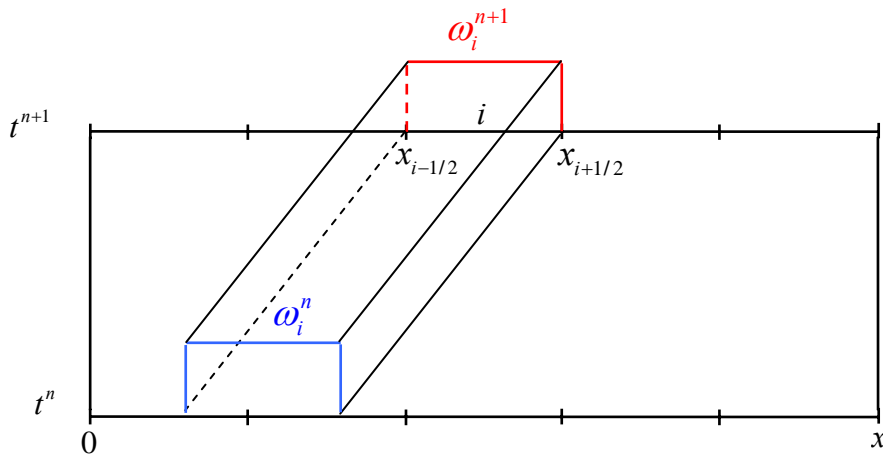


Figure-15. Fonction test pour la méthode FV-ELLAM.

Les travaux de Russell and Celia [2002] ont montré que l'approche FE-ELLAM est préférable à l'approche FV-ELLAM, car elle est moins sensible aux oscillations. Dans le reste de ce chapitre, tous les développements seront faits avec les fonctions linéaires FE-ELLAM.

3.5.2 Écriture variationnelle

Les fonctions test ω_i étant définies en espace et en temps, la formulation variationnelle s'obtient en effectuant une double intégrale (espace+temps) de l'équation (3.23).

$$\int_0^T \int_{\Omega} \left[\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(VC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \right] \omega_i(x,t) dx dt = 0 \quad (3.27)$$

La fonction $\omega_i(x,t)$ étant nulle à l'extérieur de l'intervalle $[t^n, t^{n+1}]$, la formulation variationnelle peut s'écrire de la façon suivante :

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \left[\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(VC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \right] \omega_i(x,t) dx dt = 0 \quad (3.28)$$

Le développement de la dérivée spatiale dans l'équation (3.28) nous donne :

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \left[\frac{\partial C}{\partial t} \omega_i + \frac{\partial(VC)}{\partial x} \omega_i - \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \omega_i \right] dx dt = 0 \quad (3.29)$$

avec $\omega_i = \omega_i(x,t)$. Les trois dérivées de l'équation (3.29) sont calculées de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} \omega_i &= \frac{\partial(C\omega_i)}{\partial t} - C \frac{\partial \omega_i}{\partial t} \\ \frac{\partial(VC)}{\partial x} \omega_i &= \frac{\partial(VC\omega_i)}{\partial x} - VC \frac{\partial \omega_i}{\partial x} \\ - \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \omega_i &= - \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \omega_i \right) + D \frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial \omega_i}{\partial x} \end{aligned} \quad (3.30)$$

En substituant les relations de (3.30) dans l'équation (3.29), on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \left[\frac{\partial(C\omega_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(VC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \omega_i \right) + D \frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial \omega_i}{\partial x} \right] dx dt \\ - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \omega_i}{\partial t} + V \frac{\partial \omega_i}{\partial x} \right) C dx dt = 0 \end{aligned} \quad (3.31)$$

La deuxième partie de l'équation (3.31) contient la partie hyperbolique que l'on peut éliminer avec la méthode ELLAM. En effet, on choisit les fonctions test ω_i de telle manière à vérifier l'équation d'adjoint local suivante :

$$\frac{\partial \omega_i}{\partial t} + V \frac{\partial \omega_i}{\partial x} = 0 \quad (3.32)$$

Rappelons que la dérivée particulière est donnée par :

$$\frac{d\omega_i}{dt} = \frac{\partial \omega_i}{\partial t} + V \frac{\partial \omega_i}{\partial x} \quad (3.33)$$

La fonction ω_i est donc constante le long de la caractéristique donnée par :

$$\frac{dx}{dt} = V \quad (3.34)$$

La formulation variationnelle (3.31) devient alors :

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \left[\frac{\partial(C\omega_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(VC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \omega_i \right) + D \frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial \omega_i}{\partial x} \right] dx dt = 0 \quad (3.35)$$

Cette équation est composée de trois intégrales :

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \frac{\partial(C\omega_i)}{\partial t} dx dt \quad (3.36)$$

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} D \frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial \omega_i}{\partial x} dx dt \quad (3.37)$$

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(VC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \omega_i \right) dx dt \quad (3.38)$$

La première intégrale (3.36) peut s'écrire :

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \frac{\partial(C\omega_i)}{\partial t} dx dt = \int_{\Omega} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{\partial(C\omega_i)}{\partial t} dt dx = \int_{\Omega} C^{n+1} \omega_i^{n+1} dx - \int_{\Omega} C^n \omega_i^n dx \quad (3.39)$$

où C^{n+1} (resp. C^n) est la concentration au pas de temps $(n+1)$ (resp. n) et ω_i^{n+1} (resp. ω_i^n) la fonction test au pas de temps $(n+1)$ (resp. n).

L'équation (3.39) fait apparaître les termes correspondant à la masse au nouveau pas de temps $(n+1)$ et à la masse au pas de temps (n) .

La deuxième intégrale (3.37) est calculée numériquement par la méthode d'Euler backward en un seul point :

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} D \frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial \omega_i}{\partial x} dx dt = \Delta t \int_{\Omega} D \frac{\partial C^{n+1}}{\partial x} \frac{\partial \omega_i^{n+1}}{\partial x} dx \quad (3.40)$$

où $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ représente le pas de temps.

Le terme de l'équation (3.40) correspond à l'échange par dispersion.

Enfin, la troisième intégrale (3.38) est calculée de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(VC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \omega_i \right) dx dt &= \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left[\left(VC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \omega_i \right]_0^L dt \\ &= \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} \left(VC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \omega_i \Big|_{x=L} dt \right) - \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} \left(VC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \omega_i \Big|_{x=0} dt \right) \end{aligned} \quad (3.41)$$

Les termes de l'équation (3.41) représentent la masse qui entre ou qui sort par les frontières entre les instants (n) et ($n+1$).

L'équation (3.35) peut alors se réécrire :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} C^{n+1} \omega_i^{n+1} dx + \Delta t \int_{\Omega} D \frac{\partial C^{n+1}}{\partial x} \frac{\partial \omega_i^{n+1}}{\partial x} dx + \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} \left(VC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \omega_i \Big|_{x=L} dt \right) \\ - \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} \left(VC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \omega_i \Big|_{x=0} dt \right) = \int_{\Omega} C^n \omega_i^n dx \end{aligned} \quad (3.42)$$

3.5.3 Calcul de l'intégrale de masse au pas de temps ($n+1$)

En utilisant les fonctions linéaires de l'approche FE-ELLAM, on peut décomposer cette intégrale en deux parties suivants les intervalles $[x_{i-1}, x_i]$ et $[x_i, x_{i+1}]$:

$$\int_{\Omega} C^{n+1} \omega_i^{n+1} dx = \int_{x_{i-1}}^{x_i} C^{n+1} \omega_i^{n+1} dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} C^{n+1} \omega_i^{n+1} dx \quad (3.43)$$

Sur chaque intervalle, la concentration C^{n+1} est une combinaison linéaire des concentrations aux nœuds.

$$C^{n+1} = C_{i-1} \omega_{i-1}^{n+1} + C_i \omega_i^{n+1} \quad \text{sur } [x_{i-1}, x_i] \quad (3.44)$$

L'équation (3.43) devient alors :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} C^{n+1} \omega_i^{n+1} dx &= C_{i-1} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \omega_{i-1}^{n+1} \omega_i^{n+1} dx + C_i \int_{x_{i-1}}^{x_i} \omega_i^{n+1} \omega_i^{n+1} dx \\ &+ C_i \int_{x_i}^{x_{i+1}} \omega_i^{n+1} \omega_i^{n+1} dx + C_{i+1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \omega_{i+1}^{n+1} \omega_i^{n+1} dx \end{aligned} \quad (3.45)$$

Les intégrales de la fonction test ω_i^{n+1} sont calculées analytiquement en utilisant l'équation (3.25) :

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \omega_{i-1}^{n+1} \omega_i^{n+1} dx &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} \omega_{i+1}^{n+1} \omega_i^{n+1} dx = \frac{\Delta x}{6} \\ \int_{x_{i-1}}^{x_i} \omega_i^{n+1} \omega_i^{n+1} dx &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} \omega_i^{n+1} \omega_i^{n+1} dx = \frac{\Delta x}{3} \end{aligned} \quad (3.46)$$

En substituant les relations (3.46) dans l'équation (3.45), il vient :

$$\int_{\Omega} C^{n+1} \omega_i^{n+1} dx = \frac{\Delta x}{6} C_{i-1}^{n+1} + \frac{2\Delta x}{3} C_i^{n+1} + \frac{\Delta x}{6} C_{i+1}^{n+1} \quad (3.47)$$

Ce calcul est le même que celui pour la méthode standard des éléments finis.

3.5.4 Calcul de l'intégrale d'échange par dispersion

Avec l'approche FE-ELLAM, l'intégrale de dispersion est divisée en deux parties :

$$\Delta t \int_{\Omega} D \frac{\partial C^{n+1}}{\partial x} \frac{\partial \omega_i^{n+1}}{\partial x} dx = D_E \Delta t \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{\partial C^{n+1}}{\partial x} \frac{\partial \omega_i^{n+1}}{\partial x} dx + D_{E'} \Delta t \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial C^{n+1}}{\partial x} \frac{\partial \omega_i^{n+1}}{\partial x} dx \quad (3.48)$$

avec D_E (resp. $D_{E'}$) le coefficient de dispersion sur l'intervalle $[x_{i-1}, x_i]$ (resp. $[x_i, x_{i+1}]$).

Les deux intégrales de l'équation (3.48) sont calculées analytiquement. On obtient alors :

$$\Delta t \int_{\Omega} D \frac{\partial C^{n+1}}{\partial x} \frac{\partial \omega_i^{n+1}}{\partial x} dx = -\frac{D_E \Delta t}{\Delta x} C_{i-1}^{n+1} + \frac{D_E \Delta t}{\Delta x} C_i^{n+1} + \frac{D_{E'} \Delta t}{\Delta x} C_i^{n+1} - \frac{D_{E'} \Delta t}{\Delta x} C_{i+1}^{n+1} \quad (3.49)$$

Dans le cas d'un coefficient de dispersion constant ($D_E = D_{E'} = D$), l'équation (3.49) devient :

$$\Delta t \int_{\Omega} D \frac{\partial C^{n+1}}{\partial x} \frac{\partial \omega_i^{n+1}}{\partial x} dx = \frac{D \Delta t}{\Delta x} (-C_{i-1}^{n+1} + 2C_i^{n+1} - C_{i+1}^{n+1}) \quad (3.50)$$

3.5.5 Calcul de l'intégrale de masse au pas de temps (n)

Les difficultés rencontrées avec les ELLAM sont liées essentiellement à l'approximation de l'intégrale de masse au pas de temps (n). Le calcul de cette intégrale nécessite la connaissance de la concentration C^n et des fonctions test ω_i^n .

Au pas de temps (n), le calcul de ω_i^n se fait par translation de ω_i^{n+1} de t^{n+1} à t^n le long des caractéristiques et la concentration est une fonction linéaire de l'espace.

Le fait que les pieds des caractéristiques ne coïncident pas forcément avec les nœuds du maillage au temps (n) rend difficile le calcul de ce terme. Pour des problèmes multidimensionnels et/ou des maillages irréguliers, des méthodes d'intégration numériques sont mis en œuvre pour approcher cette intégrale. Deux approches peuvent être utilisées pour le calcul de la masse au pas de temps (n) :

Approche backward-tracking

Cette approche s'apparente à la philosophie de la MMOC à la différence que ce sont les fonctions test que l'on ramène au pas de temps (n) et non les particules. Elle consiste dans un premier temps à faire le backtracking pour chaque fonction test ω_i^{n+1} afin d'avoir son image à t^n , puis dans un second temps à calculer l'intégrale de masse au pas de temps (n) en utilisant une intégration numérique sur cette image (figure-16).

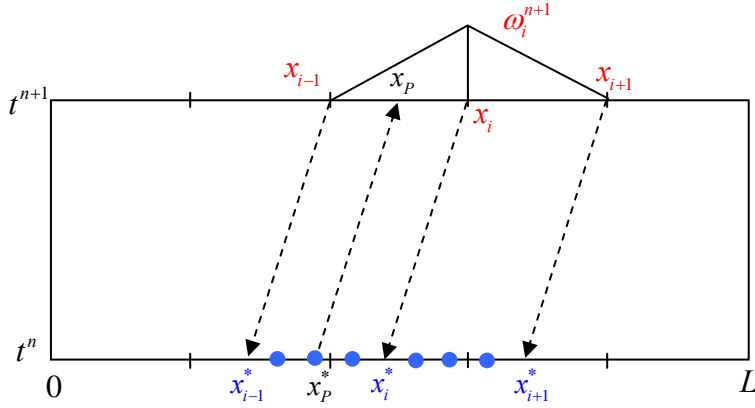


Figure-16. Les points d'intégration pour l'approche backward-tracking.

Soit x_{i-1}^* , x_i^* et x_{i+1}^* les images respectives par le backtracking de x_{i-1} , x_i et x_{i+1} . Les points d'intégration sont définis sur les intervalles $[x_{i-1}^*, x_i^*]$ et $[x_i^*, x_{i+1}^*]$ (figure-16).

Dans le cas simple, la relation entre x_i^* et x_i est donnée par:

$$x_i^* = x_i - V(t^{n+1} - t^n) \quad (3.51)$$

Donc l'intégrale de masse au pas de temps (n) est calculée de la façon suivante :

$$\int_{\Omega} C^n \omega_i^n dx = \sum_{P=1}^{N_p(E^*)} W^P C^n(x_p^*) \omega_i^n(x_p^*) \quad (3.52)$$

Avec $N_p(E^*)$ le nombre des points d'intégration sur l'intervalle $[x_{i-1}^*, x_{i+1}^*]$, W^P les poids d'intégration définis par la méthode d'intégration (3.52), $C^n(x_p^*)$ (resp. $\omega_i^n(x_p^*)$) la concentration (resp. la valeur de la fonction $\omega_i(x, t)$) du point d'intégration P au pas de temps (n) .

Les concentrations aux points d'intégration sont calculées par une interpolation des concentrations aux nœuds et $\omega_i^n(x_p^*)$ est donné par :

$$\omega_i^n(x_p^*) = \omega_i^{n+1}(x_p) \quad (3.53)$$

L'inconvénient de cette approche est que la géométrie de l'image au temps (n) peut être difficile à trouver dans les cas 2D ou 3D surtout quand on atteint les limites du domaine lors du backtracking.

Approche forward-tracking

L'approche forward-tracking a été proposée par *Russell and Trujilo* [1990] et a été utilisé en 1D par *Healy and Russell* [1993].

L'idée consiste à répartir les points d'intégration au pas de temps (n) et à faire du forward-tracking jusqu'au pas de temps ($n+1$) comme avec la MOC.

Il faut donc commencer par définir des points d'intégration au pas de temps (n), puis faire le forward-tracking de ces particules de t^n à t^{n+1} . Ensuite les particules qui arrivent dans l'élément E (resp. E') seront utilisées pour calculer les intégrales des fonctions test ω_{i-1} et ω_i (resp. ω_i et ω_{i+1}) (figure -17).

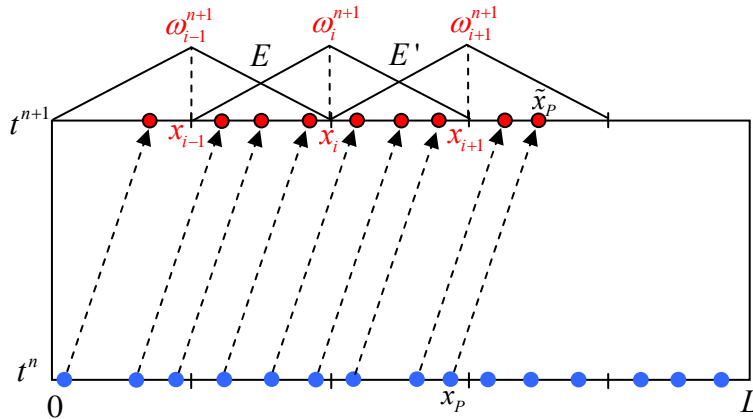


Figure-17. Les points d'intégration pour l'approche forward-tracking.

L'intégrale de masse au pas de temps (n) d'une fonction test ω_i sera alors donnée par :

$$\int_{\Omega} C^n \omega_i^n dx = \sum_{P=1}^{N_p(E+E')} W^P C^n(x_p) \omega_i^n(x_p) = \sum_{P=1}^{N_p(E+E')} W^P C^n(x_p) \omega_i^{n+1}(\tilde{x}_p) \quad (3.54)$$

Avec $N_p(E+E')$ le nombre des points d'intégration qui arrivent dans les éléments E et E' compris entre les nœuds x_{i-1} et x_{i+1} , W^P les poids d'intégration définis par la méthode d'intégration, \tilde{x}_p l'image de x_p par le forward-tracking et $C^n(x_p)$ la concentration du point d'intégration P au pas de temps (n). Cette concentration est calculée par interpolation des concentrations aux nœuds voisins.

3.5.6 Calcul de la masse entrante par la frontière

La masse entrante par la frontière amont du domaine est donnée par l'intégrale suivante :

$$q_{in} = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left(VC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \omega_i \Big|_{x=0} dt \quad (3.55)$$

Cette intégrale contient la masse qui entre par advection et dispersion. Plusieurs cas (concentration ou flux total imposé) peuvent alors être traités avec les ELLAM.

Prenons le cas d'une condition de Dirichlet, l'équation (3.55) devient alors:

$$q_{in} = \int_{t^n}^{t^{n+1}} VC(0,t) \omega_i(0,t) dt \quad (3.56)$$

En notant C^{inj} la concentration imposée à l'entrée du domaine, l'équation (3.56) s'écrit :

$$q_{in} = VC^{inj} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \omega_i(0,t) dt \quad (3.57)$$

Cette intégrale peut être calculée analytiquement en écrivant l'expression explicite de la fonction $\omega_i(0,t)$ en fonction du temps [Celia et al., 1990a].

Pour les problèmes de transport multidimensionnels à vitesse variable et/ou maillage irrégulier, le calcul analytique de l'intégrale (3.57) devient compliqué. Des méthodes d'intégration numériques sont utilisées pour approcher cette intégrale. Le calcul numérique se fait de la même façon que l'intégrale de masse au pas de temps (n) avec le forward-tracking ou le backward-tracking.

Approche backward-tracking

L'intégrale de masse entrante est non nulle pour les fonctions test ω_i qui ont au moins une caractéristique qui touche la frontière.

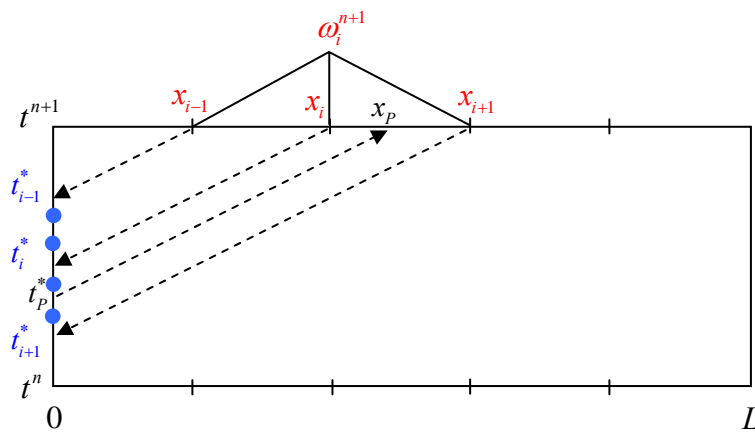


Figure-18. Les points d'intégration utilisés par l'approche backward-tracking pour le calcul de l'intégrale de masse entrante.

où $N_p(E + E')$ est le nombre de points d'intégration qui arrivent dans l'élément E ;

W_*^p sont les poids des points d'intégration sur l'axe de temps ;

\tilde{x}_p est l'image de t_p par le forward-tracking.

3.5.7 Calcul de la masse sortante par la frontière

La masse sortante par la frontière en aval du domaine est donnée par l'intégrale suivante:

$$q_{out} = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left(VC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \omega_i \Big|_{x=L} dt \quad (3.61)$$

Dans les applications, nous avons souvent un flux dispersif nul, l'intégrale de la masse sortante devient:

$$q_{out} = \int_{t^n}^{t^{n+1}} VC \omega_i(L, t) dt \quad (3.62)$$

Cette intégrale est nulle pour toutes les fonctions test sauf la dernière (la fonction test définie sur le dernier nœud). Elle peut être calculée numériquement en définissant des points d'intégration sur l'axe de temps (à la frontière avale du domaine).

Cependant, *Younes et al.* [2006a] suggèrent que dans le cas d'un flux dispersif nul à la sortie du domaine, le calcul de cette intégrale n'est pas nécessaire. En effet, cette intégrale se simplifie avec une partie de l'intégrale de masse au pas de temps (n).

En écrivant l'équation (3.42) sur le dernier nœud, il vient :

$$\int_{\Omega} C^{n+1} \omega_{Nn}^{n+1} dx + \Delta t \int_{\Omega} D \frac{\partial C^{n+1}}{\partial x} \frac{\partial \omega_{Nn}^{n+1}}{\partial x} dx + \int_{t^n}^{t^{n+1}} VC \omega_{Nn} \Big|_{x=L} dt = \int_{\Omega} C^n \omega_{Nn}^n dx \quad (3.63)$$

En calculant analytiquement l'intégrale de masse au pas de temps ($n+1$) et l'intégrale de dispersion, l'équation (3.63) devient :

$$\frac{\Delta x}{6} C_{Nn-1}^{n+1} + \frac{\Delta x}{3} C_{Nn}^{n+1} + \frac{D\Delta t}{\Delta x} \left(-C_{Nn-1}^{n+1} + C_{Nn}^{n+1} \right) + \int_{t^n}^{t^{n+1}} VC \omega_{Nn} \Big|_{x=L} dt = \int_{\Omega} C^n \omega_{Nn}^n dx \quad (3.64)$$

Le calcul de l'intégrale de masse au pas de temps (n) et l'intégrale de masse sortante s'effectue par l'approche forward-tracking selon la figure-20.

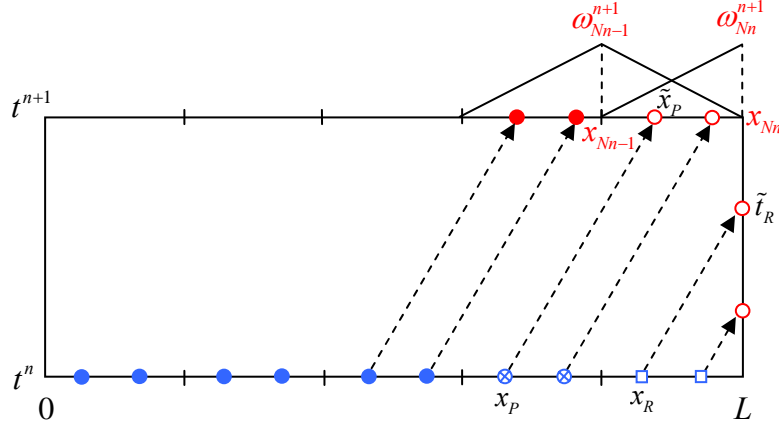


Figure-20. Les points d'intégration nécessaires au calcul de l'intégrale de masse au pas de temps (n) et de la masse sortante.

Les points qui vont servir au calcul de l'intégrale de masse au pas de temps (n) associée à la fonction ω_{Nn} , sont les points qui ont leur image par forward-tracking sur l'intervalle $[x_{Nn-1}, x_{Nn}]$ (les points \otimes) ou sur l'axe du temps à la frontière en aval du domaine (les points \square).

Cette intégrale est ainsi donnée par :

$$\int_{\Omega} C^n \omega_{Nn}^n dx = \sum_{P=1}^{N_P} W^P C^n(x_P) \omega_{Nn}(\tilde{x}_P, t^{n+1}) + \sum_{R=1}^{N_R} W^R C^n(x_R) \omega_{Nn}(L, \tilde{t}_R) \quad (3.65)$$

où N_P (resp. N_R) est le nombre des points d'intégration (\otimes) (resp. \square) ;

\tilde{x}_P (resp. \tilde{t}_R) est l'image de x_P (resp. x_R) ;

W^P et W^R sont respectivement les poids d'intégration pour les points (\otimes) et (\square).

L'intégrale de masse sortante peut être calculée numériquement en utilisant les images des points d'intégration (\square) :

$$\int_{\Omega} VC \omega_i \Big|_{x=L} dt = V \sum_{R=1}^{N_R} W^R C_{Nn}(\tilde{t}_R) \omega_{Nn}(L, \tilde{t}_R) \quad (3.66)$$

En substituant (3.65) et (3.66) dans (3.64) on obtient l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta x}{6} C_{Nn-1}^{n+1} + \frac{\Delta x}{3} C_{Nn}^{n+1} + \frac{D\Delta t}{\Delta x} \left(-C_{Nn-1}^{n+1} + C_{Nn}^{n+1} \right) + V \sum_{R=1}^{N_R} W^R C_{Nn}(\tilde{t}_R) \omega_{Nn}(L, \tilde{t}_R) \\ = \sum_{P=1}^{N_P} W^P C^n(x_P) \omega_{Nn}(\tilde{x}_P, t^{n+1}) + \sum_{R=1}^{N_R} W^R C^n(x_R) \omega_{Nn}(L, \tilde{t}_R) \end{aligned} \quad (3.67)$$

Cependant, comme on néglige le flux dispersif en sortie, on a la relation :

$$V \sum_{R=1}^{N_R} W^R C_{N_n}(\tilde{t}_R) \omega_{N_n}(L, \tilde{t}_R) = \sum_{R=1}^{N_R} W^R C^n(x_R) \omega_{N_n}(L, \tilde{t}_R) \quad (3.68)$$

car la masse qui sort du domaine correspond à la masse au pas de temps (n) associée aux points d'intégration (\square).

L'équation (3.67) devient alors :

$$\frac{\Delta x}{6} C_{N_{n-1}}^{n+1} + \frac{\Delta x}{3} C_{N_n}^{n+1} + \frac{D\Delta t}{\Delta x} (-C_{N_{n-1}}^{n+1} + C_{N_n}^{n+1}) = \sum_{P=1}^{N_P} W^P C^n(x_P) \omega_{N_n}(\tilde{x}_P, t^{n+1}) \quad (3.69)$$

Cette dernière équation peut être obtenue directement à partir de l'équation (3.64), en annulant l'intégrale de masse sortante et en attribuant aux points qui atteignent la frontière en aval des poids d'intégration nuls.

3.5.8 Les problèmes numériques de la méthode ELLAM

Nous avons vu que les méthodes ELLAM permettent de surmonter les difficultés numériques rencontrés par les méthodes ELM classiques. En effet, grâce à l'utilisation des fonctions test qui dépendent de l'espace et du temps, les termes d'advection et de dispersion sont calculés sans séparation d'opérateurs. De plus, la formulation des ELLAM permet de prendre en compte rigoureusement toutes les conditions aux limites. Par ailleurs, elle permet la résolution de l'équation de transport sans aucune contrainte sur le pas de temps. Cependant, dans sa formulation standard [Celia et al., 1990a], la méthode ELLAM souffre de certains problèmes numériques tels que les oscillations non physiques et la diffusion numérique.

Les oscillations non physiques

Comme avec la MOC, des oscillations peuvent apparaître avec la méthode ELLAM lorsque l'intégrale de masse au pas de temps (n) est déterminée avec l'approche forward-tracking. Ces oscillations sont d'autant plus accentuées sur des maillages non structurés pour des problèmes en 2D.

Ce problème peut être réduit en augmentant le nombre de points d'intégration, ce qui peut être très coûteux en place mémoire et temps de calcul.

Une autre solution est d'utiliser des points stratégiques d'intégration (SSIP) comme avec la MMOC. Les positions des SSIP sont déterminées par backward-tracking du temps ($n+1$) jusqu'au temps (n) [Healy and Russell, 1993 ; Younes and Ackerer, 2005]. Cependant, la difficulté de l'approche par backward-tracking est la détermination de la géométrie au temps (n) surtout lorsque l'on atteint les limites du domaine. Ceci peut engendrer des oscillations non physiques et un schéma non conservatif. Par conséquent, l'approche backward-tracking est considérée non pratique pour les problèmes multidimensionnels [Binning and Celia, 1996 ; Younes and Ackerer, 2005].

Afin d'illustrer nos propos, nous reprenons le cas-test dont les paramètres sont données dans le tableau-1 avec le maillage non structuré B, et nous comparons les

résultats obtenus avec les deux approches forward-tracking et backward-tracking. Nous utilisons le même nombre de particule $N_p = 200$ et un pas de temps $\Delta t = 1$ s.

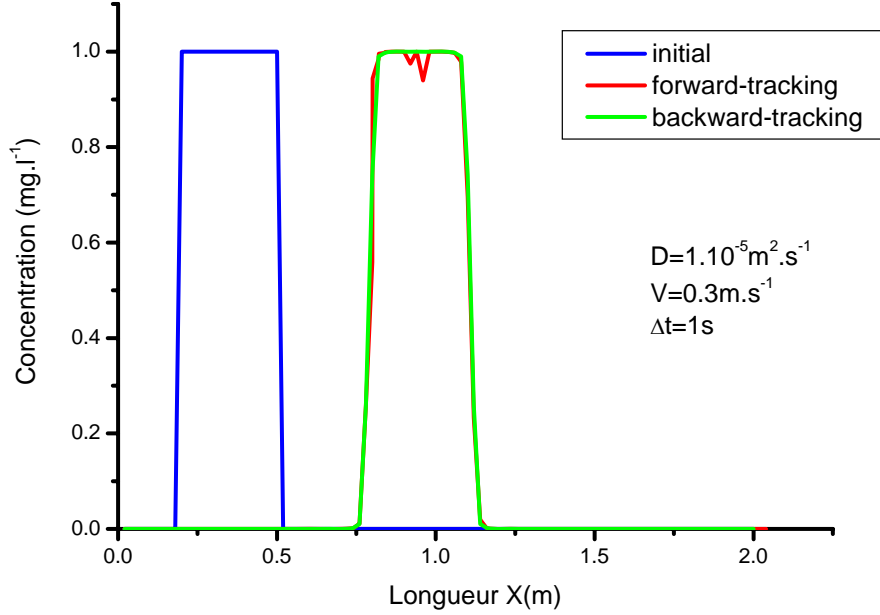


Figure-21. Comparaison des approches forward et backward avec les ELLAM.

Nous pouvons voir sur la figure-21 que des oscillations apparaissent pour l'approche forward-tracking car, comme avec la MOC, on n'est pas certain d'avoir assez de masse dans chaque maille au pas de temps $(n+1)$. L'approche backward-tracking permet de surmonter cette difficulté comme nous l'avons vu avec la MMOC.

Une autre source des oscillations non physiques avec les ELLAM est l'utilisation de la matrice de masse consistante. En effet, cette matrice ne vérifie pas la propriété de M-matrice telle que nous l'avons définie dans le chapitre-2.

La condensation de la masse permet de contrôler les oscillations dues à cet effet en diagonalisant la matrice de masse A_E sur chaque élément E afin d'obtenir un système global avec une matrice vérifiant la propriété M-matrice.

En reprenant l'écriture variationnelle des ELLAM pour des éléments situés loin des frontières, on a :

$$\int_{\Omega} C^{n+1} \omega_i^{n+1} dx + \Delta t \int_{\Omega} D \frac{\partial C^{n+1}}{\partial x} \frac{\partial \omega_i^{n+1}}{\partial x} dx = \int_{\Omega} C^n \omega_i^n dx \quad (3.70)$$

La matrice de masse locale sur l'élément E compris entre les nœuds x_{i-1} et x_i est donnée par :

$$A_E = \begin{bmatrix} \int_E \omega_{i-1} \omega_{i-1} & \int_E \omega_i \omega_{i-1} \\ \int_E \omega_{i-1} \omega_i & \int_E \omega_i \omega_i \end{bmatrix} \quad (3.71)$$

Le calcul de ces intégrales nous donne :

$$A_E = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \end{bmatrix} \quad (3.72)$$

Ainsi, sur un nœud i quelconque, l'équation d'advection-dispersion discrétisée devient :

$$\frac{1}{6}(C_{i-1}^{n+1} + 4C_i^{n+1} + C_{i+1}^{n+1}) + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}(-C_{i-1}^{n+1} + 2C_i^{n+1} - C_{i+1}^{n+1}) = \int_{\Omega} C^n \omega_i^n dx \quad (3.73)$$

La forme diagonalisée de la matrice A_E obtenue par la condensation de la masse est donnée par :

$$A_E = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \quad (3.74)$$

L'équation (3.73) devient alors :

$$C_i^{n+1} + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}(-C_{i-1}^{n+1} + 2C_i^{n+1} - C_{i+1}^{n+1}) = \int_{\Omega} C^n \omega_i^n dx \quad (3.75)$$

On remarque que dans cette dernière équation, la masse est condensée sur le nœud i contrairement à l'équation (3.73) où la masse est répartie sur les nœuds voisins. Cette procédure permet d'avoir une matrice globale vérifiant la propriété de M-matrice.

La diffusion numérique

Il est connu que pour des grands pas de temps les méthodes ELLAM ne présentent pas de problèmes de diffusion numérique. Cependant, lorsqu'il est nécessaire d'utiliser plusieurs pas de temps (écoulement non saturé, couplage chimie,...), les méthodes ELLAM souffrent généralement de la diffusion numérique [Russell, 2002 ; Younes, 2004 ; Younes et al., 2006a]. Cette difficulté s'explique par les interpolations linéaires qui sont effectuées après chaque pas de temps lors de la mise à jour des concentrations des particules. Ainsi, l'utilisation d'un grand nombre de pas de temps engendre un grand nombre d'interpolations ce qui génère une diffusion numérique importante.

La résolution du problème précédent, sur le maillage uniforme A, avec différents pas de temps démontre bien ce phénomène (figure-22). On remarque qu'au fur et à mesure où nous diminuons le pas de temps, comme avec la MMOC, le front s'étale.

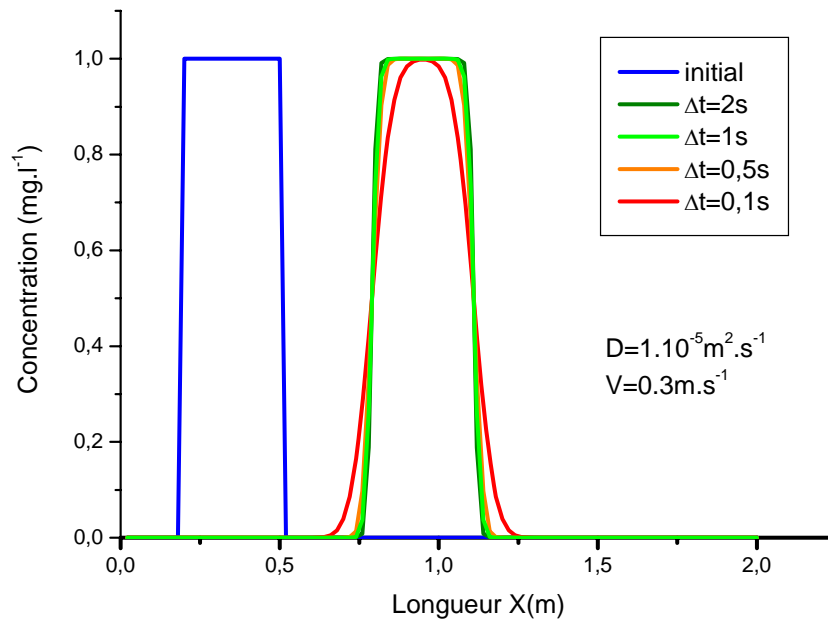


Figure-22. La diffusion numérique avec les ELLAM.

L'une des solutions possibles à ce problème est l'utilisation d'une interpolation d'ordre supérieur qui permet de limiter la diffusion numérique mais peut faire également apparaître des oscillations numériques au niveau des fronts de concentration [Cheng *et al.*, 1984 ; Younes *et al.*, 2006a].

Une autre solution est de combiner les ELLAM avec un maillage mobile [Younes, 2004] mais ce schéma est très difficile à mettre en œuvre pour des problèmes multidimensionnels.

La diffusion numérique peut également provenir de la procédure de condensation de la masse. En effet, malgré qu'elle permet de garantir la stabilité de la solution, la condensation de la masse introduit une diffusion numérique importante avec les ELLAM [Russell, 2002 ; Russell and Binning, 2004 ; Younes *et al.*, 2006a]. Contrairement aux éléments finis, où la condensation de la masse est appliquée aux deux intégrales de masse aux temps (n) et ($n+1$), elle est appliquée uniquement à l'intégrale de masse au temps ($n+1$) avec les ELLAM car l'intégrale de masse au temps (n) est approchée par une intégration numérique. Cette différence de traitement de ces deux termes est à l'origine de la diffusion numérique excessive que l'on ne retrouve pas avec les éléments finis.

3.6 Conclusion

Les méthodes ELLAM sont des méthodes efficaces pour la résolution des problèmes de transport à advection dominante. Ces méthodes se basent sur l'idée des ELM classiques tout en apportant une solution aux problèmes de conservation de masse et de traitement des conditions aux limites par leurs formulations. Cependant, les méthodes ELLAM peuvent être aussi sujettes à des difficultés numériques telles que les oscillations non physiques et la diffusion numérique.

Younes et al. [2006a] ont proposé la formulation C_ELLAM permettant d'éviter les oscillations non physiques pour des maillages triangulaires non structurés. Une procédure limitant la diffusion numérique engendrée par les interpolations successives est également décrite dans les travaux de *Younes et al.* [2008]. Dans le prochain chapitre, nous allons décrire cette nouvelle formulation des ELLAM et l'appliquer pour des problèmes de transport réactif en milieux fortement hétérogènes.

Chapitre 4

La formulation C_ELLAM pour la modélisation du transport réactif

4.1 Introduction

4.2 La formulation C_ELLAM

- 4.2.1 Le backward-tracking
- 4.2.2 Le forward-tracking
- 4.2.3 Mise à jour des concentrations
- 4.2.4 Le code de calcul

4.3 Résolution de l'équation d'advection-dispersion en milieu fortement hétérogène avec la méthode C_ELLAM

- 4.3.1 Introduction
- 4.3.2 The Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method for ADE
- 4.3.3 Efficiency of the scheme in the case of a complex velocity field
 - Test problem definition*
 - The advection dominant case*
 - The advection-diffusion case*
- 4.3.4 Efficiency of the ELLAM in highly heterogeneous domains including injection and pumping wells
- 4.3.5 Conclusion
- 4.3.6 References

4.4 Couplage chimie- transport avec la méthode C_ELLAM

- 4.4.1 Les approches de résolution
 - Approche par séparation d'opérateurs (OS)*
 - Approche globale (GA)*
- 4.4.2 Le couplage C_ELLAM-SNIA

4.5 Modélisation du transport multi-espèces en milieux poreux saturés/non saturés avec la méthode C_ELLAM

- 4.5.1 Introduction
- 4.5.2 The Mathematical Model
- 4.5.3 The Numerical Model
 - The ELLAM Formulation for Transport in the Unsaturated Zone*
 - The Numerical Strategy*
- 4.5.4 Numerical Experiments
 - The Degradation of the Tetrachloroethene PCE*
 - The m-Xylene Degradation in Saturated Flow Regime*
 - The m-Xylene Degradation in Variably Saturated Flow Regime*
- 4.5.5 Conclusion
- 4.5.6 References

4.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous détaillons dans un premier temps la formulation C_ELLAM proposée par *Younes et al.* [2006a] permettant de surmonter les difficultés numériques de la méthode standard [*Celia et al.*, 1990a]. Des améliorations sont, par la suite, apportées au schéma initial pour permettre la résolution du transport en milieux fortement hétérogènes. Enfin, nous couplons le schéma C_ELLAM avec une approche séquentielle non itérative (SNIA) pour la résolution du transport réactif pour des régimes d'écoulement aussi bien saturé que non saturé.

4.1 Introduction

Depuis peu de temps, divers travaux sont apparus dans la littérature traitant du couplage des ELLAM avec de la biodégradation, de la sorption à l'équilibre et de la sorption cinétique. Les différentes approches de résolution présentées par les auteurs peuvent être classées en deux catégories: Approche par séparation d'opérateurs (OS: Operator Splitting) et approche globale (GA: Global Approach). *Celia and Zisman* [1990] ont utilisé les ELLAM pour la modélisation du transport réactif avec un seul composant. *Wang et al.* [1995] et *Vag et al.* [1996] ont traité des problèmes de transport réactif multicomposants en combinant la méthode ELLAM avec une approche GA. Le même problème a été étudié par *Bell and Binning* [2004] mais en combinant les ELLAM avec une approche OS. *Farthing et al.*, [2006a] ont développé une nouvelle formulation en couplant les ELLAM avec une approche GA pour traiter le problème de sorption non linéaire à l'équilibre thermodynamique. Cette formulation a été étendue par *Farthing et al.*, [2006b] pour le traitement du problème de transport avec sorption cinétique.

Rappelons que la méthode ELLAM, sous sa formulation standard, peut souffrir d'oscillations non physiques et de diffusion numérique. Ces deux problèmes peuvent limiter l'utilisation de la méthode ELLAM pour le transport réactif pour les raisons suivantes :

- les *oscillations non physiques* peuvent donner des concentrations négatives qui risquent dans certains cas de générer des valeurs infinies lors de la résolution de l'opérateur de chimie et empêchent ainsi la convergence vers la solution du problème ;
- la non linéarité des processus chimiques impose dans certains cas des petits pas de temps ce qui amplifie la *diffusion numérique* introduite par les interpolations.

Pour pallier ces difficultés, *Younes et al.* [2006a] ont proposé la formulation C_ELLAM. Ce schéma sera développé dans ce chapitre pour la résolution du transport linéaire en milieu fortement hétérogène ainsi que pour le transport réactif, en 2D avec des maillages triangulaires non structurés.

4.2 La formulation C_ELLAM

La philosophie générale de ce schéma consiste à reprendre les idées des méthodes ELM classiques (MOC et MMOC) et d'en tirer les principaux avantages. Sa mise en œuvre peut-être décrite en trois parties :

4.2.1 Le backward-tracking

La première étape consiste à générer une ou plusieurs particules dans chaque maille du domaine à chaque pas de temps de la discrétisation temporelle. A chaque particule P est associé :

- son poids W^P correspondant à la surface $|E|$ de l'élément E divisé par le nombre de particule $N_p(E)$ se trouvant initialement dans l'élément ;
- une position x_p correspondant au centre de la maille dans le cas où l'on a 1 particule par maille ;
- un indice de temps (n_p) correspondant au pas de temps à partir duquel la particule a été ramenée.

Comme avec la MMOC, les particules sont ensuite déplacées par backtracking afin de déterminer leur position initiale ($t=0$). On leur attribue par la suite une concentration initiale C_p^0 par interpolation des concentrations aux nœuds voisins (figure-23).

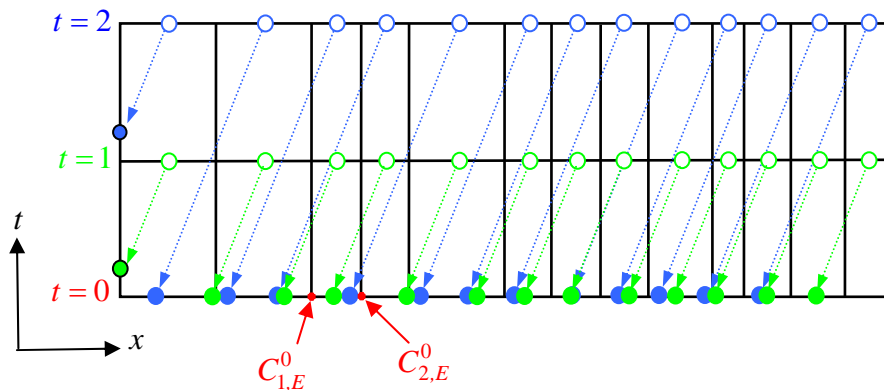


Figure-23. Le backward-tracking avec la méthode C_ELLAM.

Cette étape nous assure ainsi d'avoir au moins une particule dans chaque maille de notre domaine pour chaque pas de temps.

On remarquera que le nombre de particules N_p nécessaires à la résolution du transport est proportionnel (dans le cas où l'on a 1 particule par maille) au nombre de pas de temps $N_{\Delta t}$ multiplié par le nombre d'éléments $N_{\text{éléments}}$ ($N_p = N_{\Delta t} \times N_{\text{éléments}}$). Ce nombre peut vite devenir important lorsque l'on utilise un grand nombre de mailles et plusieurs pas de temps.

4.2.2 Le forward-tracking

Une fois toutes les concentrations initiales obtenues, toutes les particules sont déplacées le long des caractéristiques par forward-tracking jusqu'au premier pas de temps $(n+1)$ (figure-24). Seules les particules ayant pour indice de temps $(n+1)$ sont utilisées dans la résolution du système (3.34).

On obtient ainsi les nouvelles concentrations C_i^{n+1} (après advection et dispersion) sur tous les nœuds i de notre maillage.

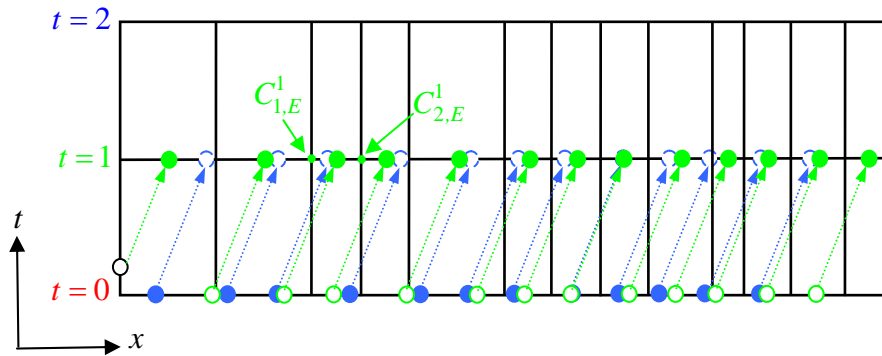


Figure-24. Le forward-tracking avec la méthode C_ELLAM.

Par ailleurs, il est nécessaire de distinguer la variation de concentration due à l'advection et à la dispersion afin de réaliser la troisième étape de l'approche C_ELLAM. Pour ce faire, l'équation (3.34) est résolue sans le terme de dispersion ($D = 0$) et on obtient ainsi les concentrations aux nœuds par advection pure C_i^{adv} .

La variation par dispersion C_i^{disp} pour chaque nœud i est alors obtenue par la relation :

$$C_i^{disp} = C_i^{n+1} - C_i^{adv} \quad (4.1)$$

4.2.3 Mise à jour des concentrations

Avant de réaliser le prochain pas de temps, une mise à jour des concentrations de toutes les particules qui vont être utilisées pour les pas de temps suivants est effectuée. Cette étape s'apparente à celle que l'on a vue avec la MOC. La variation par dispersion C_p^{disp} de la particule P est obtenue par interpolation des variations par dispersion C_i^{disp} sur les nœuds voisins. La nouvelle concentration de la particule P s'obtient alors par la relation :

$$C_p^{n+1} = C_p^{adv} + C_p^{disp} \quad (4.2)$$

Cette procédure permet ainsi de limiter la diffusion numérique engendrée par les interpolations successives de la méthode standard car avec la formulation C_ELLAM, seule la variation par dispersion est interpolée.

Les particules ayant un indice de temps égal à $(n+1)$ ne sont plus utilisées pour le reste de la simulation ce qui permet de libérer de l'espace mémoire au fur et à mesure de l'avancement de la simulation.

Une fois les concentrations mises à jour, toutes les particules ayant un indice de temps supérieur ou égal à $(n+2)$ sont déplacés le long des caractéristiques par forward-tracking jusqu'au pas de temps $(n+2)$ (figure-25). Le calcul continue ainsi jusqu'à la fin de la simulation.

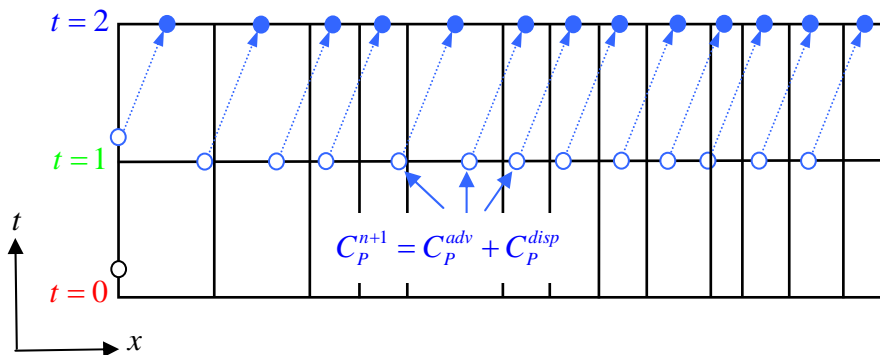


Figure-25. Mise à jour des concentrations et forward-tracking.

Ces différentes étapes permettent ainsi de surmonter les problèmes numériques rencontrés avec la formulation standard de la méthode ELLAM.

Les résultats obtenus par *Younes et al.* [2006a] pour des problèmes de transport linéaire en milieu homogène avec des régimes d'écoulement permanents nous ont motivé à étendre, dans un premier temps, le schéma pour des problèmes en milieux fortement hétérogènes, incluant des termes puits/source. Puis, dans un deuxième temps, pour des problèmes de transport réactif en régime d'écoulement saturé/non saturé.

4.2.4 Le code de calcul

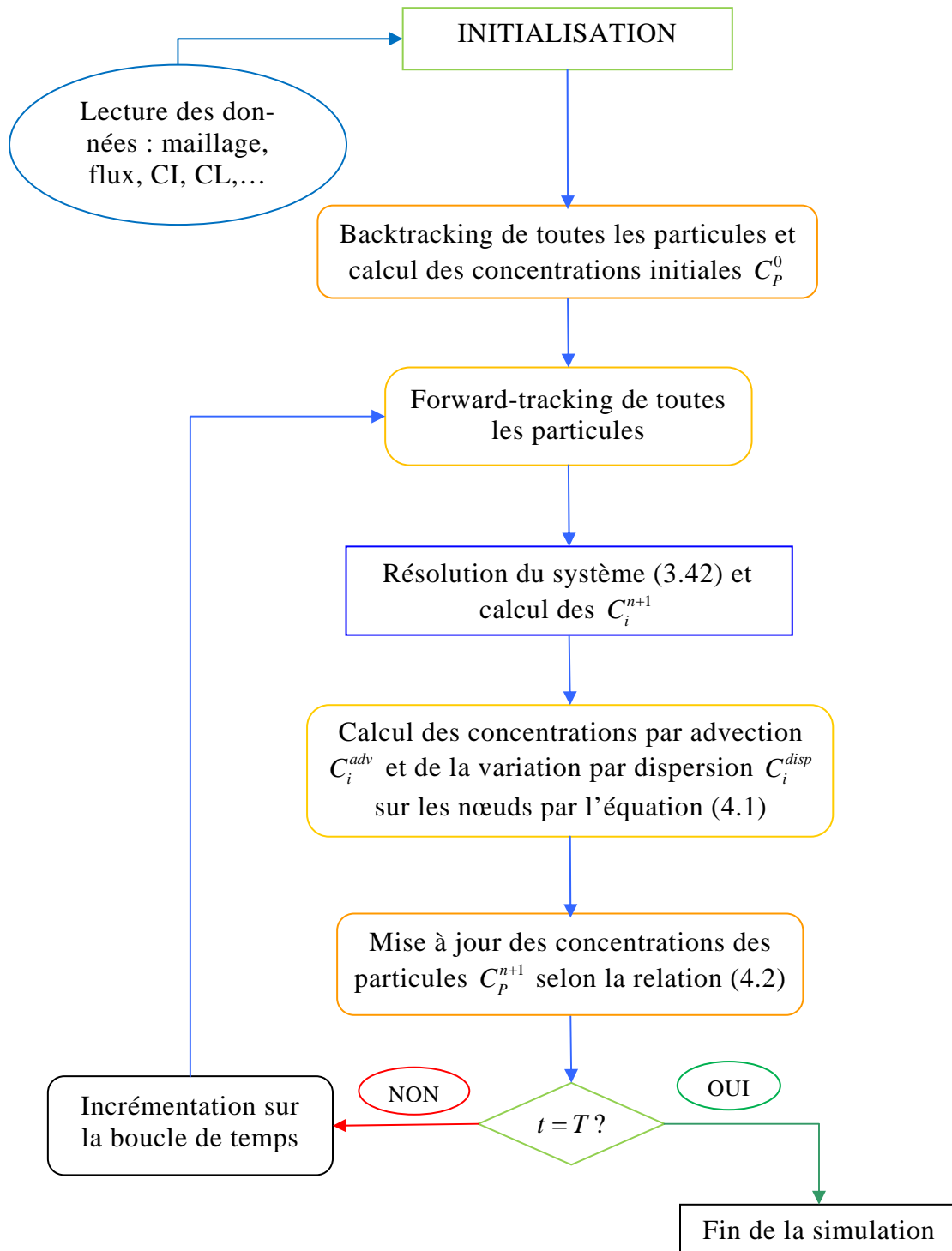


Figure-26. Le code de calcul pour la résolution du transport.

4.3 Résolution de l'équation d'advection-dispersion en milieu fortement hétérogène avec la méthode C_ELLAM

Dans ce travail, on se propose d'analyser l'applicabilité et l'efficacité de la méthode C_ELLAM pour des milieux fortement hétérogènes.

Les résultats démontrent que :

- (i) la formulation C_ELLAM demeure performante malgré la complexité du champ d'écoulement ;
- (ii) lorsque l'on utilise des grands pas de temps, le terme de dispersion doit tenir compte de la dispersion des zones traversées durant le pas de temps considéré. On calcule ainsi un tenseur de dispersion D_{eq} (différent de D^{n+1}) comme étant la moyenne arithmétique des dispersions locales pondérées par le temps de passage dans ces zones ;
- (iii) les besoins en espace mémoire peuvent être réduits en effectuant des interpolations intermédiaires pour les problèmes avec un grand nombre de mailles et de pas de temps ;
- (iv) la méthode C_ELLAM permet de résoudre proprement des problèmes en milieu fortement hétérogène incluant des puits de pompage et d'injection et reste plus efficace que la méthode des Eléments Finis Discontinus de Galerkin même lorsque des petits pas de temps sont nécessaires.

Cette étude a fait l'objet de l'article suivant publié dans *International Journal For Numerical Methods in Fluids*.

Efficiency of the Eulerian–Lagrangian localized adjoint method for solving advection–dispersion equations on highly heterogeneous media

Fanilo Ramasomanana and Anis Younes*,†

*Laboratoire d'Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg, Université de Strasbourg, CNRS/UMR7517,
1 rue Blessig, 67084 Strasbourg, France*

SUMMARY

The Eulerian–Lagrangian Localized Adjoint Method (ELLAM) is well adapted for advection-dominated transport problems. The method can use large time steps because the advection term is accurately approximated without any CFL restriction.

A new formulation of ELLAM was developed by Younes *et al.* (*Adv. Water Resour.* 2006; **29**:1056–1074) for unstructured triangular meshes. This formulation uses only strategic numerical integration points and thus requires a very limited number of integration points (usually 1 per element). To avoid numerical dispersion due to interpolation when several time steps are used, the method continuously tracks characteristics, and only changes due to dispersion are interpolated at each time step.

In this work, we study the applicability and efficiency of this formulation for highly heterogeneous domains. The results show that (i) this formulation remains efficient even for highly heterogeneous domains, (ii) special care must be taken for the approximation of the dispersive term when large time steps are used, (iii) interpolation at intermediate times can be used to reduce memory requirement for problems with a large number of elements and small time steps, and (iv) the method can be used successfully for heterogeneous problems including injection and pumping wells, and remains much more efficient than the discontinuous Galerkin finite element method even when small time steps are required. Copyright © 2011 John Wiley & Sons, Ltd.

Received 15 June 2010; Revised 7 February 2011; Accepted 21 February 2011

KEY WORDS: ELLAM; heterogeneous media; unphysical oscillations; unstructured triangular meshes

1. INTRODUCTION

Tracer transport in porous media is generally described by the following advection–dispersion equation (ADE):

$$L(C) = \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V}C) - \nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla C) = 0 \quad (1)$$
$$\mathbf{x} \in \Omega, \quad t \in [0, T]$$

where $C(\mathbf{x}, t)$ (M/L³) is the unknown concentration at location \mathbf{x} and time t and \mathbf{D} (L²/T) is the dispersion tensor defined by

$$D_{ij} = (\alpha_T |\mathbf{V}| + D_m) \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_i v_j}{|\mathbf{V}|}, \quad i, j = 1, 2 \quad (2)$$

*Correspondence to: Anis Younes, Laboratoire d'Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg, Université de Strasbourg, CNRS/UMR7517, 1 rue Blessig, 67084 Strasbourg, France.

†E-mail: younes@unistra.fr

T is the end of the simulation time period starting at time zero, and Ω is a bounded, polygonal open set of \mathbb{R}^2 . $L(C)$ is the differential operator defined above, V (L/T) is a given fluid velocity of components v_i , α_L and α_T (L) are the longitudinal and transverse dispersivities, δ_{ij} is the Kronecker delta function, and D_m (L²/T) is the molecular diffusion coefficient.

Equation (1) is subject to the initial and boundary conditions

$$\begin{aligned} C(\mathbf{x}, 0) &= C_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega \\ C(\mathbf{x}, t) &= g_1(\mathbf{x}, t) \quad (\mathbf{x} \in \partial\Omega^1, t > 0) \\ (-\mathbf{D} \cdot \nabla C) \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} &= g_2(\mathbf{x}, t) \quad (\mathbf{x} \in \partial\Omega^2, t > 0) \\ (\mathbf{V}C - \mathbf{D} \cdot \nabla C) \cdot \boldsymbol{\eta}_{\partial\Omega} &= g_3(\mathbf{x}, t) \quad (\mathbf{x} \in \partial\Omega^3, t > 0) \end{aligned} \tag{3}$$

where $\partial\Omega^1$, $\partial\Omega^2$, and $\partial\Omega^3$ are partitions of the boundary $\partial\Omega$ of Ω corresponding to Dirichlet, Neumann and total flux boundary conditions, and $\boldsymbol{\eta}_{\partial\Omega}$ is the unit outward normal to the boundary $\partial\Omega$.

Standard Eulerian methods, such as finite elements or finite differences, are not suited for the transport equation (1) if advection is dominant, because they can generate a solution with artificial diffusion and/or unphysical oscillations. The Eulerian–Lagrangian localized adjoint method (ELLAM), introduced by Celia *et al.* [1], is an interesting alternative. The method uses space–time test functions and treats general boundary conditions naturally in the formulation. ELLAM has been used for one-dimensional problems [1–4] and bi-dimensional problems with uniform rectangular meshes [5, 6] and unstructured triangular meshes [7, 8]. A review of the research performed on the ELLAM has been presented by Russell and Celia [9].

In the literature, the ELLAM results are still a matter of discussion due to the following:

- *Non-physical oscillations:* The main reason for these oscillations is that ELLAM is often combined with the forward-tracking approach. Indeed, backtracking requires a significant computational effort to define the geometry at the old time level, which is impractical in two and three dimensions [5]. With the forward-tracking approach, quadrature points and weights are defined at the old time level. On the new time level, the weights will not necessarily sum up to the correct volume for each mesh element, especially for unstructured meshes, which causes unphysical oscillations [8]. Increasing the number of integration points allows achieving sufficient mass for each element at the new time level. This reduces non-physical oscillations and improves the stability of the solution [8]. However, the required number of integration points is problem-dependent and cannot be known *a priori*. This can limit the applicability of the ELLAM, especially for practical heterogeneous cases.
- *Numerical diffusion:* Like all Eulerian–Lagrangian methods, the ELLAM performs well for problems in which they can successfully use a large time step. However, several time steps cause the ELLAM to suffer from numerical diffusion. With ELLAM, the concentration at the foot of the characteristic is required for each time step. Because the location of the foot of the characteristic does not coincide with a grid point, interpolation is required. When many interpolations are used (many time steps), numerical diffusion becomes significant. With higher order interpolation, negative weights will be necessary to avoid numerical dispersion, creating the potential of spurious oscillations [10].

To overcome these difficulties, a new formulation of the ELLAM was developed by Younes *et al.* [7] to solve the ADE on unstructured triangular meshes. The new method requires a limited number of integration points (usually one per element), even for unstructured meshes. Indeed, with this scheme, only strategic numerical integration points are used. The locations of strategic integration points and weights are assigned at the new time level and then backtracked to the old time level without redistributing the weights.

To avoid excessive numerical diffusion when dealing with several time steps, continuous characteristics are used, and only changes due to dispersion are interpolated to obtain the concentration at the foot of each characteristic. This scheme was tested for homogeneous porous media [7].

In this work, we study the applicability and efficiency of this scheme for highly heterogeneous domains and complex situations. In this case, the following questions arise:

- (i) Can we use a single integration point per element in the case of highly heterogeneous domains, or should we use many more integration points? What about the efficiency of the method in that case?
- (ii) Can we use very large time steps in highly heterogeneous domains when regions with different dispersion properties are encountered during tracking?
- (iii) The number of integration points is usually proportional to the number of elements times the number of time steps. How can we reduce the memory requirement of the scheme when dealing with highly heterogeneous domains (which often require fine spatial discretization) and when several time steps are required for the simulation?
- (iv) Can the scheme be used for heterogeneous problems, including injection and pumping wells?
- (v) What is the gain in terms of the CPU time compared with higher order Eulerian methods, such as the discontinuous Galerkin (DG) finite element method, when dealing with small time steps and highly heterogeneous domains?

2. THE EULERIAN-LAGRANGIAN LOCALIZED ADJOINT METHOD FOR ADE

The weak formulation of Equation (1), using the space-time test function $\omega = \omega(\mathbf{x}, t)$, leads to:

$$\int_0^T \int_{\Omega} L(C)\omega = \int_0^T \int_{\Omega} \left[\frac{\partial C}{\partial t} \omega + \nabla \cdot (\mathbf{V}C)\omega - \nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla C)\omega \right] \mathbf{d}\mathbf{x} \, dt = 0 \quad (4)$$

The ELLAM chooses $\omega(\mathbf{x}, t)$ so that for $t \in [t^n, t^{n+1}]$

$$\frac{D\omega}{Dt} = \frac{\partial \omega}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \omega = 0 \quad (5)$$

where $\omega(\mathbf{x}, t)$ is discontinuous at $t = t^n$, and $\omega(\mathbf{x}, t) = 0$ for $t \notin [t^n, t^{n+1}]$.

With this choice of ω , the ADE to solve becomes (for details, see [8]):

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} C^{n+1} \omega^{n+1}(\mathbf{x}) \, \mathbf{d}\mathbf{x} + \int_0^T \int_{\Omega} (\mathbf{D} \cdot \nabla C) \cdot \nabla \omega \, \mathbf{d}\mathbf{x} \, dt + \int_0^T \int_{\partial\Omega} [(\mathbf{V}C - \mathbf{D} \cdot \nabla C)\omega] \cdot \mathbf{n} \, \mathbf{d}\mathbf{x} \, dt \\ = \int_{\Omega} C^n \omega^n(\mathbf{x}) \, \mathbf{d}\mathbf{x} \end{aligned} \quad (6)$$

The test function ω is constant along the characteristic because it verifies Equation (5). At $t = t^{n+1}$, ω is chosen as the piecewise linear function (chapeau function). The concentration C is defined within a finite element framework as a combination of piecewise linear basis functions. The following briefly summarizes the evaluation of each integral in Equation (6).

The first integral on the left-side of (6) is the standard finite element mass integral, which is computed using the mass lumping procedure. Lumping is often used to avoid non-physical oscillations for ADEs, but is known to add numerical diffusion. The ELLAM formulation developed by Younes *et al.* [7] avoids excessive numerical diffusion when several time steps are used. The basic idea of this approach is to keep the same characteristics for all time steps and to interpolate only the concentration variations due to the dispersion process. Therefore, numerical diffusion due to the lumping is removed at the end of each time step (see [11] for details).

The second integral, the dispersion integral, is computed using a one-step backward Euler approximation in time [7, 8, 11, 12]

$$\int_0^T \int_{\Omega} (\mathbf{D} \cdot \nabla C) \cdot \nabla \omega \, \mathbf{d}\mathbf{x} \, dt = \Delta t(\mathbf{x}) \int_{\Omega} (\mathbf{D} \cdot \nabla C)^{n+1} \cdot \nabla \omega^{n+1} \, \mathbf{d}\mathbf{x} \quad (7)$$

Note that the time step size $\Delta t(\mathbf{x})$ in the dispersion integral of (7) has to be reduced for elements near the inflow boundary [1, 7].

The *third integral*, the boundary integral, is evaluated using numerical integration. For simplicity, only the case of the prescribed total flux inflow is considered (for more details, see [7]). Let E be the number of edges e of length l_e for which the total flux \overline{TQ}_e^{n+1} is prescribed and constant during the interval $[t^n, t^{n+1}]$. Numerical integration over the edge e of length l_e is evaluated using N_s spatial integration points of weights W_e^p and N_t temporal integration points of weights W_e^q

$$\int_0^T \int_{\partial\Omega} [(VC - D \cdot \nabla C)\omega_i] \mathbf{n}_{\partial\Omega} dl dt \approx \sum_{e=1}^E \left\{ \overline{TQ}_e^{n+1} \sum_{p=1}^{N_s} \sum_{q=1}^{N_t} (\omega_i(\mathbf{x}^p, t^q) W_e^p W_e^q) \right\} \quad (8)$$

To evaluate $\omega_i(\mathbf{x}^p, t^q)$, we use $\omega_i(\mathbf{x}^p, t^q) = \omega_i(\bar{\mathbf{x}}^p, t^{n+1})$, obtained from (5), where the integration point \mathbf{x}^p at time t^q is tracked forward to $\bar{\mathbf{x}}^p$ at t^{n+1} .

The *integral* on the right-side of (6), corresponding to the mass at the old time level, is evaluated as:

$$\int_{\Omega} C^n \omega_i^n d\mathbf{x} = \sum_A \left[\sum_{p=1}^{N_A} (C^n(\mathbf{x}^p, t^n) \omega_i(\mathbf{x}^p, t^n) W_A^p) \right] \quad (9)$$

where N_A the integration points, with their corresponding 2D space weights W_A^p , are used at each element A . These integration points, located in \mathbf{x}^p at time t^n , are tracked forward to $\bar{\mathbf{x}}^p$ at t^{n+1} to evaluate $\omega_i(\mathbf{x}^p, t^n) = \omega_i(\bar{\mathbf{x}}^p, t^{n+1})$. The concentration $C^n(\mathbf{x}^p, t^n)$ is evaluated using linear interpolation of the known solution at the nodes of the finite element mesh.

The new ELLAM formulation has the following properties [7]:

- Only strategic points are used as numerical integration points. The location of strategic integration points and weights is assigned at the new time level and then backtracked to the old time level without redistributing the weights.
- The total number of integration points is proportional to the number of time steps multiplied by the number of the integration points P per element. If $P = 1$, the integration point is located at \mathbf{x}_j , which corresponds to the location of the center of the element and W_j^{space} corresponds to its area. If $P = 4$, the triangular element is subdivided into four equal subtriangles (by joining the edge midpoints), \mathbf{x}_j corresponds to the location of the center of each subtriangle, and W_j^{space} corresponds to the area of the subtriangle.
- The distribution of the concentration over the domain at the end of each time step is evaluated with only the strategic integration points corresponding to that time step.
- Continuous characteristics are used, and only changes due to dispersion are interpolated to obtain the concentration at the foot of each characteristic. In the particular case of zero dispersion, the concentration remains constant along the characteristic during all the time steps of the simulation.

3. EFFICIENCY OF THE SCHEME IN THE CASE OF A COMPLEX VELOCITY FIELD

This section focuses on the efficiency of the ELLAM in the case of a complex velocity field obtained for a rectangular domain including a narrow channel. The effect of the number of strategic integration points P per element on the accuracy and efficiency of the method is also examined. The results of ELLAM are compared with DG results for different mesh discretizations. Discrepancies due to the approximation of the dispersion term are shown when the ELLAM is used with large time steps.

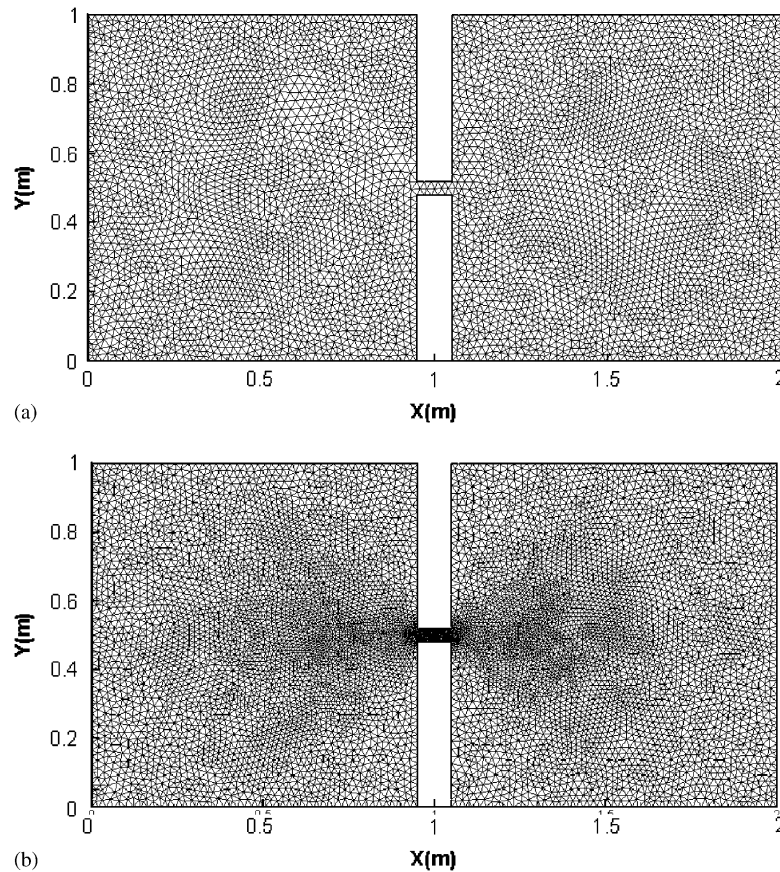


Figure 1. Coarse and fine spatial discretizations with triangular elements for two rectangular subdomains connected by a narrow channel.

3.1. Test problem definition

The ELLAM formulation is used to solve the ADE in a spatial domain Ω formed by two rectangular subdomains connected by a narrow channel to create strong non-uniform flow conditions (see Figure 1).

The velocity field is obtained by solving the stationary flow problem:

$$\begin{cases} \Delta h = 0 & \text{in } \Omega \\ h = 1 & \text{in } \partial\Omega_L^1 \\ h = 0 & \text{in } \partial\Omega_R^1 \\ (\nabla h) \cdot \boldsymbol{\eta}_{\partial\Omega^2} = 0 & \text{in } \partial\Omega^2 \end{cases} \quad (10)$$

where $\partial\Omega_L^1$ and $\partial\Omega_R^1$ are, respectively, the left- and the right-hand perpendicular sides of the domain and $\partial\Omega^2 = \partial\Omega \setminus (\partial\Omega_L^1 \cup \partial\Omega_R^1)$. Accurate fluxes at each element edge are required to track the particles. The flow equation (10) is solved with the mixed finite element approximation detailed in [13]. With this formulation, the velocity is defined everywhere in the field, and its normal component is continuous across the inter-element boundaries. Therefore, an accurate characteristic tracking is obtained using analytical tracking based on a velocity field generated by the mixed formulation [13, 14].

The boundary conditions for the transport problem are of Dirichlet type at the inflow (left boundary of Ω), where:

$$\begin{aligned} C &= 1 & \text{for } x=0 & \text{ and } 0 \leq y \leq 0.7 \\ C &= 0 & \text{for } x=0 & \text{ and } 0.7 < y \leq 1 \end{aligned} \tag{11}$$

A zero diffusive flux is imposed at the outflow boundary. The simulations are performed for a final simulation time $T = 5$ days.

A coarse mesh of 10 575 triangles (Figure 1(a)) and a fine mesh of 16 176 elements with a very fine discretization around the channel (Figure 1(b)) are used for the spatial discretization.

This test problem is solved with both the DG method and the ELLAM for the case of advection dominant transport and when both advection and dispersion are significant.

3.2. The advection dominant case

In this case, the dispersion tensor is very small, with $\alpha_L = 5 \times 10^{-5}$ m, $\alpha_T = 5 \times 10^{-6}$ m and $D_m = 3.6 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ day}^{-1}$. Although the explicit DG method is known to generate a solution with a small numerical diffusion, the results of the simulation show that almost all the right subdomains are contaminated (Figure 2). Thus, due to the limited number of triangles in the channel (Figure 2(b)), the numerical diffusion inside the channel induces a large contaminated region in the upper part of the right subdomain (Figure 1(a)).

When the mesh is refined and a very fine discretization is used inside the channel, the upper part of the channel remains free of contaminant (Figure 3(b)). Hence, the upper region of the right subdomain remains free of contaminant (Figure 3(a)). Note that small numerical diffusion can be observed in the interface of concentration at the right subdomain.

These results show the high dependence of the DG results on the spatial discretization for this case. To obtain accurate results, a very fine discretization is required inside the channel. Note that this improvement in accuracy requires a significant increase in the computational cost. Therefore, due to the CFL constraint controlled by the mesh size inside the channel, the simulation with the

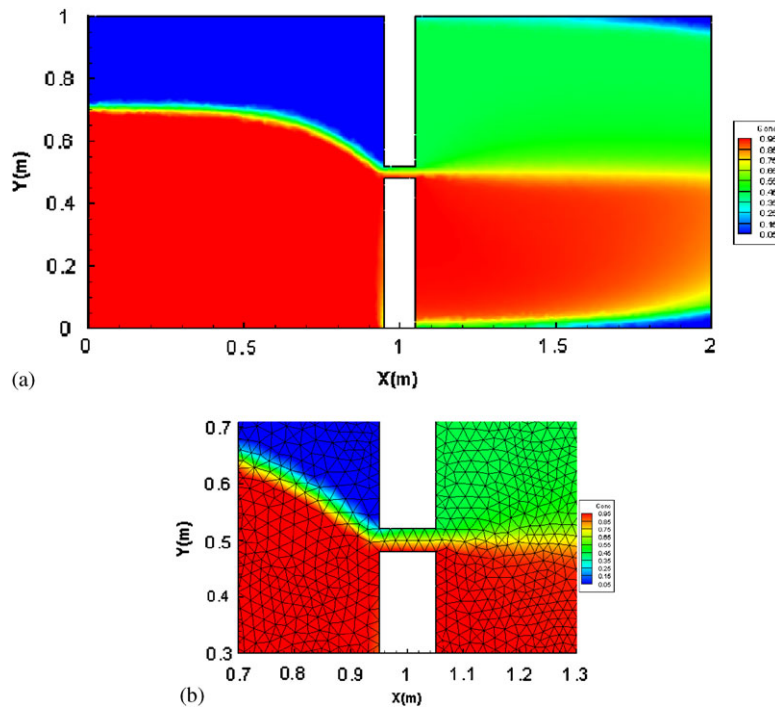


Figure 2. Results of the advection dominant transport problem with DG for the coarse mesh.

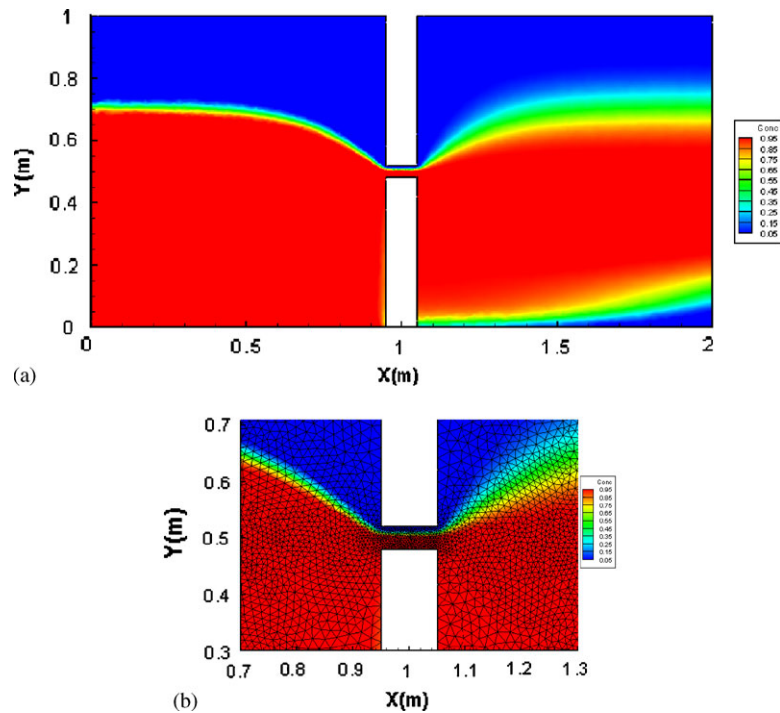


Figure 3. Results of the advection dominant transport problem with DG on the fine mesh.

fine discretization requires approximately 1990 s of CPU time, whereas the simulation with the coarse discretization requires approximately 12 times less CPU time (160 s).

The test problem is now simulated with ELLAM using both meshes and only one strategic integration point per element ($P = 1$). The final simulation time is reached using five equal time steps. Similar results are obtained with both meshes. Figure 4 shows the results of the coarse mesh.

With this formulation of the ELLAM, the concentration at the foot of the characteristic is not obtained by interpolating the concentration at the nodes of the finite element mesh. Instead, the method uses a continuous tracking of characteristics, and only changes due to dispersion are interpolated at each time step. This property allows the upper region in the right subdomain to be free of any contaminant (Figure 4(a)), although all elements in the channel have a non-zero concentration for the coarse mesh discretization (Figure 4(b)).

The simulation of the coarse (respectively fine) mesh requires 1.4 s (respectively 3.2 s) when the final simulation time is subdivided into five equal time steps and 13.3 s (respectively 27.3 s) when subdivided into 50 equal time steps. The computational requirement of the ELLAM is highly dependent on the number of particles (strategic integration points) to track. Similar results are obtained when using 4, 8 and 12 particles (strategic integration points) per element. The corresponding computational times are respectively 4.5, 7.1 and 9.7 s.

The results of the simulations of the advection dominant transport case show that the ELLAM is less sensitive to the spatial discretization than the DG method. The ELLAM is highly efficient and accurate. The results when $P = 1$ on the coarse mesh (1.4 s of CPU time) are better than those obtained with DG on the fine mesh (1990 s of CPU time).

3.3. The advection–diffusion case

In this second test case, the diffusion process is significantly increased with $\alpha_L = 5 \times 10^{-2}$ m and $\alpha_T = 5 \times 10^{-3}$ m in Equation (7). The results of the DG method with both meshes are shown in Figure 5.

Contrary to the previous advection dominant transport case, the right subdomain is completely contaminated with both meshes. A uniform distribution of concentration is obtained with the coarse

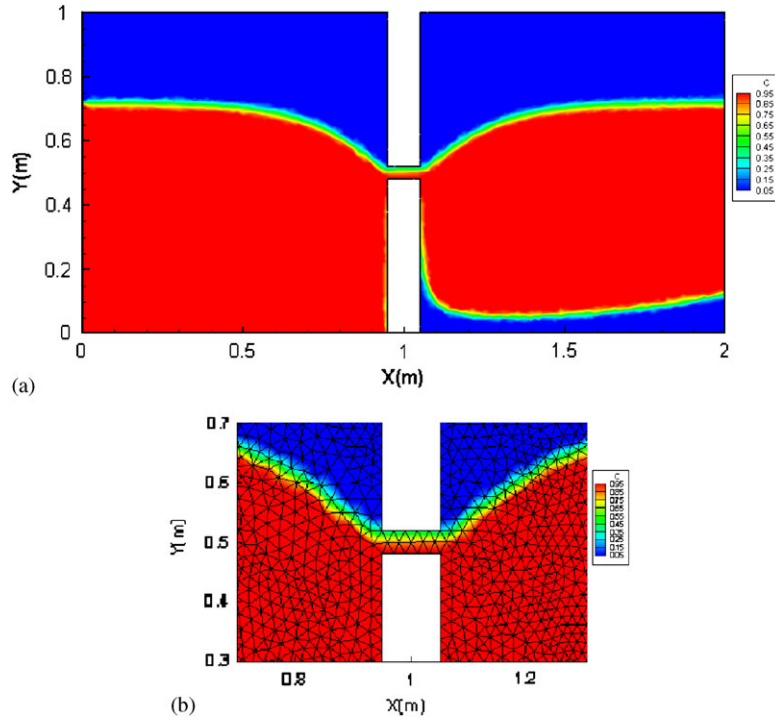


Figure 4. Results of the advection dominant transport problem with ELLAM on the coarse mesh.

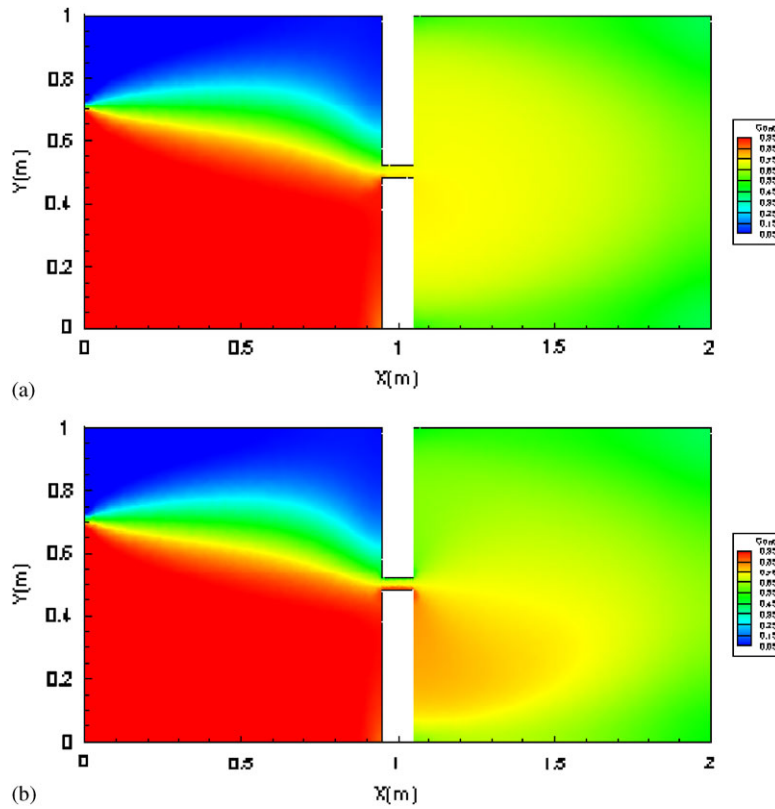


Figure 5. Results of the advection-diffusion problem with DG using coarse (a) and fine (b) meshes.

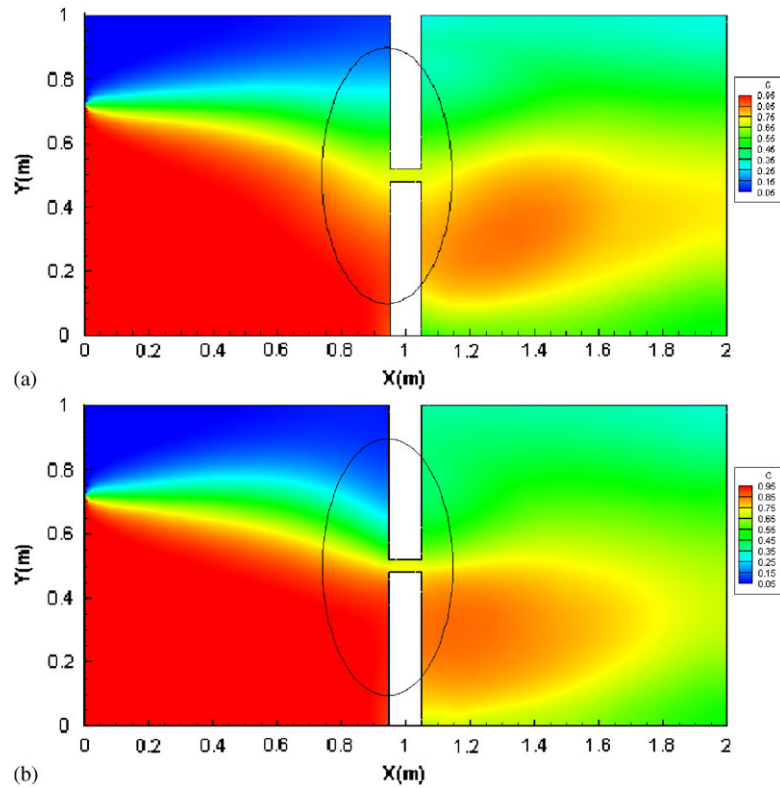


Figure 6. Concentration distribution near the entrance of the channel using D^{n+1} (a) and D_{eq} (b) with the coarse mesh.

mesh (Figure 5(a)); with the fine mesh, the lower right region is more contaminated than the upper one (Figure 5(b)).

In this test case, the magnitude of the velocity has strong variations inside the domain. The value is high inside the channel and decreases away from it. Therefore, the dispersion tensor given by (7) has many orders of variations in the domain. The approximation of the dispersion integral (7) with ELLAM using D^{n+1} can generate errors for large time steps. Indeed, D^{n+1} is not representative of the dispersion experienced along the characteristic between t^n and t^{n+1} for large time steps.

Figure 6(a) shows the distribution of the concentration in the vicinity of the channel obtained with the coarse mesh when the final simulation time is reached using 10 equal time steps. This figure shows an overestimation of the dispersion near the entrance of the channel.

To avoid this problem, we use an equivalent dispersion tensor D_{eq} instead of D^{n+1} in (7). D_{eq} is the equivalent dispersion tensor during $\Delta t(\mathbf{x})$. To evaluate this coefficient, the dispersion tensors D_{E_j} for all crossed element E_j between t^n and t^{n+1} are monitored and stored, as well as the duration Δt_{E_j} to cross each element E_j . The equivalent dispersion coefficient D_{eq} is then calculated as:

$$D_{eq} = \frac{1}{\Delta t(\mathbf{x})} \sum_j \Delta t_{E_j} D_{E_j} \quad (12)$$

Thus, the equivalent dispersion tensor is the arithmetic mean of local dispersion tensors weighted by the mean times spent under the influence of these local values. The use of D_{eq} instead of D^{n+1} improves the results in the vicinity of the channel entrance (Figure 6(b)).

The simulations using 1, 4, 8 and 12 particles (strategic integration points) per element lead to similar results. Therefore, as for the advection dominant case, a single particle per element is

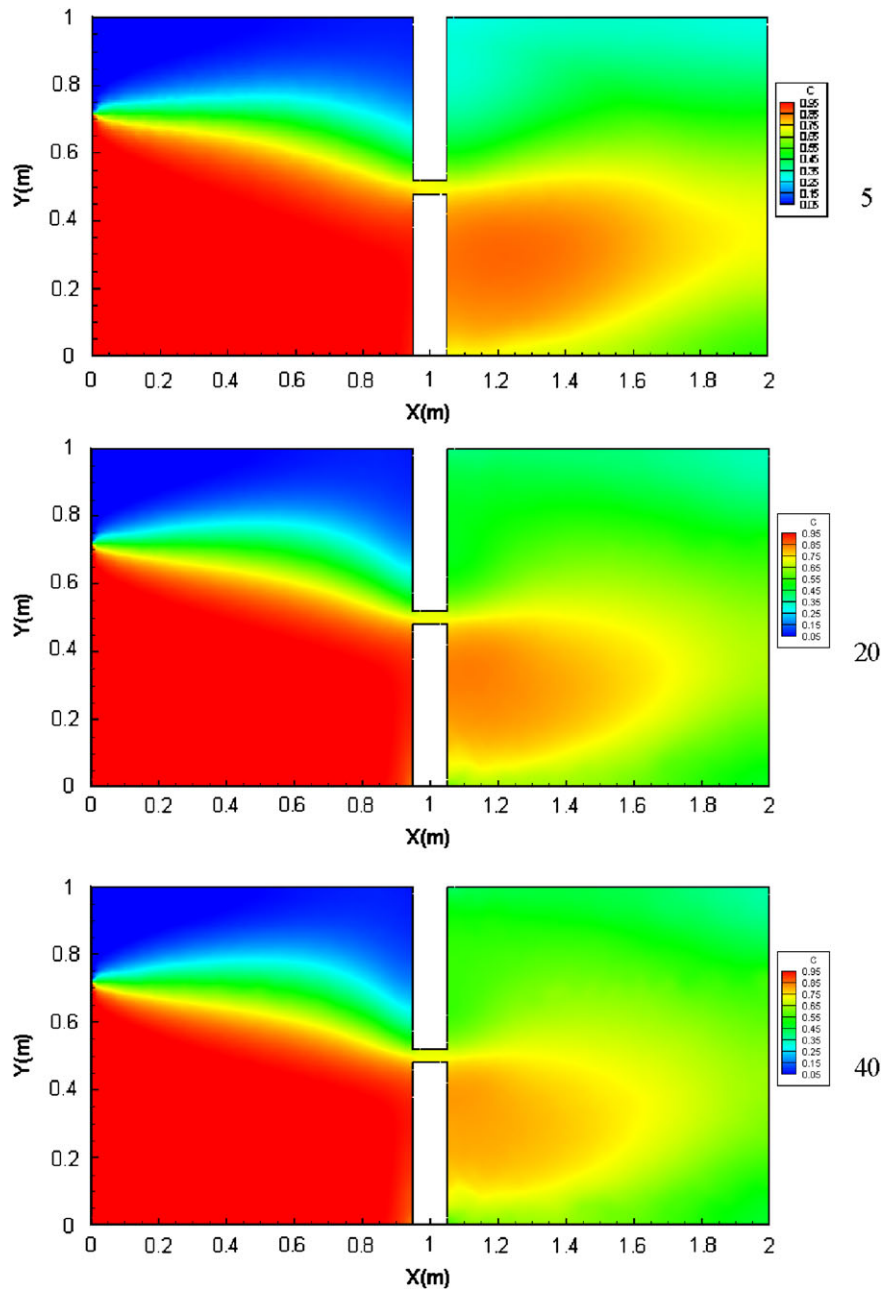


Figure 7. Concentration distribution of the ELLAM using 5, 20 and 40 time steps on the coarse mesh.

sufficient to obtain accurate results. However, due to the one-step backward Euler approximation in time of the dispersion integral (7), a minimum number of time steps is required to obtain accurate results when dispersion is important. Figure 7 shows the results when using 5, 20 and 40 time steps. Small variations can be observed between the results obtained using 20 and those using 40 time steps. Therefore, for this test case, a minimum number of 20 time steps is required to obtain a good approximation of the dispersion integral.

Similar results are obtained for the fine mesh using $P=1$ and 20 time steps. Therefore, the effect of the spatial discretization is reduced with ELLAM, as it was for the previous advection dominant case.

4. EFFICIENCY OF THE ELLAM IN HIGHLY HETEROGENEOUS DOMAINS INCLUDING INJECTION AND PUMPING WELLS

This section describes the applicability and efficiency of the ELLAM for the transport problem in a highly heterogeneous domain formed by clay/sand soils with injection and pumping wells. Owing to the high contrast of permeability, a very fine mesh is required to obtain an accurate velocity field. This can reduce the applicability of the ELLAM for problems with several time steps. Indeed, although the ELLAM can use a single strategic integration point per element, the total number of particles to be tracked increases drastically because it is proportional to the number of elements multiplied by the number of time steps. To overcome this problem, the benefit of subdivision of the final simulation time into periods where the tracking is interrupted at the end of each time period is studied. The continuous tracking is assumed only inside each period. When starting a new time period, the concentrations at the foot of characteristics are calculated using linear interpolation of the concentrations of the nodes of the mesh obtained at the previous time period.

In this problem, the spatial domain Ω is a unit square with sand and clay soils (Figure 8). The dispersion coefficients for the two materials are $\alpha_L^{\text{sand}} = 5 \times 10^{-3}$ m, $\alpha_T^{\text{sand}} = 5 \times 10^{-4}$ m for the sand and $\alpha_L^{\text{clay}} = 5 \times 10^{-5}$ m and $\alpha_T^{\text{clay}} = 5 \times 10^{-6}$ m for the clay. The molecular diffusion is fixed at $3.6 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ day}^{-1}$.

An injection well is located at (0.3, 0.5) and an extraction well at (0.7, 0.5) with a flow rate of $Q_{\text{inj}} = -Q_{\text{pump}} = Q_s = 0.5 \text{ m}^3 \text{ day}^{-1}$. A flux $Q_{\text{left}} = -0.15 \text{ m day}^{-1}$ is imposed at the left boundary of the domain and a fixed head $h_{\text{right}} = 0 \text{ m}$ at the right boundary. To obtain an accurate velocity distribution, the domain is discretized with a fine mesh formed by 87 166 triangular elements. The final simulation time $T = 3$ days is subdivided into 100 equal time steps. The ELLAM is used with a single strategic integration point per element.

The flow problem is solved with a lumped mixed hybrid finite element approximation [13]. Note that the analytical tracking obtained from the mixed formulation is incorrect within the well elements. For example, in the center of an injection well, the magnitude of the velocity with the mixed approximation is zero, although it should have the largest value (see [15] for details). With triangular discretization, this problem can be easily circumvented by using a very fine mesh in the well region. In that case, the well cell is small enough to guarantee an instantaneous mixing between the injected and the resident fluids inside the injection well. Moreover, the injection

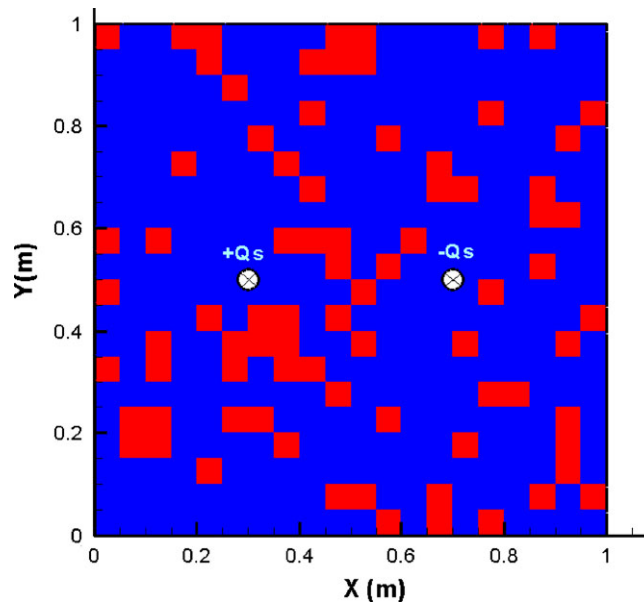


Figure 8. Sand/clay heterogeneous domain with injection pumping wells.

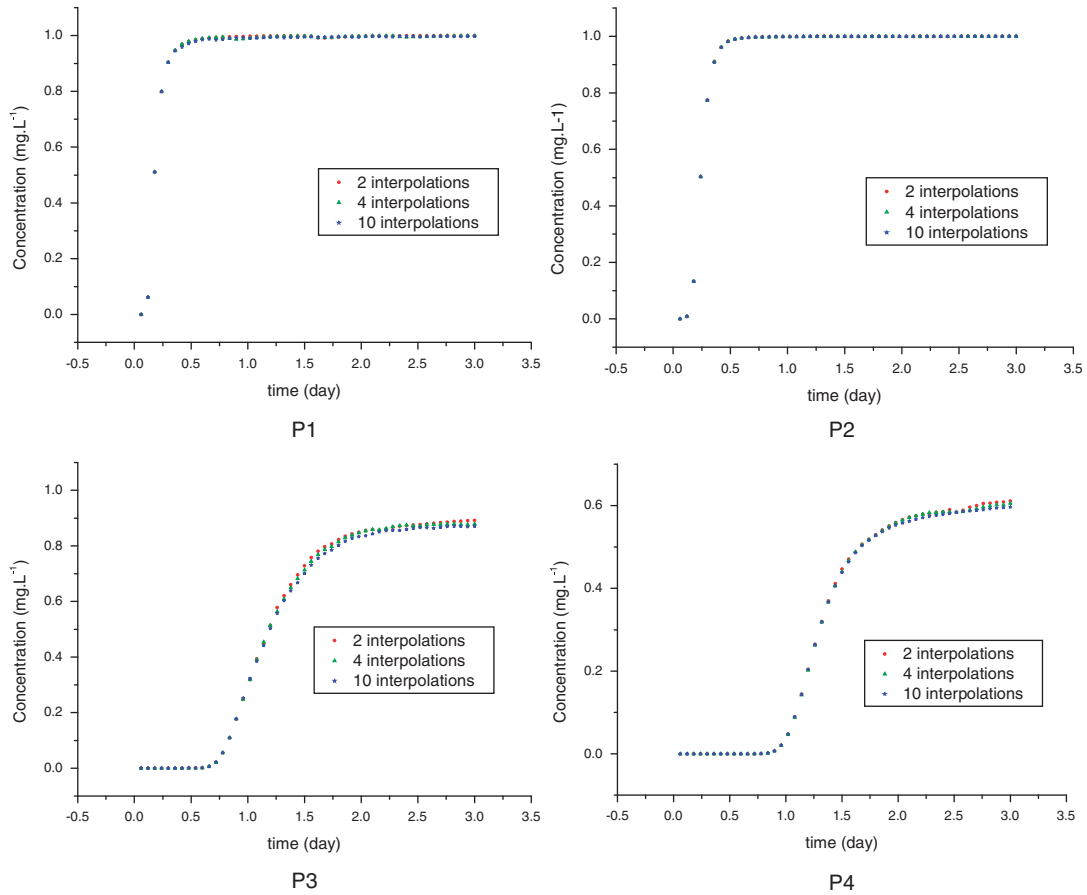


Figure 9. Breakthrough curves using different time periods with ELLAM.

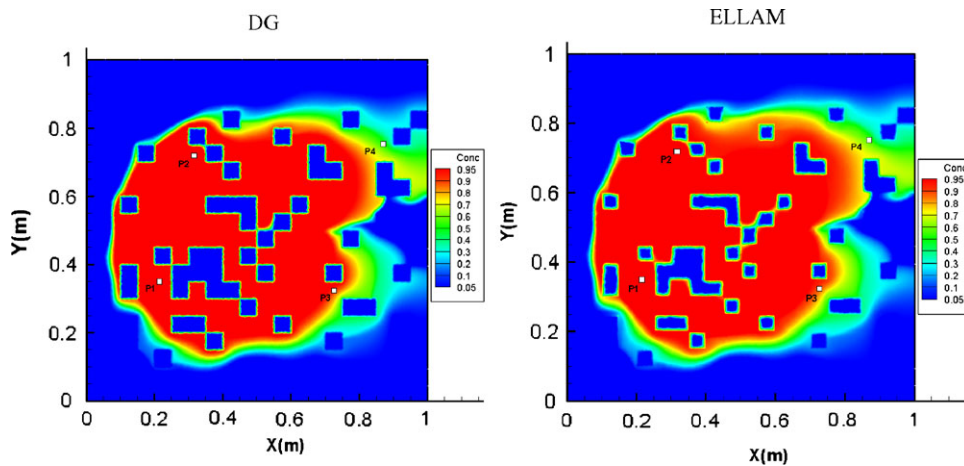


Figure 10. Concentration distribution with DG and ELLAM using four time periods.

(pumping) well can be considered as a strong source (sink) where the local flow is going out (in) in all directions. Therefore, the boundaries of the source (sink) cell are used in a manner similar to that used for inflow (outflow) boundaries [16].

Owing to the high memory requirement of the ELLAM, the simulation cannot be performed for the whole 100 time steps. In this scenario, the number of particles to be tracked is around

$87\,166 \times 100 = 8\,716\,600$ particles. To overcome this problem, the final simulation time is subdivided into 2, 4 and 10 time periods. This technique can reduce the memory requirement of the simulation, but it may introduce numerical diffusion due to interpolation.

The distributions of the concentrations obtained with ELLAM using different time periods are very similar. The breakthrough curves of the concentrations are plotted in Figure 9 at four observation points located at $P1(0.20, 0.34)$, $P2(0.30, 0.71)$, $P3(0.71, 0.31)$ and $P4(0.86, 0.74)$.

This figure shows that the amount of numerical diffusion induced by interpolation is very small and this technique can be useful for problems with a large number of unknowns and small time steps. Note that the CPU time is also reduced when several periods are used. Indeed, the CPU time with 2 periods is 305 s, and it is only 200 s with four periods.

Finally, Figure 10 shows that the results of the ELLAM using four periods are very close to the DG results. The total CPU time using DG is around 5200 s.

5. CONCLUSION

The ELLAM formulation developed by Younes *et al.* [7] for unstructured triangular meshes uses only strategic numerical integration points, and therefore, it requires a very limited number of integration points (usually 1 per element). To avoid numerical dispersion due to interpolation when several time steps are used, the method uses a continuous tracking of characteristics, and only changes due to dispersion are interpolated at each time step.

In this work, the formulation was tested for highly heterogeneous domains including injection and pumping wells. The results show that:

- A single integration point per element is sufficient to obtain accurate results, even for highly heterogeneous domains.
- An equivalent dispersion tensor based on the arithmetic mean of the local dispersion tensors encountered during the tracking should be used when dealing with large time steps.
- For problems with a large number of elements and small time steps, the final simulation time can be subdivided into a few time periods to reduce the memory requirement of the simulation.
- The method can be used successfully for heterogeneous problems including injection and pumping wells, and it remains much more efficient than the DG method, even when small time steps are required.

REFERENCES

1. Celia MA, Russell TF, Herrera I, Ewing RE. An Eulerian–Lagrangian localized adjoint method for the advection–diffusion equation. *Advances in Water Resources* 1990; **13**:187–206.
2. Farthing MW, Kees CE, Russell TF, Miller CT. An ELLAM approximation for advective–dispersive transport with nonlinear sorption. *Advances in Water Resources* 2006; **29**:657–675.
3. Healy RW, Russell TF. A finite-volume Eulerian–Lagrangian localized adjoint method for solution of the advection–dispersion equation. *Water Resources Research* 1993; **29**:2399–2413.
4. Younes A. An accurate moving grid Eulerian Lagrangian localized adjoint method for solving the one-dimensional variable-coefficient ADE. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 2004; **45**:157–178.
5. Binning P, Celia MA. A finite volume Eulerian–Lagrangian localized adjoint method for solution of the contaminant transport equations in two-dimensional multi-phase flow systems. *Water Resources Research* 1996; **32**:103–114.
6. Healy RW, Russell TF. Solution of the advection–dispersion equation in two dimensions by a finite-volume Eulerian–Lagrangian localized adjoint method. *Advances in Water Resources* 1998; **21**:11–26.
7. Younes A, Ackerer P, Lehmann F. A new efficient Eulerian–Lagrangian localized adjoint method for solving the advection–dispersion equation on unstructured meshes. *Advances in Water Resources* 2006; **29**:1056–1074.
8. Younes A, Ackerer P. Solving the advection–diffusion equation with the Eulerian–Lagrangian localized adjoint method on unstructured meshes and non uniform time stepping. *Journal of Computational Physics* 2005; **208**:384–402.
9. Russell TF, Celia MA. An overview of research on Eulerian–Lagrangian localized adjoint methods (ELLAM). *Advances in Water Resources* 2002; **25**:1215–1231.
10. Russell TF. Numerical dispersion in Eulerian–Lagrangian methods. In *Computational Methods in Water Resources*, Hassanizadeh SM *et al.* (eds), vol. 2. Elsevier: Amsterdam, 2002; 963–970.

11. Younes A, Fahs M, Ackerer P. A new approach to avoid excessive numerical diffusion in Eulerian–Lagrangian methods. *Communications in Numerical Methods in Engineering* 2008; **24**:897–910.
12. Younes A, Fahs M. Direct and split operator approaches with ELLAM for reactive transport equations. *AIChE Journal* 2007; **53**:2161–2169.
13. Younes A, Ackerer P, Delay F. Mixed finite elements for solving 2-D diffusion-type equations. *Reviews of Geophysics* 2010; **48**: RG1004, 26. DOI: 10.1029/2008RG000277.
14. Matringe SF, Juanes R, Tchelepi HA. Robust streamline tracing for the simulation of porous media flow on general triangular and quadrilateral grids. *Journal of Computational Physics* 2006; **219**:992–1012.
15. Wang H, Zhao W, Ewing RE. A numerical modeling of multicomponent compressible flows in porous media with multiple wells by an Eulerian–Lagrangian method. *Computing and Visualization in Science* 2005; **8**(2):69–81.
16. Healy RW, Russell TF. Treatment of internal sources in the finite volume ELLAM. In *XIII International Conference on Computational Methods in Water Resources*, Bentley LR, Sykes JF, Brebbia CA, Gray WG, Pinder GF (eds). A.A. Balkema: Calgary, 2000; 619–622.

4.4 Couplage chimie-transport avec la méthode C_ELLAM

La modélisation du transport réactif en milieu poreux nécessite la résolution d'un ensemble d'équations d'advection-dispersion-réaction :

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + L(C) + R(C) = 0 \quad (4.3)$$

où $L(C)$ est l'opérateur de transport ;
 $R(C)$ est l'opérateur de chimie.

Le terme $R(C)$ peut inclure les différents processus chimiques, biologiques ou radioactifs. Les processus physiques et chimiques régissant le transport réactif peuvent mener à des fronts de concentration raides c'est pourquoi le choix des méthodes de résolution doit être en adéquation avec le problème posé. Pour la résolution de l'opérateur de transport, nous avons choisi la méthode C_ELLAM. Nous allons maintenant voir quelques méthodes de couplage avec l'opérateur de chimie.

4.4.1 Les approches de résolution

Les différentes approches de résolution présentées par les différents auteurs peuvent être classées en deux catégories :

Approche par séparation d'opérateurs (OS)

L'approche OS, connue aussi sous le nom de méthode à pas multiples, consiste à résoudre séquentiellement l'opérateur de transport et l'opérateur de chimie. La même approche a été utilisée dans le domaine des hydrosystèmes souterrains pour séparer les opérateurs d'advection et de dispersion avec les méthodes MOC et MMOC. Dans le domaine du transport réactif, l'idée de l'approche OS consiste à utiliser la concentration obtenue après la résolution de l'opérateur de transport comme concentration initiale pour l'opérateur de chimie. Cette approche a été utilisée pour la modélisation de la dégradation du premier ordre [Valocchi and Malmstead, 1992 ; Kaluarachchi and Morshed, 1995 ; Barry et al., 1996 ; Carrayrou et al., 2004] ou pour la sorption [Kirkner et al., 1985 ; Kirkner and Reeves, 1988 ; Kanney et al., 2003] et pour le transport réactif multicomposants [Theis et al., 1982 ; Kirkner et al., 1984 ; Yeh and Tripathi, 1990 ; Saaltink et al., 2001 ; Carrayrou et al., 2004]. Dans l'approche OS, on distingue deux méthodes : *l'approche séquentielle itérative (SIA)* avec laquelle on itère entre l'opérateur de transport et de chimie et *l'approche séquentielle non itérative (SNIA)* où il n'y a pas d'itérations.

L'approche OS est facile à mettre en œuvre et mène à des systèmes d'équations réduits par rapport à une approche globale [Miller and Rabideau, 1993]. Ainsi, elle est moins gourmande en terme de temps de calcul et d'espace mémoire. De plus, l'approche OS permet l'utilisation de schémas numériques spécifiques pour la résolution de chaque opérateur de l'équation régissant le transport réactif [Valocchi

and Malmstead, 1992 ; Carrayrou et al., 2002]. L'efficacité des schémas utilisés pour la résolution de la partie « transport » et de la partie « chimie » n'est donc aucunement affecté par le couplage car des pas de temps spécifiques peuvent être choisis pour chaque opérateur. Cependant, cette approche présente aussi des inconvénients car lorsque l'on utilise des grands pas de temps, l'approche SNIA introduit une erreur intrinsèque due à la séparation d'opérateurs. De même, l'approche SIA peut présenter, dans ce cas des problèmes de convergence.

Approche globale (GA)

Également appelée méthode à un seul pas, l'approche GA consiste à résoudre simultanément un seul système composé des opérateurs de transport et de chimie. Elle a été développée par plusieurs auteurs [Valocchi et al., 1981 ; Lichtner, 1985 ; Steefel and Lasaga, 1994 ; Saaltink et al., 1998 ; Kräutle and Knabner, 2005]. Contrairement à l'approche OS, l'approche GA mène à un grand système non linéaire formé par les équations de transport et de chimie. Ce système est difficile à implémenter, requiert beaucoup d'espace mémoire surtout pour des problèmes multidimensionnels et/ou pour le transport multi-espèces. Par contre, cette approche n'introduit pas d'erreur intrinsèque de séparation d'opérateurs d'où une grande précision de la solution obtenue [Fahs, 2007].

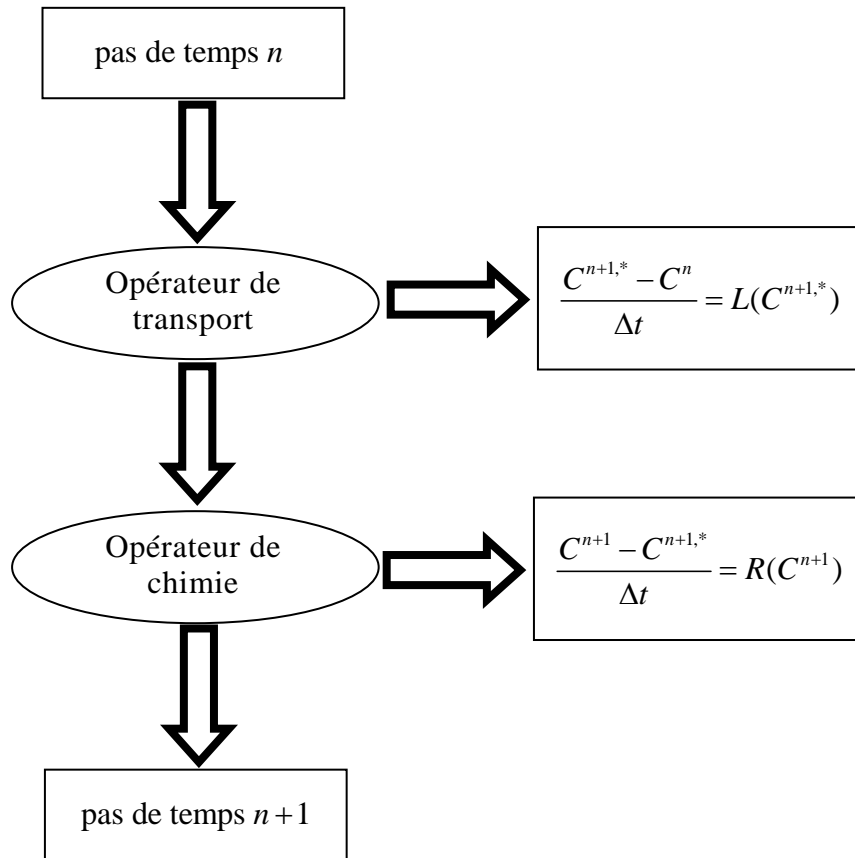
Comme avec l'approche OS, il y a également deux méthodes avec l'approche GA : l'approche différentielle algébrique (DAE) et l'approche de substitution directe (DSA). La formulation DAE consiste à transformer les EDP de transport en équations différentielles ordinaires (EDO) par discrétisation de l'opérateur de transport. Ces EDO sont ensuite couplées avec les équations algébriques non linéaires de chimie pour former un système d'équations différentielles algébriques qui constituera le système à résoudre [Yeh and Tripathi, 1991]. Avec l'approche DSA, on substitue les équations de la chimie dans les équations de transport et le système résultant est résolu par la méthode de Newton-Raphson.

La comparaison entre ces différentes approches de modélisation du transport réactif a été largement étudiée dans la littérature [Herzer and Kinzelbach, 1989 ; Yeh and Tripathi, 1989 ; Saaltink et al., 2001 ; Carrayrou et al., 2004]. Du temps où les moyens informatiques n'étaient pas aussi performants, l'approche OS a été longtemps privilégiée pour son efficacité et son implémentation simple [Yeh and Tripathi, 1989]. La résolution des problèmes avec de gros maillages était quasiment impossible avec l'approche GA à cause de la grande taille des systèmes à résoudre. Cependant, le développement récent des outils informatiques a permis de mettre en évidence la précision de l'approche GA comparée à l'approche OS malgré les besoins en moyens informatiques [Herzer and Kinzelbach, 1989 ; Valocchi and Malmstead, 1992 ; Barry et al., 1996 ; Carrayrou et al., 2004].

4.4.2 Le couplage C_ELLAM-SNIA

Pour la résolution du transport réactif avec les ELLAM, les travaux de Fahs [2007] et de Younes and Fahs [2007] ont démontré les avantages du couplage des ELLAM avec l'approche SNIA pour des réactions cinétiques. En effet, l'approche OS permet de garder l'avantage principal des ELLAM concernant l'utilisation des

grands pas de temps pour la résolution de l'opérateur de transport et de prendre un pas de temps différent (généralement plus petit) pour l'opérateur de chimie.



La première étape consiste à résoudre l'opérateur de transport sur un pas de temps, on obtient ainsi la concentration $C^{n+1,*}$ qui correspond à la nouvelle concentration après les processus d'advection et de dispersion. La concentration ainsi obtenue est par la suite utilisée comme concentration initiale pour l'opérateur de chimie afin d'obtenir C^{n+1} qui correspond à la nouvelle concentration après les processus de transport et de chimie. Les cas-test traités dans cette thèse correspondent à des réactions cinétiques et nous avons utilisé un schéma numérique de type Runge-Kutta d'ordre 4 pour résoudre l'opérateur de chimie.

4.5 Modélisation du transport multi-espèces en milieux poreux saturés/non saturés avec la méthode C_ELLAM

Dans cette partie, nous utilisons le couplage C_ELLAM avec une approche SNIA pour la résolution du problème de transport multi-espèces en milieux fortement hétérogènes en régime saturé/non saturé.

L'efficacité et la précision du modèle développé (C_ELLAM_REACT) est comparé à une code existant basé sur une association des EFD avec une méthode Multi Point

Flux Approximation (MPFA) combinée également à l'approche SNIA (EFDMPFA_REACT).

Trois cas-tests sont étudiés :

- (i) le premier cas-test concerne la *dégradation du tetrachloroéthylène* en milieu homogène saturé mettant en jeu quatre espèces mobiles ;
- (ii) le deuxième cas-test traite de la *dégradation du m-xylène* dans un milieu hétérogène saturé avec deux espèces mobiles et une espèce fixe ;
- (iii) le troisième concerne toujours la *dégradation du m-xylène* mais dans un milieu hétérogène non saturé.

Les résultats démontrent la supériorité du modèle C_ELLAM_REACT par rapport au modèle EFDMPFA_REACT.

Les différents développements sur ce sujet ont fait l'objet d'un article dans *Water, Air, & Soil Pollution*.

Modeling 2D Multispecies Reactive Transport in Saturated/Unsaturated Porous Media with the Eulerian–Lagrangian Localized Adjoint Method

F. Ramasomanana · A. Younes · M. Fahs

Received: 18 May 2011 / Accepted: 28 September 2011
© Springer Science+Business Media B.V. 2011

Abstract In the present paper, the Eulerian–Lagrangian localized adjoint method (ELLAM) formulation developed by Younes et al. (Advances in Water Resources 29:1056–1074, 2006) is combined with the sequential noniterative approach to accurately simulate 2D multicomponent reactive transport in saturated/unsaturated porous media. The performance and accuracy of the developed model, named ELLAM_REACT, are compared against those of an existing numerical model based on a combination of discontinuous Galerkin and multipoint flux approximation methods (DGMPFA_REACT). Three studied test cases, dealing with reactive transport in saturated and unsaturated porous media and involving chemical reactions with only aqueous species or both fixed and aqueous species, show the superiority of the ELLAM_REACT model compared to the DGMPFA_REACT model.

Keywords Porous media · Reactive transport · Unsaturated flow · ELLAM · SNIA

F. Ramasomanana · A. Younes (✉) · M. Fahs
Laboratoire d'Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg,
Université de Strasbourg/EOST, CNRS, UMR 7517,
1 rue Blessig,
67084 Strasbourg, France
e-mail: younes@unistra.fr

M. Fahs
Lebanese International University
School of Engineering Beirut,
Beirut, Lebanon

1 Introduction

Standard Eulerian methods such as finite elements or finite differences are not well suited for advection-dominated transport problems since they can generate solutions with artificial diffusion and/or unphysical oscillations. The Eulerian–Lagrangian localized adjoint method (ELLAM), introduced by Celia et al. (1990), is an interesting alternative. It uses space–time test functions and treats general boundary conditions naturally in its formulation. ELLAM has been used so far for one-dimensional advection dispersion equations (Celia et al. 1990; Healy and Russell 1993; Younes 2004a), one-dimensional reactive transport problems (Wang et al. 1995; Vag et al. 1996; Bell and Binning 2004; Younes 2004b; Farthing et al. 2006; Younes and Fahs 2007; Fahs et al. 2009a), bidimensional transport problems with uniform rectangular meshes (Binning and Celia 1996; Healy and Russell 1998), and unstructured triangular meshes (Younes and Ackerer 2005).

A new formulation of ELLAM was developed by Younes et al. (2006) to solve 2D advection dispersion equation in saturated porous media. This formulation requires a limited number of strategic integration points (usually one per element) even for unstructured meshes. The integration points and weights are assigned at the new time level and then backtracked to the old time level without redistributing the weights. In order to avoid excessive numerical diffusion which can occur when dealing with several time steps, continuous

characteristics are used. The concentration at the foot of each characteristic is obtained by interpolating solely changes in concentration due to the dispersion process. The scheme was shown to be highly efficient for modeling 2D tracer transport in homogeneous and heterogeneous saturated porous media (Younes et al. 2006; Ramasomanana and Younes 2011).

In this work, the ELLAM formulation developed by Younes et al. (2006) is extended to the modeling of 2D multicomponent reactive transport in unsaturated porous media. For these types of problems, accurate and efficient simulators remain a challenge when dealing with sharp concentration fronts.

Multicomponent reactive transport models are often based on the sequential noniterative approach (SNIA) for coupling transport and chemical processes. Indeed, SNIA has many advantages: (1) it can be easily implemented, (2) it leads to a smaller system of equations than the global approaches (Miller and Rabideau 1993), (3) transport and chemical equations can be solved using different numerical techniques that are specifically suited to achieve high accuracy for each system of equations (Valocchi and Malmstead 1992; Carrayrou et al. 2002), and (4) chemical equations can be solved using smaller time steps than the ones used for the transport equations since the characteristic times of transport processes are often larger than those of chemical processes (Kaluarachchi and Morshed 1995).

However, SNIA introduces an intrinsic numerical error due to the splitting (Herzer and Kinzelbach 1989; Barry et al. 1996, 1997; Carrayrou et al. 2004; Fahs et al. 2008); therefore, small time steps are often required to reduce the operator splitting (OS) error. This can affect the efficiency and the accuracy of ELLAM when combined with SNIA. Indeed, it is known that Eulerian–Lagrangian methods perform well for problems in which they can successfully use a large time step, however when several time steps are to be used, they suffer from numerical dispersion. Despite the fact that the ELLAM formulation of Younes et al. (2006) uses a single strategic integration point per element, the total number of particles to be tracked may increase significantly after an increasing number of small time steps. The reason is that the total number of particles is proportional to the number of elements multiplied by the number of time steps. This has an impact on both memory and CPU requirement of ELLAM especially in the case of

transient unsaturated flow where the tracking process is more CPU consuming than in the case of steady-state saturated flow.

Given all the above, the aim of this work is to discuss the applicability and efficiency of the ELLAM in simulating 2D multispecies reactive transport in both saturated and unsaturated porous media. The outline of the paper is the following. In the first part, the mathematical equations governing fluid flow and reactive transport in 2D unsaturated porous media are briefly recalled. The second part explains the development of the new numerical model based on the combination of ELLAM and SNIA to solve the governing equations. Finally, three test cases are simulated in order to analyze the performance of the model for reactive transport problems in saturated and unsaturated porous media. The efficiency and accuracy of this model are assessed by comparing the results to those obtained using an existing numerical model based on a combination of discontinuous Galerkin and multipoint flux approximation methods (Younes and Ackerer 2008).

2 The Mathematical Model

The multicomponent reactive transport equations in the saturated/unsaturated zone can be written as:

$$\frac{\partial(\theta C_i)}{\partial t} = -\nabla \cdot (q C_i) + \nabla \cdot (D^i \cdot \nabla C_i) \quad (1)$$

$$+ R_i(C_1, \dots, C_{Nc}, t),$$

$$i = 1, \dots, Nc$$

where $C_i [M \cdot L^{-3}]$ is the concentration of the species i , $\theta [-]$ the volumetric water content, Nc the number of species, R_i the rate of the reaction which is generally function of all species concentrations $C_{j(j=1, \dots, Nc)}$ and $D^i [L^2 \cdot T^{-1}]$ the dispersion tensor of coefficients D_{kl}^i defined by:

$$D_{kl}^i = (\alpha_T |q| + D_m) \delta_{kl} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{q_k q_l}{|q|}, k, l = 1, 2 \quad (2)$$

where $q_k [L \cdot T^{-1}]$ and $q_l [L \cdot T^{-1}]$ are the components of the Darcy's velocity $q [L \cdot T^{-1}]$; $\alpha_L [L]$ and $\alpha_T [L]$ the

longitudinal and transverse dispersivities, respectively; δ_{ij} the Kronecker delta function and $D_m[L^2 \cdot T^{-1}]$ the molecular diffusion coefficient.

Equation 1 is solved for the domain Ω of boundary $\partial\Omega$ with initial and boundary conditions

$$\theta^{n+1} C_i^{n+1,*} = \theta^n C_i^n + \int_t^{t+\Delta t} (-\nabla \cdot (qC_i) + \nabla \cdot (D^i \cdot \nabla C_i)) dt, \quad i = 1, \dots, Nc \tag{3}$$

This trial solution is then used as initial condition for the solution of a second system formed by the nonlinear reaction equations:

$$C_i^{n+1} = C_i^{n+1,*} + \int_t^{t+\Delta t} R_i(C_1, \dots, C_{Nc}, t) dt, \quad i = 1, \dots, Nc \tag{4}$$

For transient unsaturated problems, the volumetric water content and the Darcy’s velocity can vary in both space and time. Their distribution inside the domain is obtained from the solution of Richards’ equation:

$$[c(h) + S_s S_w(\theta)] \frac{\partial H}{\partial t} + \nabla \cdot q = f \tag{5}$$

where $H[L]$ is the hydraulic head such that $H=h+z$ with $h[L]$ the pressure head and $z[L]$ the depth taken positively upward, $S_s[L^{-1}]$ the specific storage; $S_w[-]$ the relative saturation of the aqueous phase ($S_w = \theta/\theta_s$); $\theta_s[-]$ the saturated water content; $c(h)[L^{-1}]$ the specific moisture capacity ($c(h) = d\theta/dh$); $f [T^{-1}]$ the source-sink term; $q = -K(h) \cdot \nabla H$ the Darcy’s water velocity and $K(h)[L \cdot T^{-1}]$ the hydraulic conductivity.

The interdependencies of the pressure head, hydraulic conductivity and water content are characterized by their constitutive equations. In this study, we use the standard models of Mualem (1976) and van Genuchten (1980):

$$S_e(h) = \frac{\theta(h) - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \begin{cases} \frac{1}{(1+|\alpha h^n|)^{(1-1/n)}} & h < 0 \\ 1 & h \geq 0 \end{cases} \tag{6}$$

$$K(S_e) = K_s S_e^{1/2} \left[1 - \left(1 - S_e^{(n/(n-1))} \right)^{(1-1/n)} \right]^2$$

of Dirichlet, Neumann, or total flux boundary conditions.

SNIA splits the nonlinear system (Eq. 1) into a system of linear partial differential equations for advection–dispersion to find the trial solution $C_i^{n+1,*}$:

where $S_e[-]$ is the effective saturation, $\theta_r[-]$ the residual water content, $K_s[L \cdot T^{-1}]$ the saturated conductivity, and α and n the van Genuchten soil parameters.

Note that in the literature, the pressure-head form (Eq. 5) is often avoided since the mixed form of the Richards’ equation presents better conservation properties. However, it was demonstrated (Tocci et al. 1997) that higher order numerical integration is effective for solving the pressure head form (Eq. 5).

3 The Numerical Model

The coupled system of Eqs. 1, 2, 3, 4, 5, and 6 is solved on an unstructured triangular mesh in a sequential way. First, the unsaturated flow system (Eqs. 5 and 6) is solved using the mixed finite element (MFE) method for the spatial discretization and higher order methods for the temporal discretization via the method of lines. The MFE method gives accurate and consistent velocity field even for highly heterogeneous domains (Younes et al. 2010), and it was also shown to be efficient for solving Richards’ equation (Bergamaschi and Putti 1999; Farthing et al. 2003; Bause and Knabner 2004a; Belfort et al. 2009; Fahs et al. 2009b). With the MFE formulation, the velocity is defined everywhere in the field and it is continuous across the interelement boundaries. To perform the tracking, each particle inside an element moves by following the MFE velocity of that element until it reaches an exit point. Then, this point becomes the entry point of the downstream element. During the procedure, the residence time (time of flight) is also stored when leaving each element. The final position is reached

when the residence time equals the time step length.

During the simulation of the unsaturated flow, the distribution of Darcy’s velocity and the water content within the domain are stored at different times and are used eventually when solving the transport equation.

3.1 The ELLAM Formulation for Transport in the Unsaturated Zone

In this section, we briefly summarize the main stages of the ELLAM for the resolution of the advection–dispersion equation in the context of transport in the unsaturated zone. For simplicity, the transport equation is written in the following form:

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \nabla \cdot (qC) - \nabla \cdot (D \cdot \nabla C) = 0 \tag{7}$$

$$\int_{\Omega} \theta^{n+1} C^{n+1} \omega_i^{n+1} dx + \int_0^T \int_{\Omega} (D \cdot \nabla C) \cdot \nabla \omega_i dx dt + \int_0^T \int_{\partial\Omega} [(qC - D \cdot \nabla C) \omega_i] \eta_{\partial\Omega} dx dt = \int_{\Omega} \theta^n C^n \omega_i^n dx \tag{10}$$

The concentration C is defined within a finite element framework as a combination of piecewise linear basis functions. Therefore, the first integral in the left hand side of Eq. 10, represents the standard finite element mass integral. Using the mass lumping procedure, it leads to:

$$\int_{\Omega} \theta^{n+1} C^{n+1} \omega_i^{n+1}(x) dx = \left(\sum_{E \ni i} \frac{|E| \theta_E^{n+1}}{3} \right) C_i^{n+1} \tag{11}$$

In this equation, $E \ni i$ represents all elements E sharing the node i , θ_E^{n+1} is the volumetric water content of E at the new time t^{n+1} and $|E|$ the area of E .

The second term in Eq. 10 represents the exchange by dispersion. This term is integrated over time using a one step backward Euler approximation:

$$\int_0^T \int_{\Omega} (D \cdot \nabla C) \cdot \nabla \omega_i dx dt = \Delta t(x) \int_{\Omega} (D_{eq} \cdot \nabla C^{n+1}) \cdot \nabla \omega_i^{n+1} dx \tag{12}$$

Note that the time step size $\Delta t(x)$ in this integral is reduced for elements near the inflow boundary

The weak formulation of Eq. 7, using space–time test function $\omega(x, t)$, leads to:

$$\int_0^T \int_{\Omega} \left[\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} \omega + \nabla \cdot (qC) \omega - \nabla \cdot (D \cdot \nabla C) \omega \right] dx \cdot dt = 0 \tag{8}$$

The ELLAM selects test functions $\omega = \omega(x, t)$ constant along the characteristics:

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{q}{\theta} \cdot \nabla \omega = 0 \tag{9}$$

The functions $\omega(x, t)$ is discontinuous at the old time t^n and verifies $\omega(x, t) = 0$ for $t \notin [t^n, t^{n+1}]$. At the new time t^{n+1} , $\omega_i(x, t^{n+1})$ is the piecewise linear function in space (chapeau function). Thus, using the Green’s theorem and expression of Eq. 9, the weak formulation can be written as follows (for details, see Younes et al. 2006):

(Younes et al. 2006). Furthermore, an equivalent dispersion tensor D_{eq} is used instead of D^{n+1} in the expression (Eq. 12). Indeed, as suggested in (Fahs et al. 2009a; Ramasomanana and Younes 2011), D^{n+1} is not representative of the dispersion experienced along the characteristic between t^n and t^{n+1} , and it can generate errors for large time steps. To evaluate the equivalent dispersion tensor D_{eq} , the dispersion tensors D_{E_j} for all crossed element E_j between t^n and t^{n+1} are monitored and stored as well as the duration Δt_{E_j} required to cross each element E_j . The equivalent dispersion coefficient D_{eq} is then calculated by:

$$D_{eq} = \frac{1}{\Delta t(x)} \sum_j \Delta t_{E_j} D_{E_j} \tag{13}$$

The equivalent dispersion tensor is hence the arithmetic mean of local dispersion tensors weighted by the mean times spent under the influence of these local values. The use of D_{eq} instead of D^{n+1} improves the results for large time steps (Fahs et al. 2009a; Ramasomanana and Younes 2011).

The third term and the right-hand term in Eq. 10 correspond, respectively, to the boundary conditions

and the mass at the old time level. These terms are calculated numerically. For simplicity, only the integral of the mass at the old time level is developed here. This integral can be approximated by:

$$\int_{\Omega} \theta^n C^n \omega_i^n(x) dx = \sum_{E \supset i} \theta_E^n \sum_{p=1}^{N_E} C^n(x^p, t^n) \omega_i(x^p, t^n) W^p \quad (14)$$

where N_E is the number of spatial integration points for each element E and W^p the weight of the numerical integration point (p). To evaluate $\omega_i(x^p, t^n)$ the location in space of x^p at the time t^n is tracked forward to \tilde{x}^p at t^{n+1} and the relation $\omega_i(x^p, t^n) = \omega_i(\tilde{x}^p, t^{n+1})$ is used.

3.2 The Numerical Strategy

To avoid numerical diffusion due to interpolation when small time steps are used, the advection–dispersion–reaction system (Eqs. 1, 2, 3, and 4) is solved according to the following:

- Only strategic points are used as numerical integration points. The location and weights of these points are assigned at the new time level. The points are then backtracked to the old time level without redistributing the weights. The total number of integration points is proportional to the number of time steps multiplied by the number of the integration points P per element. If $P=1$, the integration point is located at x_j , which corresponds to the center of the element and W_j^{space} corresponds to its area. If $P=4$, the triangular element is subdivided into 4 equal subtriangles (by joining the edge midpoints), x_j corresponds to the center of each subtriangle, and W_j^{space} corresponds to the area of the subtriangle.
- The solution of the system (Eq. 10) gives the concentrations at the nodes of the mesh due to the advection–dispersion processes ($C_i^{adv+disp}$) at the new time level ($n+1$). This calculation is based only on the strategic integration points corresponding to that time level.
- The concentrations $C_i^{adv+disp}$ are then used as initial concentrations to solve the chemical Eq. 4 at the node level providing thus that the node

concentrations as a result of the advection–dispersion–reaction processes ($C_i^{adv+disp+react}$).

- The concentration at the integration points of the subsequent time steps is updated by interpolating only the changes in concentration due to the dispersion and the chemical processes:

$$C_p^n = C_p^{adv} + C_p^{disp+react} \quad (15)$$

where C_p^{adv} is the concentration of the particle (p) due to the advection process and $C_p^{disp+react}$ the concentration of (p) due to the chemical and dispersion processes obtained by interpolating the nodal values $C_i^{disp+react}$ which are calculated as follows:

$$C_i^{disp+react} = C_i^{adv+disp+react} - C_i^{adv} \quad (16)$$

where C_i^{adv} represents the nodal concentration due to advection, calculated from Eq. 10 with zero dispersion. Note that using the mass lumping technique, this procedure can be done locally at the node level and there is no linear system to be solved in this case.

Finally, it is relevant to recall that specific time step sizes are used for the time discretization of the Richards' equation. Therefore, during the tracking process, the velocity field is updated periodically based on the time discretization of the flow. As a general rule, specific time step size is used for the integration (over time) of the nonlinear chemical equations.

4 Numerical Experiments

In this section, the performance and the accuracy of the developed model, named ELLAM_REACT, are compared against those of an existing numerical model based on a combination of discontinuous Galerkin and multipoint flux approximation methods (DGMPFA_REACT). In this model, the discontinuous Galerkin (DG) method is used to discretize the advection equation and is combined with the multipoint flux approximation (MPFA) method for the discretization of the dispersion equation (Younes and Ackerer 2008). The DG method leads to robust and accurate numerical results for problems involving sharp fronts (Shuangzhang and Shahrouz 2005). The

MPFA method is locally conservative and handles well general irregular grids on anisotropic heterogeneous domains (Younes and Fontaine 2008). Because it is an explicit scheme, the Courant criterion (CFL) has to be fulfilled which may lead to very small time steps for unstructured meshes.

The SNIA is then used for coupling transport and reaction processes with both ELLAM_REACT and DGMPFA_REACT models. The chemical equations are solved using the Runge–Kutta method with small subtime steps.

In order to assess the accuracy and the efficiency of both models, three test cases sourced from the literature are employed. They describe reactive transport in saturated and unsaturated porous media with chemical reactions involving mobile chemical species solely or both fixed and mobile species.

The first case describes the degradation of PCE in saturated porous media (Clement et al. 1998) and analyses the performance of the models in the case of chemical reactions involving only mobile species. The second and third test cases are the *m*-xylene degradation in saturated and unsaturated flow regime, respectively. These latter test cases provide the behavior of the models when chemical reactions involve both fixed and mobile species.

4.1 The Degradation of the Tetrachloroethene PCE

This test case, inspired from Clement et al. (1998), deals with the degradation of the tetrachloroethene PCE in saturated porous media. It involves four mobile chemical species ($N_c=4$), namely the PCE and its degradation products: the trichloroethene (TCE), the dichloroethene (DCE), and the vinyl chloride (VC). Under the assumption of first-order sequential kinetic biodegradation and biotransformation of PCE and its degradation products, the reaction equations are:

$$\begin{aligned} R_1 &= \frac{d}{dt}[\text{PCE}] = -K_{\text{PCE}}[\text{PCE}] \\ R_2 &= \frac{d}{dt}[\text{TCE}] = Y_{\text{TCE/PCE}}K_{\text{PCE}}[\text{PCE}] - K_{\text{TCE}}[\text{TCE}] \\ R_3 &= \frac{d}{dt}[\text{DCE}] = Y_{\text{DCE/TCE}}K_{\text{TCE}}[\text{TCE}] - K_{\text{DCE}}[\text{DCE}] \\ R_4 &= \frac{d}{dt}[\text{VC}] = Y_{\text{VC/DCE}}K_{\text{DCE}}[\text{DCE}] - K_{\text{VC}}[\text{VC}] \end{aligned} \quad (17)$$

where [PCE], [TCE], [DCE], and [VC] are the concentrations of the respective contaminants. The first-order degradation rates K_{PCE} , K_{TCE} , K_{DCE} , and K_{VC} are 0.005, 0.003, 0.002, and 0.001 day^{-1} , respectively. The yield coefficients $Y_{\text{TCE/PCE}}$, $Y_{\text{DCE/TCE}}$, and $Y_{\text{VC/DCE}}$ are computed from stoichiometric relations and correspond to 0.79, 0.74, and 0.64, respectively.

The spatial domain is a rectangular confined aquifer of 500 m length and 300 m wide. A continuous source introducing PCE at the rate of $2 \text{ m}^3\text{day}^{-1}$ with a concentration of 200 mg l^{-1} is located within the domain at (135,135). Initially, the domain is assumed free of contaminant. Boundary conditions for the flow are a constant flux of $1/3 \text{ m day}^{-1}$ at the left boundary and a prescribed head of 10 m at the right boundary of the domain. The porosity is 0.3, the longitudinal and the transverse dispersivities are 3 and 1 m, respectively. The overall duration of the simulation is 3 years. A zero concentration is prescribed at the inlet boundary, and free boundary condition is assumed at the exit boundary. The spatial domain is discretized using an unstructured triangular mesh of 13,640 elements with a local refinement around the source.

Due to the CFL restriction, the simulation of this test case with DGMPFA_REACT requires a transport time step of $\Delta t = 1.35$ days. Two simulations, ELLAM_REACT1 and ELLAM_REACT2 with a small transport time step of $\Delta t = 15$ days and a large transport time step of $\Delta t = 182.5$ days respectively were performed using ELLAM_REACT. For all simulations, the time step for the chemical equations is fixed to $\Delta t = 0.01$ days regardless of the transport time step size.

Figure 1 shows the spatial distribution (isolines) of the TCE and DCE at the end of the simulation (after 3 years). The two models ELLAM_REACT and DGMPFA_REACT give similar results. The results of ELLAM_REACT1 are very close to the results of ELLAM_REACT2. This shows that the ELLAM_REACT can be used with large time steps without altering the accuracy of the results when the reactions involve only aqueous species. Indeed, in this case, the mass balance error (Valocchi and Malmstead 1992; Kaluarachchi and Morshed 1995), introduced by SNIA, is removed with ELLAM (for details, see Younes and Fahs 2007).

With respect to the efficiency, DGMPFA_REACT requires 273 s for the whole simulation, whereas

ELLAM_REACT1 and ELLAM_REACT2 require 143 and 32 s, respectively. For this test case ELLAM_REACT2 is highly efficient, it provides accurate results with eight times less CPU time than DGMPFA_REACT.

4.2 The *m*-Xylene Degradation in Saturated Flow Regime

This test case was developed by Bause and Knabner (2004b). It deals with biochemical degradation of the *m*-xylene in porous media. The microbial activity in the subsurface depends on the bioavailability of all substrates utilized by the microorganisms. The main substrates are the electron donor *D*, the electron acceptor *A*, and the primary carbon source *X*. The electron donor and the electron acceptor can be modeled as mobile species whereas the carbon source is considered as fixed species. The chemical reactions are modeled using Monod kinetics:

$$\begin{aligned}
 R_1 &= \frac{d}{dt}(\theta C_D) = -\mu \\
 R_2 &= \frac{d}{dt}(\theta C_A) = -\alpha_{A/D}\mu \\
 R_3 &= \frac{dC_X}{dt} = \frac{Y}{\theta} \left(1 - \frac{C_X}{C_{X\max}}\right)\mu - k_d C_X
 \end{aligned}
 \tag{18}$$

where the Monod term $\mu[L \cdot T^{-1}]$ is defined by

$$\mu = \theta \mu_{\max} C_X \frac{C_D}{K_D + C_D} \frac{K_{ID}}{K_{ID} + C_D} \times \frac{C_A}{K_A + C_A} \frac{K_{IA}}{K_{IA} + C_A}
 \tag{19}$$

In Eq. 18, the constant $\alpha_{A/D}$ denotes the electron acceptor to donor mass ratio, $k_d[T^{-1}]$ the first-order decay rate for the biomass, *Y* the microbial yield coefficient per unit electron donor consumed and $C_{X\max}[M \cdot L^{-3}]$ the maximum biomass concentration. In Eq. 19 $\mu_{\max}[T^{-1}]$ denotes the maximum growth rate, $K_{i=D,A}[M \cdot L^{-3}]$ the half utilization constant of the electron donor and acceptor and $K_{i=ID,IA}[M \cdot L^{-3}]$ the Haldane inhibition concentration of the electron donor and acceptor.

For the simulation, we use the following values for the parameters: $\alpha_{A/D} = 2.16$, $k_d = 0.025 \text{ day}^{-1}$, $Y = 0.52$, $C_{X\max} = 1.0 \text{ mg l}^{-1}$, $\mu_{\max} = 1.13 \text{ day}^{-1}$, $K_D = 7.9 \times 10^{-1} \text{ mg l}^{-1}$, $K_A = 1.0 \times 10^{-1} \text{ mg l}^{-1}$, $K_{ID} = 9.17 \times 10^{-1} \text{ mg l}^{-1}$ and $K_{IA} = \infty$.

The spatial domain is a rectangular shape ($6 \times 10 \text{ m}$) including two impermeable regions denoted by E_1 and E_2 (Fig. 2). The domain is discretized with an unstructured triangular mesh of 12,378 elements (Fig. 2). The fluid flow through the domain is assumed to be steady state with a conductivity $K_s = 4.5 \times 10^{-2} \text{ m day}^{-1}$. The flow boundary conditions are the following:

$$\begin{cases} H = 0 \text{ m} & \text{for } x \in [0, 6] \times \{0\} \\ H = 20 \text{ m} & \text{for } x \in [0, 6] \times \{10\} \\ K_s \nabla h = 0 \text{ m day}^{-1} & \text{elsewhere.} \end{cases}
 \tag{20}$$

The electron donor *m*-xylene is injected at the upper inflow boundary with

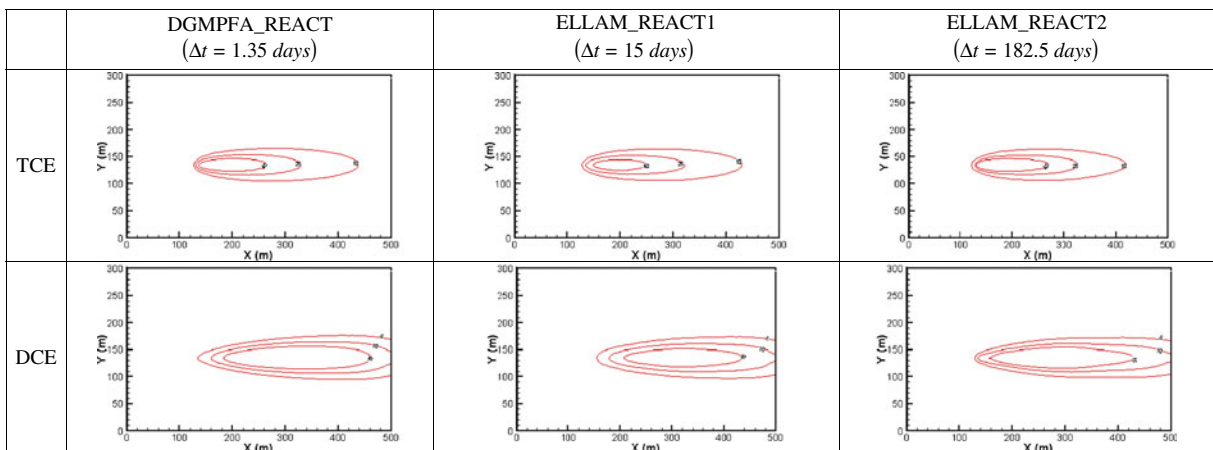


Fig. 1 Spatial distribution of the TCE and the DCE after 3 years

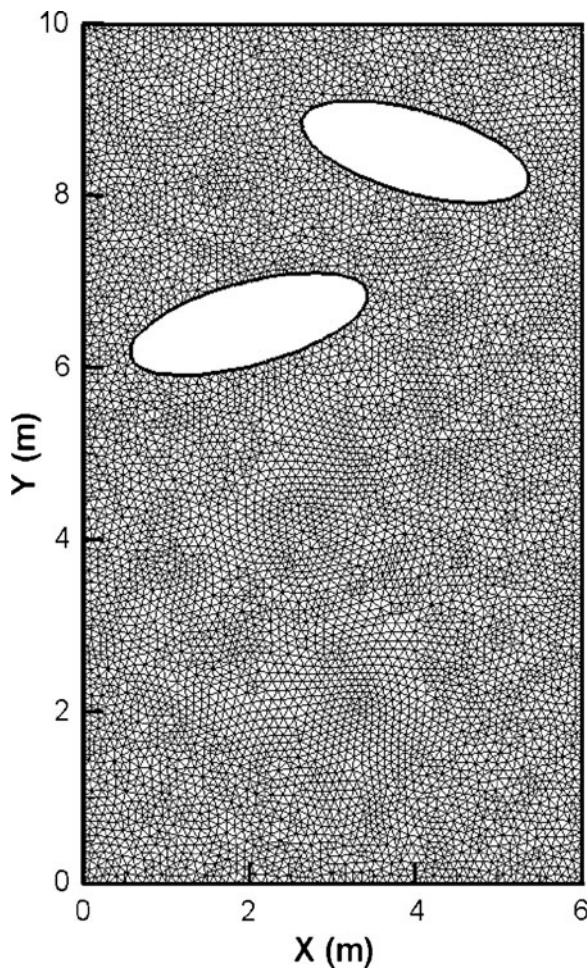


Fig. 2 The spatial domain and the mesh grid for the second test case

$$\begin{cases} C_D(t, x) = 2.24 \text{ mg l}^{-1} \\ C_A(t, x) = 2.55 \text{ mg l}^{-1} \end{cases} \quad \text{for } x \in [1, 5] \times \{10\}$$

$$\begin{cases} C_D(t, x) = 0.0 \text{ mg l}^{-1} \\ C_A(t, x) = 2.0 \text{ mg l}^{-1} \end{cases} \quad \text{for } x \in ([0, 1] \cup [5, 6]) \times \{10\}. \quad (21)$$

The porosity is 0.33, the dispersivities $\alpha_L = 0.36$ m and $\alpha_T = 0.03$ m and the molecular diffusion $D_m = 7.4 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ day}^{-1}$. The initial conditions for the chemical species are: $C_D(0, x) = 0.0 \text{ mg l}^{-1}$, $C_A(0, x) = 2.0 \text{ mg l}^{-1}$, and $C_X(0, x) = 3.0 \times 10^{-2} \text{ mg l}^{-1}$. The duration of the simulation is $T=300$ days.

The simulation of this test case with the DGMPFA_REACT model requires a time step $\Delta t = 0.04$ days due to the CFL restriction. Two

simulations ELLAM_REACT1 and ELLAM_REACT2 with a small transport time step of $\Delta t = 2$ days and a large transport time step of $\Delta t = 60$ days respectively were performed with ELLAM_REACT. The chemical equations are solved with a fixed small time step $\Delta t = 0.01$ days for all models.

The results of these simulations are presented in Fig. 3. This figure illustrates the spatial distribution of the mobile (donor) and fixed (biomass) species after 300 days. ELLAM_REACT1 and DGMPFA_REACT give similar results. This shows that ELLAM_REACT can give accurate results for the simulation of 2D reactive transport problems involving both mobile and fixed species. Figure 3 shows also that results of ELLAM_REACT2 are different from those of DGMPFA_REACT. The difference is due to the OS errors. Indeed, it is well known that OS errors generate numerical diffusion proportional to Δt smearing sharp concentration fronts (Herzer and Kinzelbach 1989; Barry et al. 1997). Contrarily to the first problem, this error cannot be removed with ELLAM. Therefore special attention should be given to the choice of the time step size in order to minimize this error.

Regarding efficiency, the results of ELLAM_REACT2 are not accurate and therefore are not considered for the comparison. The CPU times with DGMPFA_REACT and ELLAM_REACT1 are 750 and 200 s, respectively. Therefore, ELLAM_REACT provides accurate results using four times less CPU time than DGMPFA_REACT.

4.3 The *m*-Xylene Degradation in Variably Saturated Flow Regime

The previous problem is now simulated considering an unsaturated porous media as suggested in Bause and Knabner (2004b). The parameters of the soil are: $\theta_r = 0.031$, $\theta_s = 0.396$, $\alpha = 0.423$, $n = 2.06$, and $K_s = 4.96 \times 10^{-2} \text{ m day}^{-1}$. The spatial domain is illustrated in Fig. 4.

The initial condition for the hydraulic head is

$$H(0, x) = 1.0 \text{ m} \quad \text{for } x \in \Omega = (0, 2) \times (0, 3) \setminus (R_1 \cup R_2) \quad (22)$$

where $R_1 = [0, 1.2] \times [2.25, 2.50]$ and $R_2 = [0.8, 2.0] \times [1.5, 1.75]$.

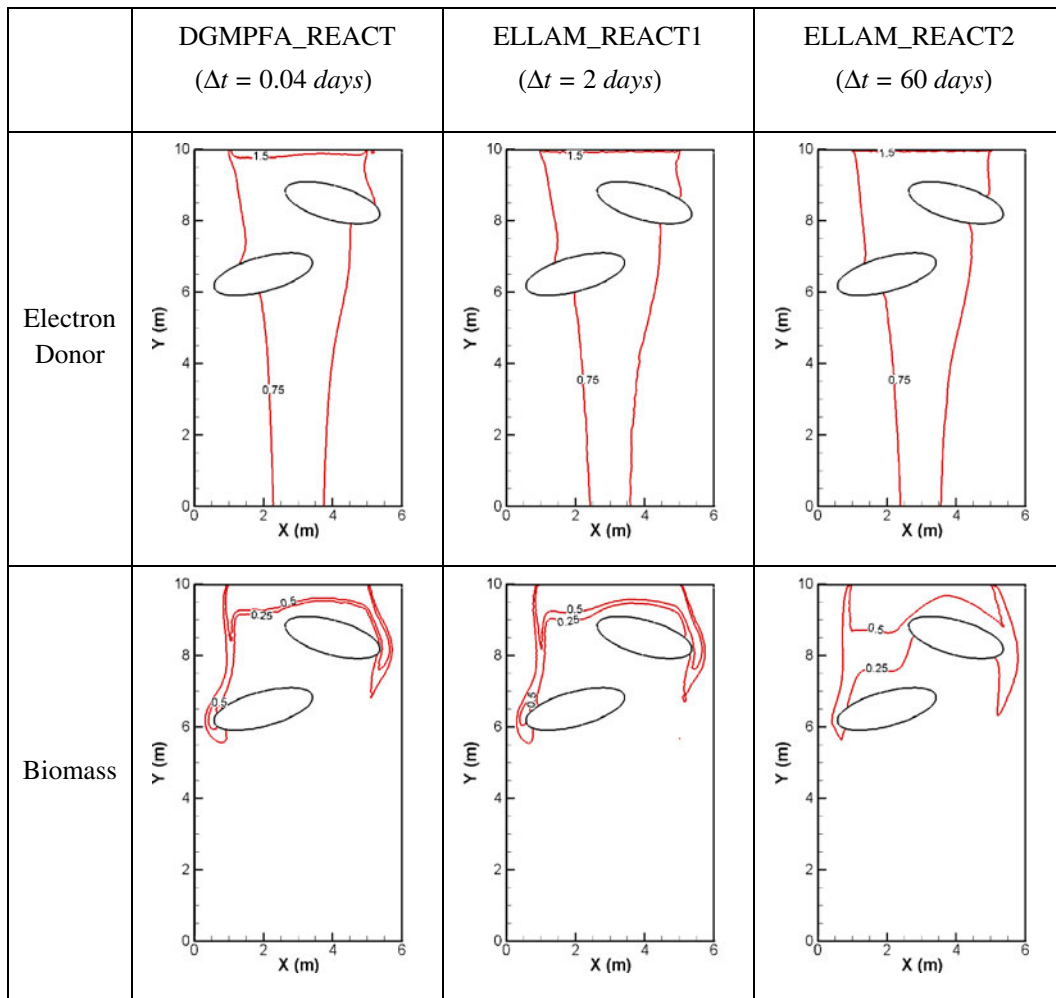


Fig. 3 Spatial distribution of electron donor and biomass in the saturated porous media

Dirichlet flow boundary conditions are prescribed as follows:

$$H = \begin{cases} 3.20 \text{ m} & \text{for } t \in [7i, 7(i + 1)] \\ 1.0 \text{ m} & \text{for } t \in [7(i + 1), 7(i + 2)] \end{cases} \quad \text{for } x \in [0, 1] \times \{3\}, i = 0, 2, 4, \dots \quad (23)$$

$$H = \{1.0 \text{ m} \quad \text{for } t > 0, x \in \{2\} \times [0, 1]$$

A zero normal flux is prescribed for the rest of boundaries.

The initial conditions for the species inside Ω are: $C_D(0, x) = 0 \text{ mg l}^{-1}$, $C_A(0, x) = 2.0 \text{ mg l}^{-1}$, and $C_X(0, x) = 3.0 \times 10^{-3} \text{ mg l}^{-1}$. The contaminant *m*-xylene is injected at the upper inflow boundary with:

$$\begin{cases} C_D(t, x) = 3.36 \text{ mg l}^{-1} \\ C_A(t, x) = 2.55 \text{ mg l}^{-1} \end{cases} \quad \text{for } x \in [0, 1] \times \{3\}. \quad (24)$$

The duration of the simulation is 300 days. The domain is discretized with 7,500 triangular elements as shown in Fig. 4.

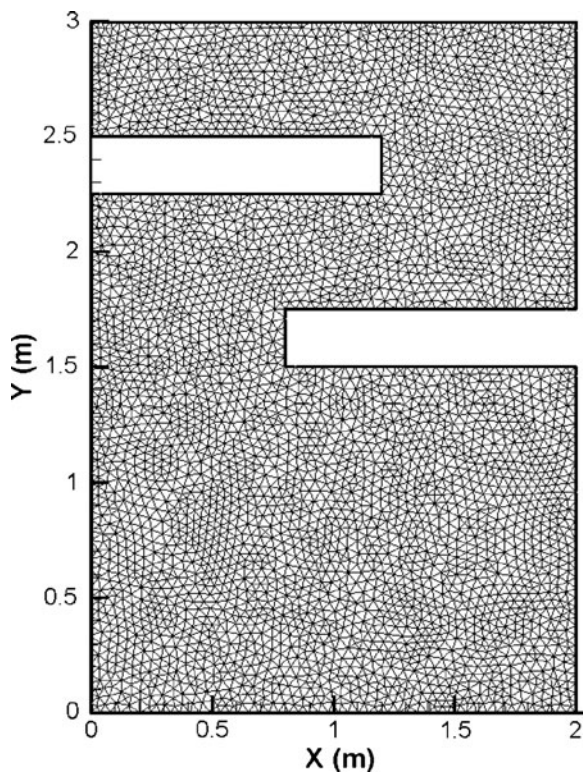


Fig. 4 The spatial domain and the mesh grid for the third test case

The problem is first simulated with the DGMPFA_REACT using a time step of $\Delta t=0.05$ days to respect the CFL criterion. Two simulations are performed with ELLAM_REACT, the first ELLAM_REACT1 uses a small time step of $\Delta t=0.05$ days and the second ELLAM_REACT2 uses a large time step of $\Delta t=$

25 days. The flow time step size is fixed to 0.05 days, which corresponds to the transport time step size of DGMPFA_REACT. The time step for the chemical equations is fixed to $\Delta t=0.01$ days.

Figure 5 shows that DGMPFA_REACT and ELLAM_REACT1 give similar results while the results of ELLAM_REACT2 are different. ELLAM_REACT can be used to accurately simulate reactive transport involving mobile and fixed species in unsaturated soils, however, as for the saturated case, small time steps should be used to reduce OS errors.

Concerning efficiency, ELLAM_REACT1 and DGMPFA_REACT require 520 and 540 s, respectively, to perform the simulation. Contrarily to the saturated case and despite the fact that ELLAM_REACT1 uses 10 times larger time steps than DGMPFA_REACT, the two models have comparable performances. This phenomenon is due to the computational effort required by the tracking process which becomes more significant for unsaturated flow since the velocity becomes transient and different velocity fields are used for the tracking. Indeed, for the simulated case, the CPU time required by the tracking is around 75% of the total CPU time of the simulation.

Note that if we use smaller time steps, the performances of ELLAM_REACT can be significantly altered since the number of integration points to be tracked is proportional to the number of elements multiplied by the number of time steps. This has an impact on both the memory requirement and the computational time of the method. To overcome this

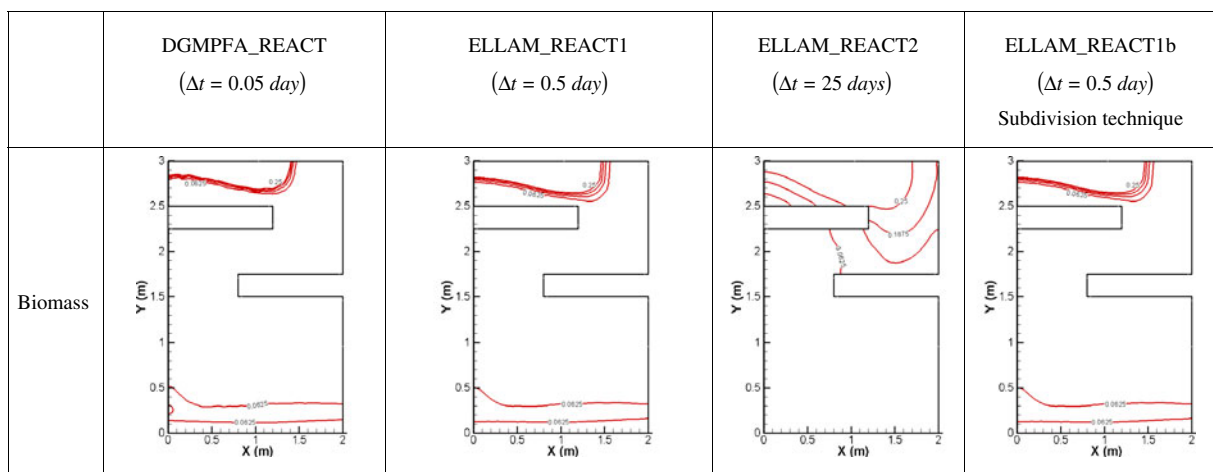


Fig. 5 Spatial distribution of biomass in the unsaturated porous media

problem and to improve the efficiency of ELLAM_REACT, we subdivide the duration of the simulation into a few number of time periods (denoted by ndt) and we keep the characteristics continuous only for those time steps included in the time period. When starting a new time period, the concentration at the foot of each characteristic is calculated by interpolating the concentration of the nodes. In this way, the number of integration points can be divided by the number of time periods ndt .

Considering the above, the same problem is now simulated with ELLAM_REACT1b, which uses the same step size of $\Delta t=0.5$ days as ELLAM_REACT1 but the duration of the simulation is subdivided into 10 periods ($ndt=10$). As it can be seen in Fig. 5 that the results of ELLAM_REACT1b are comparable to the results obtained with ELLAM_REACT1. This shows that the numerical diffusion caused by the interpolation is very limited due to a reduced number of time periods (10) compared to the number of time steps (400). The efficiency of ELLAM_REACT has also significantly improved. The memory requirement for ELLAM_REACT1b is now lower than for ELLAM_REACT1, and the CPU time of ELLAM_REACT1b is 130 s. Therefore, with the subdivision technique, ELLAM_REACT is four times more efficient than DGMPFA_REACT even for unsaturated reactive transport problems involving both fixed and mobile species.

5 Conclusion

The aim of the present work is to assess the accuracy and efficiency of a new 2D model for multicomponent reactive transport in saturated/unsaturated porous media.

The new model, called ELLAM_REACT, combines the ELLAM formulation of Younes et al. (2006) for advection–dispersion transport with the SNIA to accurately solve the multicomponent reactive transport. The ELLAM_REACT model uses continuous characteristics and only changes due to dispersion, and chemical processes are interpolated. The performance and the accuracy of ELLAM_REACT have been compared against those of an existing numerical model based on a combination of discontinuous Galerkin and multipoint flux approximation methods (DGMPFA_REACT). Three test cases have been considered.

In the first test case, reactive transport with chemical reactions involving only aqueous species was simulated. Results show that ELLAM_REACT is highly efficient, and it maintains its high accuracy when large time steps are considered.

The second case considered for simulation was reactive transport in saturated porous media with chemical reactions involving both aqueous and fixed species. The new model ELLAM_REACT proves again to be more efficient than DGMPFA_REACT. However, ELLAM_REACT requires small time steps to avoid numerical diffusion due to OS errors.

Finally, reactive transport test in unsaturated porous media with both fixed and mobile species was simulated. This case scenario shows that the efficiency of ELLAM_REACT can be negatively affected when small time steps are used due to a significant increase in the number of particles to be tracked and also due to the computational effort required for the tracking process when dealing with transient unsaturated flow. To overcome this problem, the duration of the simulation is subdivided into a few number of time periods where characteristics remain continuous only for time steps included in the time period. By using this technique, ELLAM_REACT is found again to be more efficient than DGMPFA_REACT.

Acknowledgments This work was partly carried out within the framework of the GdR MoMas CNRS-2439 sponsored by ANDRA, BRGM, CEA, and EDF. Their support is duly acknowledged.

References

- Barry, D. A., Bajracharya, K., & Miller, C. T. (1996). Alternative split-operator approach for solving chemical reaction/groundwater transports models. *Advances in Water Resources*, 19, 261–275.
- Barry, D. A., Miller, C. T., Culligan, P. J., & Bajracharya, K. (1997). Analysis of split operator methods for nonlinear and multispecies groundwater chemical transport models. *Mathematics and Computers in Simulation*, 43, 331–341.
- Bause, M., & Knabner, P. (2004a). Computation of variably saturated subsurface flow by adaptative mixed hybrid finite element methods. *Advances in Water Resources*, 27, 565–581.
- Bause, M., & Knabner, P. (2004b). Numerical simulation of contaminant biodegradation by higher order methods and adaptive time stepping. *Computing and Visualization in Science*, 7, 61–78.
- Belfort, B., Ramasomanana, F., Younes, A., & Lehmann, F. (2009). An efficient lumped mixed hybrid finite element

- formulation for variably saturated groundwater flow. *Vadose Zone Journal*, 8, 352–362.
- Bell, L. S. J., & Binning, P. J. (2004). A split operator approach to reactive transport with the forward particle tracking Eulerian-Lagrangian localized adjoint method. *Advances in Water Resources*, 27, 323–334.
- Bergamaschi, L., & Putti, M. (1999). Mixed finite elements and Newton-type linearizations for the solution of Richards' equation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45, 1025–1046.
- Binning, P., & Celia, M. A. (1996). A finite volume Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for solution of the contaminant transport equations in two-dimensional multiphase flow systems. *Water Resources Research*, 32, 103–114.
- Carrayrou, J., Mosé, R., & Behra, P. (2002). New efficient algorithm for solving thermodynamic chemistry. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 48, 894–904.
- Carrayrou, J., Mosé, R., & Behra, P. (2004). Operator-splitting procedures for reactive transport and comparison of mass balance errors. *Journal of Contaminant Hydrology*, 68, 239–268.
- Celia, M. A., Russell, T. F., Herrera, I., & Ewing, R. E. (1990). An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for the advection-diffusion equation. *Advances in Water Resources*, 13, 187–206.
- Clement, T. P., Sun, Y., Hooker, B. S., & Petersen, J. N. (1998). Modeling multispecies reactive transport in ground water. *Ground Water Monitoring & Remediation*, 18(2), 79–92.
- Fahs, M., Carrayrou, J., Younes, A., & Ackerer, P. (2008). On the efficiency of the direct substitution approach for reactive transport problems in porous media. *Water, Air, and Soil Pollution*, 193, 1–4.
- Fahs, M., Younes, A., & Delay, F. (2009). On the use of large time steps with ELLAM for transport with kinetic reactions over heterogeneous domains. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 55, 1121–1126.
- Fahs, M., Younes, A., & Lehmann, F. (2009). An easy and efficient combination of the mixed finite element method and the method of lines for the resolution of Richards' equation. *Environmental Modelling & Software*, 24, 1122–1126.
- Farthing, M. W., Kess, C. E., & Miller, C. T. (2003). Mixed finite element methods and higher order temporal approximations for variably saturated groundwater flow. *Advances in Water Resources*, 26, 373–394.
- Farthing, M. W., Kess, C. E., Russell, T. F., & Miller, C. T. (2006). An ELLAM approximation for advective-dispersive transport with nonlinear sorption. *Advances in Water Resources*, 29, 657–675.
- Healy, R. W., & Russell, T. F. (1993). A finite-volume Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for solution of the advection-dispersion equation. *Water Resources Research*, 29, 2399–2413.
- Healy, R. W., & Russell, T. F. (1998). Solution of the advection-dispersion equation in two dimensions by a finite-volume Eulerian-Lagrangian localized adjoint method. *Advances in Water Resources*, 21, 11–26.
- Herzer, J., & Kinzelbach, W. (1989). Coupling of transport and chemical processes in numerical transport models. *Geoderma*, 44, 115–127.
- Kaluarachchi, J. J., & Morshed, J. (1995). Critical assessment of the operator-splitting technique in solving the advection-dispersion-reaction equation: I. First-order reaction. *Advances in Water Resources*, 18, 89–100.
- Miller, C. T., & Rabideau, A. J. (1993). Development of split-operator, Petrov-Galerkin methods to simulate transport and diffusion problems. *Water Resources Research*, 29, 2227–2240.
- Mualem, Y. (1976). A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resources Research*, 12, 513–522.
- Ramasomanana, F., & Younes, A. (2011). Efficiency of the Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for solving advection-dispersion equation on highly heterogeneous media. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 66 (in press).
- Shuangzhang, T., & Shahrouz, A. (2005). A slope limiting procedure in discontinuous Galerkin finite element method for gas dynamics applications. *International Journal of Numerical Analysis and Modeling*, 2, 163–178.
- Tocci, M. D., Kelley, C. T., & Miller, C. T. (1997). Accurate and economical solution of the pressure-head form of Richards' equation by the method of lines. *Advances in Water Resources*, 20(1), 1–14.
- Vag, J. E., Wang, H., & Dahle, H. K. (1996). Eulerian-Lagrangian localized adjoint methods for systems of nonlinear advective-diffusive-reactive transport equations. *Advances in Water Resources*, 19, 297–315.
- Valocchi, A. J., & Malmstead, M. (1992). Accuracy of operator splitting for advection-dispersion reaction problems. *Water Resources Research*, 28, 1471–1476.
- van Genuchten, M. T. (1980). A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44, 892–898.
- Wang, H., Ewing, R. E., & Celia, M. A. (1995). Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for reactive transport with biodegradation. *Numerical Methods Partial for Differential Equations*, 11, 229–254.
- Younes, A. (2004a). An accurate moving grid Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for solving the one-dimensional variable-coefficient ADE. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 45, 157–178.
- Younes, A. (2004b). Modélisation du transport réactif en milieux poreux non saturés avec une méthode ELLAM en maillage variable. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Géosciences*, 336, 547–552.
- Younes, A., & Ackerer, P. (2005). Solving the advection-diffusion equation with the Eulerian-Lagrangian localized adjoint method on unstructured meshes and non uniform time stepping. *Journal of Computational Physics*, 208, 384–402.
- Younes, A., & Ackerer, P. (2008). Solving the advection-dispersion equation with discontinuous Galerkin and multipoint flux approximation methods on unstructured meshes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 58, 687–708.
- Younes, A., & Fahs, M. (2007). Direct and split operator approaches with ELLAM for reactive transport equations. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 53, 2161–2169.

- Younes, A., & Fontaine, V. (2008). Hybrid and multi-point formulations of the lowest-order mixed methods for Darcy's flow on triangles. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 58, 1041–1062.
- Younes, A., Ackerer, P., & Lehmann, F. (2006). A new efficient Eulerian–Lagrangian localized adjoint method for solving the advection–dispersion equation on unstructured meshes. *Advances in Water Resources*, 29, 1056–1074.
- Younes, A., Ackerer, P., & Delay, F. (2010). Mixed finite elements for solving 2-D diffusion-type equations. *Reviews of Geophysics*, 48.

4.6 Conclusion

Initialement développée pour la résolution du transport linéaire en milieu homogène, nous avons étendu le schéma C_ELLAM pour traiter, dans un premier temps, le transport linéaire en milieux fortement hétérogènes incluant des termes puits/sources, puis par la suite, le transport réactif. Nous proposons une prise en compte rigoureuse du terme de dispersion lors de l'utilisation de grands pas de temps. En outre, une procédure d'interpolation permet de limiter les besoins en espace mémoire et améliore également les temps de calcul pour des nombres de mailles importants ou lorsque plusieurs pas de temps sont requis. L'efficacité du couplage C_ELLAM-SNIA a été démontrée pour des problèmes de transport multi-espèces mettant en jeu à la fois des espèces mobiles et immobiles.

D'un point de vue global, nous avons développé un code de calcul performant et précis même pour des problèmes de transport réactif complexes.

Ces différents avantages nous ont conduits à utiliser ce code de calcul pour la détermination de la macro dispersion qui requiert la réalisation d'un très grand nombre de simulations sur des grilles de calcul de l'ordre du million de maille. Le chapitre 5 est consacré à cette étude.

Chapitre 5

Estimation de la macrodispersion dans les milieux poreux hétérogènes avec la méthode C_ELLAM

- 5.1 Introduction
- 5.2 Mathematical models and numerical methods
- 5.3 Set-up of the numerical experiments
- 5.4 Results and discussion
- 5.5 Concluding remarks
- 5.6 References
- 5.7 Conclusion

Les résultats très prometteurs du code de calcul basé sur la formulation C_ELLAM nous ont motivé à l'utiliser pour la caractérisation de la macrodispersion dans les milieux poreux hétérogènes. En effet, l'étude de la macrodispersion nécessite la réalisation d'un très grand nombre de simulations de Monte Carlo (MC) sur des grandes grilles de calcul. Chaque simulation consiste à répéter plusieurs fois les étapes suivantes : (i) générer un champ de perméabilité ; (ii) résoudre le problème d'écoulement ; (iii) résoudre le problème de transport ; (iv) déterminer la macrodispersion, d'où le besoin d'utiliser un modèle précis et efficace sur des domaines de calcul pouvant aller jusqu'au million de mailles.

Les méthodes lagrangiennes classiques sont le plus souvent utilisées pour la résolution du problème de transport sur de telles grilles de calcul [*de Dreuzy et al.*, 2007]. Récemment, les effets de la dispersion et de la diffusion locales sur le comportement de la macrodispersion ont fait l'objet de plusieurs travaux [*Salandin and Fiorotto*, 2000 ; *Attinger et al.*, 2004 ; *Jankovic et al.*, 2009 ; *Cirpka et al.*, 2011 ; *Fiori et al.*, 2011].

L'objectif de cette dernière partie est d'apporter une contribution à l'étude de la macrodispersion avec le schéma C_ELLAM dont les avantages ont été démontrés dans le chapitre précédent.

Les différents développements sur cette étude font l'objet d'un article soumis au journal *Water Resources Research*.

Estimation of macrodispersion in 2D highly heterogeneous porous media using the Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method

Fanilo Ramasomanana, Anis Younes, Philippe Ackerer

Laboratoire d'Hydrologie et de G ochimie de Strasbourg, Universit  de Strasbourg/EOST,
CNRS, 1 rue Blessig, 67084 Strasbourg, France.

Abstract

The Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method (ELLAM) formulation of *Younes et al.* [2006] is applied to solve the advection-dispersion equation used to describe conservative solute transport in highly heterogeneous porous media. Heterogeneity is described by a correlated random field with an exponential covariance. Macrodispersion coefficients are calculated for a broad range of heterogeneities using Monte Carlo (MC) simulations on large size domains.

ELLAM circumvents some drawbacks of usual particle tracking and Eulerian-Lagrangian methods when local dispersion/diffusion is added. ELLAM is also highly efficient and well adapted for advective dominant transport and for MC simulations.

For pure advection, the computed macrodispersion coefficients are consistent with first-order theories for a variance of the log-conductivity $\sigma^2 \leq 2.25$. Transverse macrodispersion is equal to 0 for each studied variance of log-conductivity $\sigma^2 \in [0.25, 1.0, 2.25, 4.0, 6.25, 9.0]$.

Adding local dispersion/diffusion leads to a decrease of the longitudinal macrodispersion and an increase of the transverse macrodispersion. These effects are more significant with local molecular diffusion than with local dispersion.

Key words: macrodispersion, transport, porous media, Eulerian-Lagrangian method

1. Introduction

Non-reactive solute transport at the field scale is mainly influenced by spatial variations of the hydraulic conductivity. Indeed, the path taken by the fluid moving through heterogeneous media can be complicated by the natural variability of hydraulic properties, which generates a spreading phenomenon of the solute commonly called macrodispersion. The effects of geological heterogeneity on solute transport in natural formations have been widely debated during the last three decades [for summaries, see the monographs by, e.g., *Dagan*, 1989; *Gelhar*, 1993; *Zhang*, 2002; *Rubin*, 2003 and *Dagan and Neuman*, 2005]. These authors developed theoretical frameworks to characterize the rate of spreading according to the spatial variability of the hydraulic conductivity. The discussion about macrodispersion has recently been extended to convection with local dispersion/diffusion and its effects on transverse spreading [*Salandin and Fiorotto*, 2000; *Attinger et al.*, 2004; *Jankovic et al.*, 2009; *Cirpka et al.*, 2011; *Fiori et al.*, 2011].

The macrodispersion of a nonreactive solute in a heterogeneous subsurface has also been addressed by numerical experiments based on Monte Carlo (MC) simulations [*Bellin et al.*, 1992; *Schwarze et al.*, 2001; *Dentz et al.*, 2002, among others; see *de Dreuzy et al.*, 2007 for a review]. The MC procedure requires the generation of a large number of permeability fields and the resolution of flow and transport equations for each of these realizations. Transport simulations can be highly CPU-consuming because they should be performed over large travel distances. Indeed, approximately a thousand correlation lengths, each discretized in ten cells, are needed to reach the asymptotic regime [*de Dreuzy et al.*, 2007; *Beaudoin et al.*, 2010]. Therefore, highly efficient transport simulators are required for the MC simulations. The Advection-Dispersion Equation (ADE), which is used to describe non-reactive solute transport, is very often solved by particle tracking methods [*de Dreuzy et al.*, 2007]. To our knowledge, only *Trefry et al.* [2003] have used an alternative method (Eulerian-Lagrangian method) to solve the ADE.

The aims of this paper are to evaluate the accuracy of an Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method (ELLAM) for solving 2D transport problems and to provide additional knowledge on macrodispersion for highly heterogeneous media.

This paper is organized as follows. The first section is dedicated to the numerical methods used to solve the flow equation and the ADE. The set-up for the numerical experiments is

described in the second section. The simulations are presented and discussed in the last section of the paper.

2. Mathematical models and numerical methods

The flow model is the classical steady state diffusion-type equation (*e.g.*, Bear, 1972):

$$\begin{cases} \nabla \cdot q = 0 \\ q = -K \nabla h \end{cases} \quad (1)$$

where K [L/T] is the hydraulic conductivity, h [L] is the hydraulic head and q [L/T] is the Darcy flux. This system of equations is solved with the Mixed Finite Element (MFE) method [Chavent and Roberts, 1991] on a triangular mesh obtained by the subdivision of square cells into 2 triangles. The MFE formulation provides a simultaneous approximation of the water heads and velocities and improves the ratio between accuracy and computation time for heterogeneous domains [Mosé *et al.*, 1994; Rees *et al.*, 2004]. The mixed formulation ensures an exact local mass balance with a continuous normal component of the velocity across inter-element boundaries. The fluxes are of the same order of convergence as the head [see the review by Younes *et al.*, 2010]. Therefore, the computed velocity field is accurate and appropriate for the particle tracking used for the transport simulation.

Solute transport is described by the classical advection-dispersion differential equation

$$L(C) = \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}C - \mathbf{D} \nabla C) = 0 \quad (2)$$

where $C(\mathbf{x}, t)$ [M/L³] is the unknown concentration and \mathbf{D} [L²/T] the dispersion tensor defined by

$$\mathbf{D}_{ij} = (\alpha_T |\mathbf{u}| + D_m) \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{u_i u_j}{|\mathbf{u}|} \quad i, j = 1, 2 \quad (3)$$

$L(C)$ is the differential operator defined above, \mathbf{u} [L/T] is the fluid velocity vector of components u_i , α_L and α_T [L] are the longitudinal and transverse dispersivities,

respectively, δ_{ij} is the Kronecker delta function and D_m [L^2/T] is the molecular diffusion coefficient.

Particle tracking algorithms are well adapted to simulating convective transport in heterogeneous porous media [Delay *et al.*, 2005]. For dispersion, the random walk requires the splitting of the ADE with dispersive coefficients defined either at the starting location of the particle or at particle's location after advection. Furthermore, discontinuity and heterogeneity in dispersion require adapted algorithms that are not easy to implement. If not properly implemented, particles may be trapped in low dispersive zones (i.e., low velocity zones), leading to erroneous results [Hoteit *et al.*, 2002].

These drawbacks are circumvented by the Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method (ELLAM). This method (i) avoids explicitly solving the convective term, which usually creates numerical diffusion and/or oscillations, and (ii) it treats the diffusive/dispersive terms in an Eulerian framework without operator splitting.

The usual ELLAM formulation is based on a space-time piecewise linear test function $\omega = \omega(\mathbf{x}, t)$ defined by

$$\begin{cases} \frac{D\omega}{Dt} = \frac{\partial\omega}{\partial t} + \mathbf{u}\nabla\omega = 0 & \text{for } t \in [t^n, t^{n+1}] \\ \omega(\mathbf{x}, t) = 0 & \text{for } t \notin [t^n, t^{n+1}] \end{cases} \quad (4)$$

The weak formulation of the transport equation is

$$\int_0^T \int_{\Omega} L(C)\omega = \int_0^T \int_{\Omega} \left[\frac{\partial C}{\partial t} \omega + \nabla \cdot (\mathbf{u}C - \mathbf{D}\nabla C)\omega \right] d\mathbf{x}dt = 0$$

Integrating by part the previous equation and taking into account equation (4) leads to

$$\int_{\Omega} C^{n+1} \omega^{n+1}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_0^T \int_{\Omega} (\mathbf{D}\nabla C) \cdot \nabla \omega d\mathbf{x}dt + \int_0^T \int_{\partial\Omega} [(\mathbf{u}C - \mathbf{D}\nabla C)\omega] \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} d\mathbf{x}dt - \int_{\Omega} C^n \omega^n(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0 \quad (5)$$

The first two integrals of equation (5) are solved with the standard finite element method. The other two terms are solved numerically and require an accurate and efficient particle tracking algorithm.

The ELLAM formulation of Younes *et al.* [2006] is used here to avoid spurious oscillations and/or numerical diffusion observed with standard ELLAM formulations [Celia *et al.*, 1990;

Binning and Celia, 1996; Younes and Ackerer, 2005]. The used formulation is highly efficient because it requires a very limited number of integration points (one per element). Moreover, numerical diffusion is strongly reduced using continuous characteristics and by interpolating the mass changes due to dispersion only [*Younes et al., 2008*]. The scheme has been shown to be accurate and efficient for transport in highly heterogeneous media with sharp concentration fronts [*Ramasomanana and Younes, 2011; Ramasomanana et al., 2011*]. For heterogeneous dispersion, the scheme uses an equivalent dispersion tensor \mathbf{D}_{eq} , which is calculated as the arithmetic mean of local dispersion tensors weighted by the mean time spent under the influence of these local values [*Fahs et al., 2009; Ramasomanana and Younes, 2011*].

Compared with the more usual Eulerian-Lagrangian methods used to estimate macrodispersion [*Trefry et al., 2003*], this ELLAM formulation avoids numerical errors due to the splitting of the advection and dispersion, and it reduces numerical errors due to concentration interpolation.

3. Set-up of the numerical experiments

Random permeability fields are generated on a rectangular domain of dimensions $L_x \times L_y = 8000\Delta x \times 1250\Delta x$ discretized in squares of size Δx . Random realizations are drawn from a lognormal permeability distribution with an exponential correlation function

$$C(r) = \sigma^2 \exp\left(-\frac{|r|}{\lambda}\right) \quad (6)$$

where $|r|$ is the two-point lag and λ is the correlation length.

The permeability field is generated with the Fast Fourier Transform–Moving Average (FFTMA) algorithm developed by *Le Ravalec et al. [2000]*. The statistical properties (variance and correlation length) of the random fields are carefully checked. The distribution of $Y = Ln(K)$ is adjusted if necessary to obtain the targeted mean and variance by

$$Y_i^{new} = \frac{\sigma_T}{\sigma_S} (Y_i^S - \langle Y^S \rangle) + \langle Y^T \rangle \quad (7)$$

where Y_i^{new} is the value used for the flow and transport simulations, Y_i^S is the value computed by the field simulator, $\langle Y^T \rangle$ and σ_T (resp. $\langle Y^S \rangle$ and σ_S) are the targeted (resp. simulated) mean and variance, respectively. Therefore, for a prescribed variance, the hydraulic conductivity fields used for the Monte Carlo simulations have exactly the same mean and variance.

To avoid border effects, the initial plume of concentration C_0 and dimensions $L_{sx} \times L_{sy} = 150\Delta x \times 400\Delta x$ is located at a distance $d = 0.005L_x$ from the upstream boundary and is vertically centered in the domain (Figure 1).

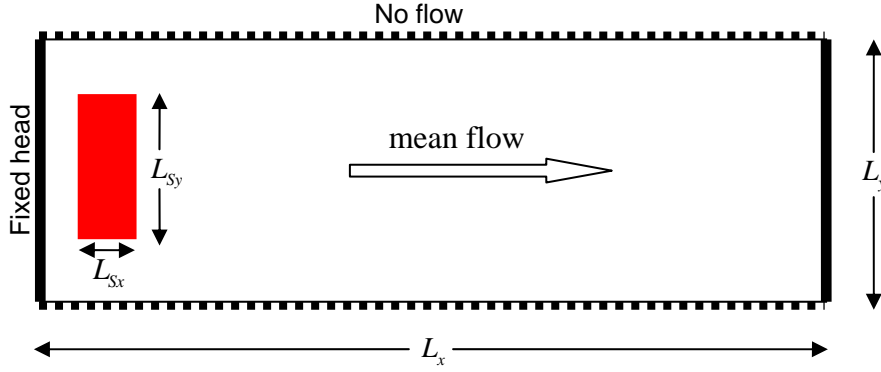


Figure 1: Computational domain with the source zone.

To evaluate the macrodispersion coefficients, the spatial moments at a time t are calculated by

$$M_{pq}(t) = \int_{\Omega} x^p y^q C(\mathbf{x}, t) dx \quad (8)$$

where $p + q$ is the order of the moment and Ω the whole domain.

The covariance coefficients, which quantify solute spreading in two dimensions, are given by

$$s_{xx}^2(t) = \frac{M_{20}(t)}{M_{00}(t)} - \left(\frac{M_{10}(t)}{M_{00}(t)} \right)^2; s_{yy}^2(t) = \frac{M_{02}(t)}{M_{00}(t)} - \left(\frac{M_{01}(t)}{M_{00}(t)} \right)^2; \quad (9)$$

$$s_{xy}^2 = s_{yx}^2 = \frac{M_{11}(t)}{M_{00}(t)} - \frac{M_{10}(t)}{M_{00}(t)} \times \frac{M_{01}(t)}{M_{00}(t)}$$

The longitudinal and the transversal macrodispersion coefficients are evaluated as suggested by *Garabedian et al.* [1991] by

$$D_L(t) = \frac{\Delta s_{xx}}{2\Delta t} = \frac{s_{xx}(t) - s_{xx}(0)}{2t} \quad (10)$$

$$D_T(t) = \frac{\Delta s_{yy}}{2\Delta t} = \frac{s_{yy}(t) - s_{yy}(0)}{2t}$$

These apparent macrodispersion coefficients are preferred to the effective coefficients. Indeed, effective coefficients require time derivatives that are computed by first-order differences and are prone to numerical approximations, which can lead to oscillations. Note that these coefficients lead to the same asymptotic values.

To check the convergence, we compute the longitudinal and transverse macrodispersion coefficients for a set of 48 realizations for each $\sigma^2 = [0.25, 1., 2.25, 4., 6.25, 9.]$. The mean and standard deviation of the macrodispersion coefficients reached constant values after 30 realizations. In this work, 48 realizations are used for each value of σ^2 .

The performed simulations (48 realizations for each $\sigma^2 \in [0, 9]$) were also run with different discretizations of the correlation lengths ($\Delta x = \lambda/4, \lambda/6, \lambda/8, \lambda/10$) to estimate the sensitivity of the results to discretization. Discretizations with $\Delta x = \lambda/8$ and $\Delta x = \lambda/10$ provided very close results, and $\Delta x = \lambda/8$ was chosen for the simulations presented here.

The whole parameter set is summarized in Table 1.

4. Results and discussion

Three types of experiments were run: pure advection, advection-diffusion and advection-dispersion. The diffusion and dispersion parameters were fixed according to two different Peclet numbers, 100 and 10, defined by $Pe_d = \lambda u / D_m$ and $Pe = \lambda / \alpha_L$, respectively (see Table 1).

In the following, the mean velocity of the plume is u , the normalized longitudinal (respectively transverse) macrodispersion coefficient is $D_L^N(t) = \langle D_L(t) \rangle / u / \lambda$ (resp. $D_T^N(t) = \langle D_T(t) \rangle / u / \lambda$), and the normalized time is $t_N = ut / \lambda$, which represents the number of correlation scales crossed by the plume. The macrodispersion coefficients are average values of the coefficients computed for each simulation at a given time for a given value of σ^2 and the Peclet number. We assume that the coefficients obtained by the simulations are

normally distributed, and we use standard deviations as an estimate of the uncertainty regarding the averaged values.

Parameter	Value	
<i>Geometric Parameters</i>		
Size of the domain [L]	$\sigma^2 \geq 6.25$	$L_x \times L_y = 8000\Delta x \times 1250\Delta x$ $= 1000 \lambda \times 156.25 \lambda$
	$\sigma^2 \leq 4$	$L_x \times L_y = 4000\Delta x \times 625\Delta x$ $= 500 \lambda \times 78.125 \lambda$
Source size [L]	$\sigma^2 \geq 6.25$	$L_{sx} \times L_{sy} = 150\Delta x \times 400\Delta x$ $= 18.75\lambda \times 50 \lambda$
	$\sigma^2 \leq 4$	$L_{sx} \times L_{sy} = 75\Delta x \times 200\Delta x$ $= 9.375\lambda \times 25 \lambda$
Grid size [L]	$\Delta x = 5$	
<i>Geostatistical parameters of $Y = LnK$</i>		
Covariance model	Isotropic exponential	
Correlation length [L]	$\lambda = 8\Delta x$	
Variance of LnK	$\sigma^2 \in [0.25, 1.0, 2.25, 4.0, 6.25, 9.0]$	
<i>Hydraulic parameters</i>		
Mean velocity [L/T]	$8.75 \cdot 10^{-2}$	
Diffusion [L^2/T]	0.35 ($Pe_d = 10$); 0.035 ($Pe_d = 100$)	
Longitudinal dispersivity [L]	4.0 ($Pe = 10$); 0.40 ($Pe = 100$)	
Transverse dispersivity [L]	0.40 ($Pe = 10$); 0.04 ($Pe = 100$)	

Table 1. Parameters of the numerical simulations.

The simulations were run on an Intel(R) Xeon(R) X5690 Bi-processor (2×3.46 Ghz) PC with 64 Go RAM. The computation of the flow field required 110 seconds of CPU time, whereas the computation of the transport needed 4 hours and 10 minutes for $t_N = 450$.

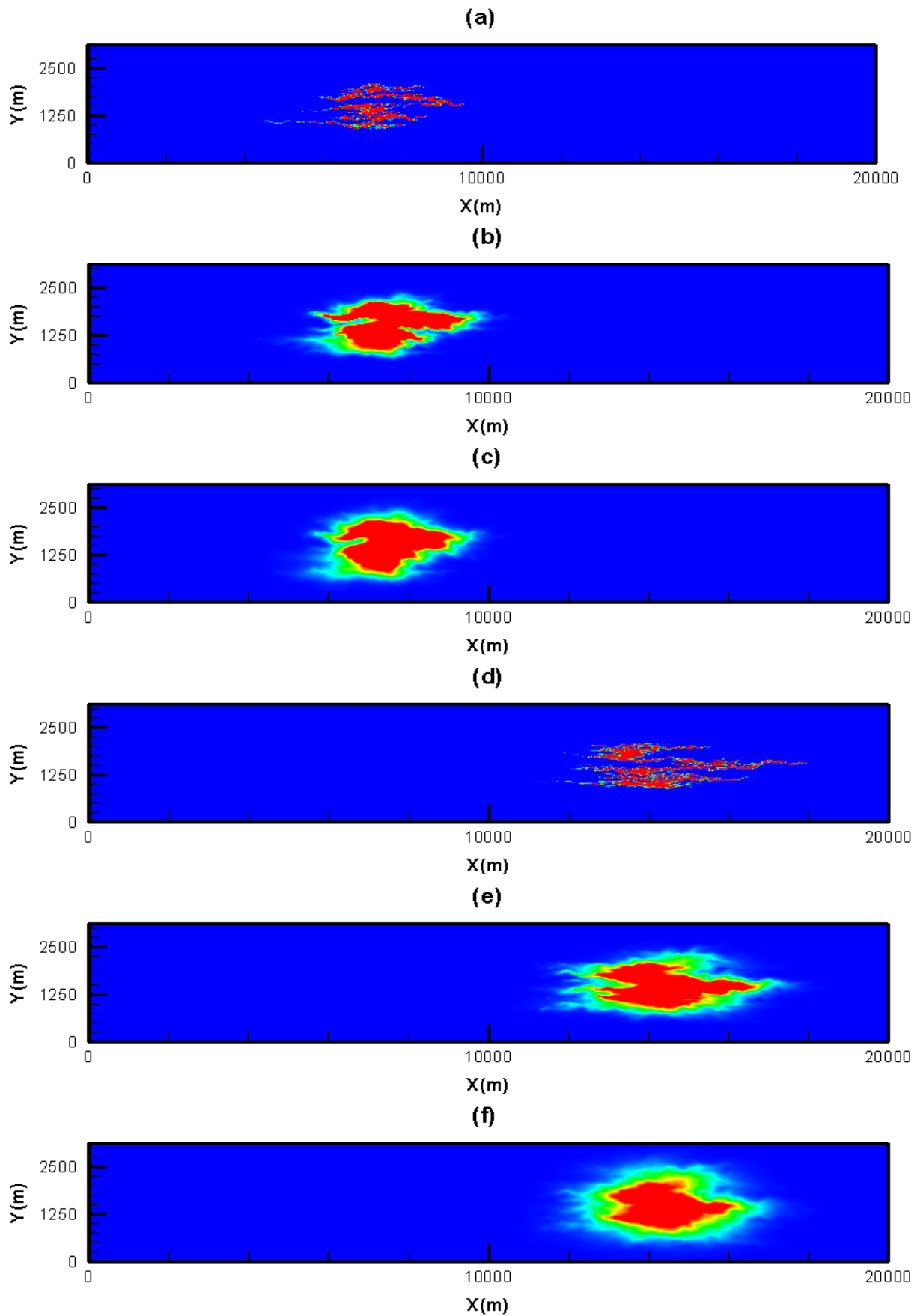


Figure 2. Solute plume after 150 correlation lengths (a to c) and 300 correlation lengths (d to f) for $\sigma^2 = 1$ and pure advection (a and d), dispersion (b and e) and diffusion (c and f).

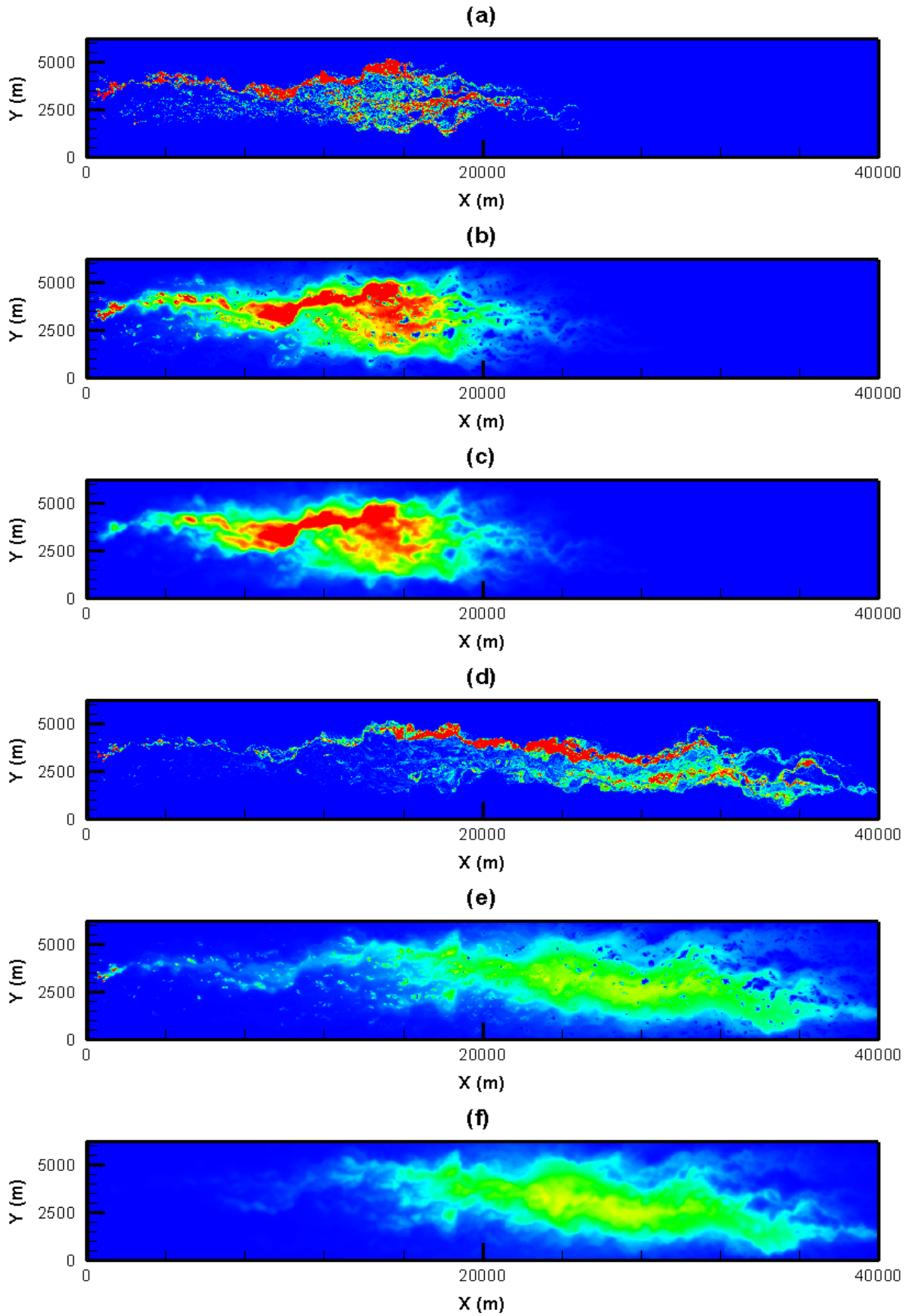


Figure 3. Solute plume after 300 correlation lengths (a to c) and 600 correlation lengths (d to f) for $\sigma^2 = 9$ and pure advection (a and d), dispersion (b and e) and diffusion (c and f).

Figures 2 and 3 show snapshots of the plume evolution inside the domain. These snapshots illustrate the main features of the plume spreading for pure advection and for diffusion/dispersion with a Peclet number of 10. No significant differences were found for any simulation between pure advective and dispersive/diffusive transport with a Peclet number of 100, except for diffusive transport with the highest variance of log-conductivity. Therefore, these simulations will not be discussed in detail, and the results are only given for information. These results differ from those of *de Dreuzy et al.* [2007] and *Beaudoin et al.*, [2010] who obtained significant differences between $Pe=100$, $Pe=1000$ and the pure advective case.

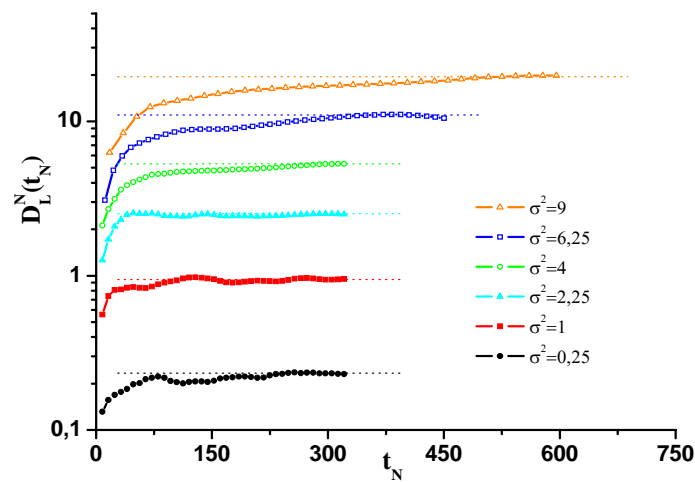


Figure 4. Average longitudinal macrodispersion coefficients for pure advection as functions of the number of correlation lengths.

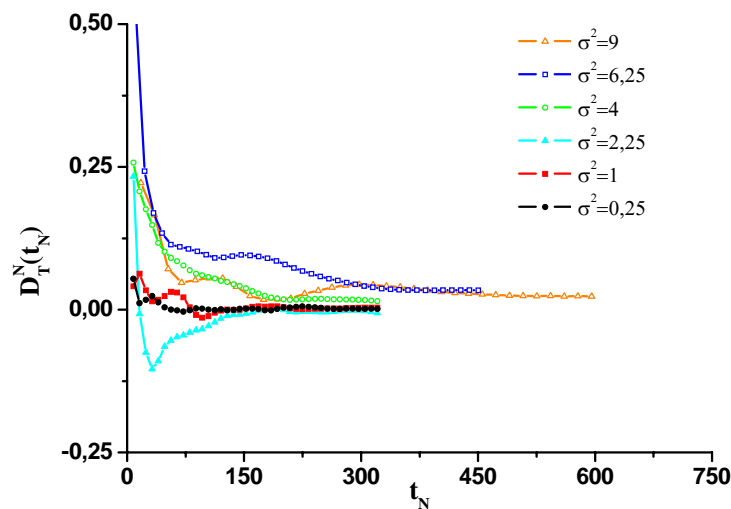


Figure 5. Average transverse macrodispersion coefficients for pure advection as functions of the number of correlation lengths.

The evolution of the macrodispersion is followed in time until it reaches the asymptotic regime, *i.e.*, the coefficient fluctuates around a constant value. Figures 4 to 7 show the evolution of the macrodispersion for each value of σ^2 and the Peclet numbers.

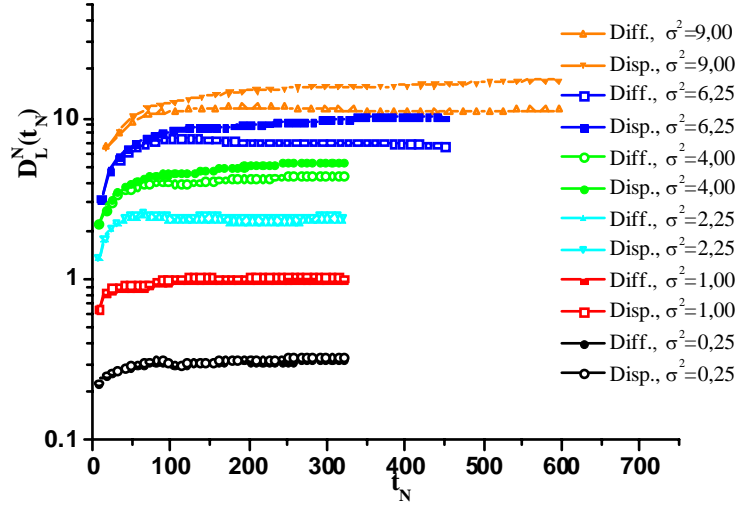


Figure 6. Average longitudinal macrodispersion coefficients for $Pe=10$ as functions of the number of correlation lengths.

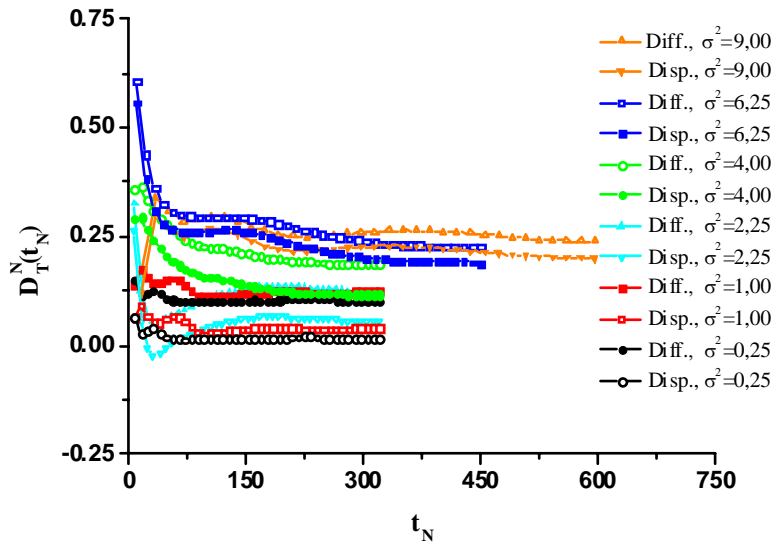


Figure 7. Average transverse macrodispersion coefficients for $Pe=10$ as functions of the number of correlation lengths.

The number of correlation lengths requested to reach the asymptotic value is summarized in Table 2. This characteristic distance is the travel distance required to obtain an overlap of the

95% confidence interval of the macrodispersion with the 95% confidence interval of the asymptotic longitudinal and transverse coefficients.

σ_{LnK}^2	0.25	1.00	2.25	4.00	6.25	9.00
Pure advection	30	30	40	60	90	450
Disp. (Pe=10)	40	40	40	40	80	200
Diff. (Pe=10)	40	40	40	40	40	70

Table 2. Number of correlation lengths required to reach asymptotic coefficients.

Considering this criterion, the information given in Table 2 should be considered as qualitative. However, these distances are significantly below the travel distances estimated by *Trefry et al.* [2003] (hundreds of correlation scales for a Gaussian covariance function of $Ln(K)$). For $\sigma^2 \leq 2.25$, this characteristic distance does not depend on σ^2 for pure advection (which is consistent with the first-order theory) or for cases with diffusion or dispersion corresponding to $Pe = 10$. The travel distance increases when $\sigma^2 \geq 4$ for the pure advective transport, whereas it remains more or less constant when local diffusion is added to the advection, except for the highest variance. Local dispersion/diffusion significantly reduces the travel distance required to reach the asymptotic macrodispersion coefficients. The isotropic spreading mimicked by diffusion leads to a faster mixing of the solute than anisotropic mixing due to mechanical dispersion.

The asymptotic coefficients summarized in Tables 3 and 4 are obtained by averaging the computed macrodispersion coefficients over the last 20 time steps, where a more or less constant value is reached. The results are compared with those obtained by *de Dreuzy et al.* [2007] and the theoretical first-order predictions of *Gelhar and Axness* [1983] for the pure advective case (Figure 8). The three approaches are in good agreement for $\sigma^2 \leq 2.25$. For higher heterogeneity, the asymptotic longitudinal macrodispersion coefficients obtained with the ELLAM formulation are comparable to those of *de Dreuzy et al.* [2007]. For both methods, the computed dispersion coefficients are greater than the theoretical prediction and the first-order theory is no more valid for $\sigma^2 \geq 4$. These approaches are also in good

agreement with the self-consistent approach of *Fiori et al.* [2003] for $\sigma^2 \leq 6.25$. For $\sigma^2 = 9$, ELLAM leads to a lower mean value and variance for the longitudinal dispersion than the results obtained with particle tracking by *de Dreuzy et al.* [2007]. The transverse asymptotic macrodispersion has a zero mean value and a very small standard deviation, even for highly heterogeneous domains (Figure 9), which is consistent with the theoretical results obtained by *Attinger et al.* [2004].

	Pure advection	Dispersion ($Pe=100$)	Diffusion ($Pe_d=100$)	Dispersion ($Pe_L=10$)	Diffusion ($Pe_d=10$)
$\sigma_{LnK}^2 = 0.25$	[0.20 - 0.25]	[0.21 - 0.27]	[0.21 - 0.27]	[0.31 - 0.39]	[0.31 - 0.35]
$\sigma_{LnK}^2 = 1.00$	[0.84 - 1.06]	[0.86 - 1.07]	[0.86 - 1.04]	[0.92 - 1.10]	[0.92 - 1.00]
$\sigma_{LnK}^2 = 2.25$	[2.28 - 2.72]	[2.33 - 2.77]	[2.22 - 2.63]	[2.26 - 2.61]	[2.09 - 2.39]
$\sigma_{LnK}^2 = 4.00$	[4.85 - 5.77]	[5.23 - 6.09]	[4.83 - 5.60]	[4.59 - 5.45]	[3.81 - 4.47]
$\sigma_{LnK}^2 = 6.25$	[9.10 - 11.88]	[9.92 - 12.34]	[7.86 - 9.41]	[8.23 - 9.82]	[6.19 - 7.12]
$\sigma_{LnK}^2 = 9.00$	[19.05 - 20.57]	[19.41 - 20.98]	[13.88 - 15.40]	[16.23 - 17.33]	[10.58 - 11.33]

Table 3. Asymptotic longitudinal macrodispersion.

	Pure advection	Dispersion ($Pe=100$)	Diffusion ($Pe_d=100$)	Dispersion ($Pe_L=10$)	Diffusion ($Pe_d=10$)
$\sigma_{LnK}^2 = 0.25$	[0.00 - 0.00]	[0.00 - 0.01]	[0.01 - 0.01]	[0.01 - 0.02]	[0.10 - 0.11]
$\sigma_{LnK}^2 = 1.00$	[0.00 - 0.010]	[0.00 - 0.01]	[0.01 - 0.03]	[0.03 - 0.04]	[0.12 - 0.13]
$\sigma_{LnK}^2 = 2.25$	[-0.03 - 0.02]	[-0.03 - 0.04]	[-0.02 - 0.04]	[0.04 - 0.08]	[0.11 - 0.15]
$\sigma_{LnK}^2 = 4.00$	[-0.01 - 0.03]	[0.01 - 0.06]	[0.02 - 0.06]	[0.08 - 0.13]	[0.15 - 0.20]
$\sigma_{LnK}^2 = 6.25$	[0.01 - 0.05]	[0.05 - 0.09]	[0.04 - 0.09]	[0.17 - 0.24]	[0.21 - 0.29]
$\sigma_{LnK}^2 = 9.00$	[-0.01 - 0.06]	[0.04 - 0.11]	[0.04 - 0.12]	[0.19 - 0.23]	[0.23 - 0.27]

Table 4. Asymptotic transverse macrodispersion.

For pure advection, the accuracy of ELLAM only depends on the particle tracking algorithm (the dispersion term is dropped). For the usual particle tracking algorithms, particles are injected at the source and the accuracy of the velocity field sampling (especially low-

permeability zones) is questionable [Fiori *et al.*, 2008]. For ELLAM, the starting position of the particles is located in each element. Because triangular elements are used, two particles are implemented in each conductivity bloc, ensuring the sampling of the whole velocity field. This characteristic may explain the small differences in longitudinal and transverse macrodispersion observed between the different runs, which lead to little variance in the macrodispersion (see figures 8 and 9).

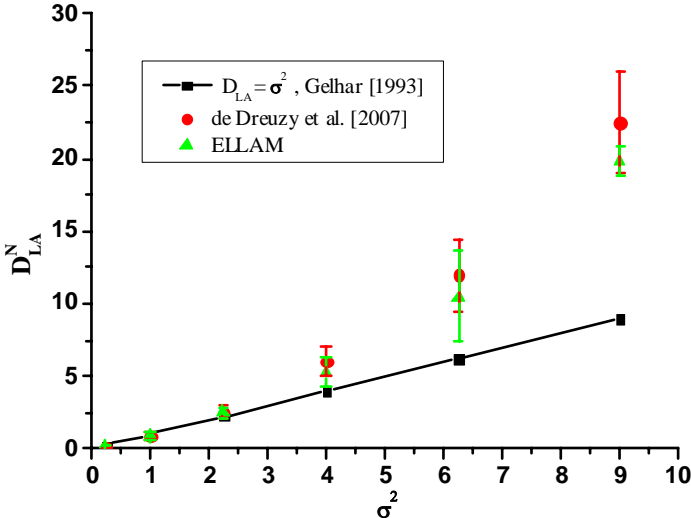


Figure 8. Asymptotic longitudinal macrodispersion for pure advection. Vertical bars on each side of the data points represent the standard deviation.

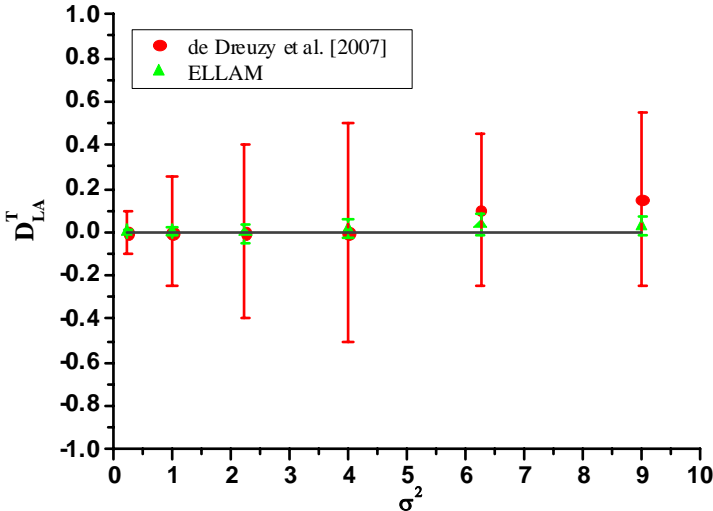


Figure 9. Asymptotic transverse macrodispersion for pure advection. Vertical bars on each side of the data points represent the standard deviation.

Compared with pure advection, local dispersion or diffusion with $Pe=10$ reduces the longitudinal macrodispersion (Table 3). The differences between diffusion (uniform and isotropic) and dispersion (velocity dependent and anisotropic) can only be seen for the highest variance of the log-conductivity (Figure 10).

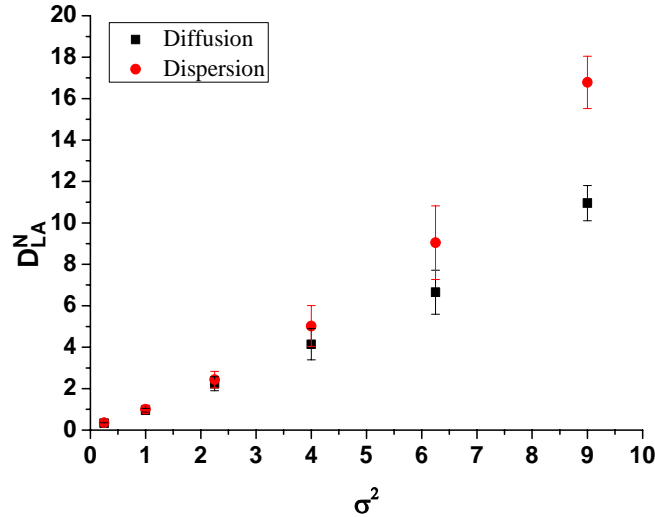


Figure 10. Asymptotic longitudinal macrodispersion for $Pe=10$. Vertical bars on each side of the data points represent the standard deviation.

Local diffusion/dispersion strongly modifies the transverse macrodispersion (Table 4). The asymptotic transverse macrodispersion increases with σ^2 for both dispersion and diffusion (Figure 11), which underlines the contribution of the heterogeneity in hydraulic conductivity to transverse spreading. For small variances, transverse macrodispersion with local diffusion is higher than macrodispersion with dispersion. For $\sigma^2 \geq 6.25$, dispersion and diffusion have the same effects on the macrodispersion. For small variances, we can assume that the flow is mainly unidirectional even at the local scale. Therefore, the transverse spreading due to transverse dispersion is smaller than spreading due to diffusion, as the transverse dispersivity is smaller. This assumption does not hold for higher variances where the velocity direction variations become important, which leads to a contribution of the longitudinal dispersivity to the transverse mixing. Therefore, the differences in the asymptotic macrodispersion coefficient between diffusive and dispersive transport diminishes with σ^2 .

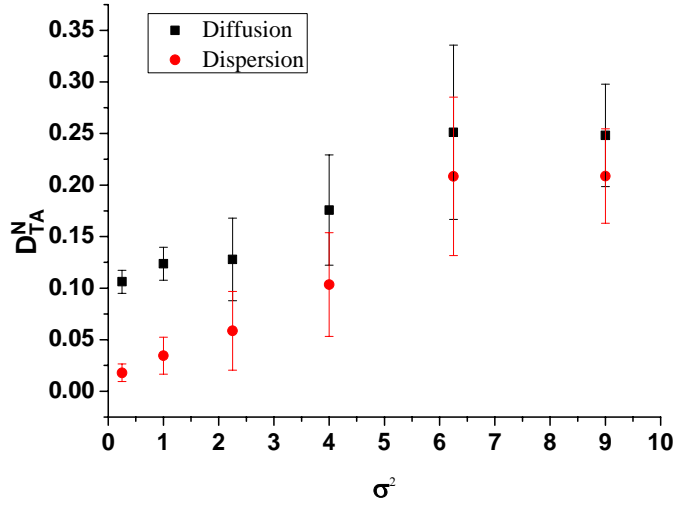


Figure 11. Asymptotic transverse macrodispersion for $Pe=10$. Vertical bars on each side of the data points represent the standard deviation.

5. Concluding remarks

The ELLAM formulation of *Younes et al.* [2006] is accurate and efficient for solving conservative mass transport in highly heterogeneous formations. The implementation of ELLAM requires one particle for each grid cell, which ensures an exhaustive sampling of the velocity field; it also avoids the splitting of the advective and dispersive operators.

Concerning the apparent macrodispersion coefficients, the most important conclusions of this paper can be summarized as follows:

1. For pure advection, a first-order theory can be applied to estimate macrodispersion coefficients for heterogeneous domains with $Ln(K)$ variances up to 2.25. Our simulations are also in good agreement with the self-consistent approach of *Fiori et al.* [2003] for $Ln(K)$ variances up to 6.25.
2. The number of correlation lengths required to reach asymptotic coefficients is not a function of the variance for $\sigma^2 \leq 2.25$. Adding local dispersion or diffusion with $Pe = 10$ will not change the required distance for this range of σ^2 . For higher variances, this distance is significantly reduced with local dispersion or diffusion.
3. Compared with pure advection, local dispersion/diffusion enhanced the transverse spreading, while the longitudinal spreading is reduced for all studied $Ln(K)$ variances.

References

- Attinger, S., M. Dentz, and W. Kinzelbach (2004), Exact transverse macro dispersion coefficients for transport in heterogeneous media. *Stochastic Environmental Research*, 18, 9-15, doi:10.1007/s00477-003-0160-6.
- Bear, J., 1972. *Dynamics of fluids in porous media*, Elsevier Publications, 335 p.
- Beaudoin, A., J. R. de Dreuzy, and J. Erhel (2010), Numerical Monte Carlo analysis of the influence of pore-scale dispersion on macrodispersion in 2-D heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, 46, W12537, doi:10.1029/2010WR009576.
- Bellin, A., P. Salandin, and A. Rinaldo (1992), Simulation of dispersion in heterogeneous porous formations: Statistics, first-order theories, convergence of computations. *Water Resources Research*, 28, 2211-2227, doi:10.1029/92WR00578.
- Binning, P., and M. A. Celia (1996), A finite volume Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for solution of the contaminant transport equations in two-dimensional multi-phase flow systems. *Water Resources Research*, 32, 103–114, doi:10.1029/95WR02763.
- Celia, M. A., T. F. Russell, I. Herrera, and R. E. Ewing (1990), An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for the advection-diffusion equation. *Advances in Water Resources*, 13, 187–206.
- Chavent, G., and J. E. Roberts (1991), A unified physical presentation of mixed, mixed hybrid finite elements and standard finite difference approximations for the determination of velocities in waterflow problems. *Advances in Water Resources*, 14, 329–348. doi:10.1016/0309-1708(91)90020-O.
- Cirpka, O. A., F. de Barros, G. Chiogna, M. Rolle and W. Nowak (2011), Stochastic flux related analysis of transverse mixing in two dimensional heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, 47, W06515, doi:10.1029/2010WR010279.
- Dagan, G. (1989). *Flow and Transport in Porous Formations*, Springer Verlag, 445p.
- Dagan, G., and S. P. Neuman (2005), *Subsurface flow and solute transport: a stochastic approach*, Cambridge University Press, 241p.
- de Dreuzy, J.R., A. Beaudoin, and J. Erhel (2007), Asymptotic dispersion in 2D heterogeneous porous media determined by parallel numerical simulations. *Water Resources Research*, 43, W1049, doi:10.1029/2006WR005394.

- Delay, F., P. Ackerer, and C. Danquigny (2005), Solution of solute transport in porous or fractured formations by random walk particle tracking: A review. *Vadose Zone Journal*, 4, 360-379, doi:10.2136/vzj2004.0125.
- Dentz, M., H. Kinzelbach, S. Attinger, and W. Kinzelbach (2002), Temporal behavior of a solute cloud in heterogeneous porous medium: 3. Numerical simulations. *Water Resources Research*, 7, 1118, doi:10.1029/2001WR000436.
- Fahs, M., A. Younes, and F. Delay (2009), On the use of large time steps with ELLAM for transport with kinetic reactions over heterogeneous domains. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 55, 1121–1126, doi:10.1002/aic.11727.
- Fiori, A., I. Jankovic, and G. Dagan (2003), Flow and transport in highly heterogeneous formations: 2. Semianalytical results for isotropic media, *Water Resources Research*, 39(9), 1269, doi:10.1029/2002WR001719.
- Fiori, A., G. Dagan, and I. Jankovic (2008), Comment on “Asymptotic dispersion in 2D heterogeneous porous media determined by parallel numerical simulations” by J.R. de Dreuzy et al., *Water Resources Research*, 44, W06603, doi:10.1029/2007WR006699.
- Fiori A., I. Jankovic, and G. Dagan (2011), The impact of local diffusion upon mass arrival of a passive solute in transport through three-dimensional highly heterogeneous aquifers. *Advances in Water Resources*, 34, 1563–1573, doi:10.1016/j.advwatres.2011.08.010.
- Garabedian, S. P., D. R. LeBlanc, L. W. Gelhar, and M. A. Celia (1991), Large-scale natural gradient tracer test in sand and gravel, Cape Cod, Massachusetts: 2. Analysis of spatial moments for a nonreactive tracer, *Water Resources Research*, 27(5), 911–924, doi:10.1029/91WR00242.
- Gelhar, L. W. (1993), *Stochastic Subsurface Hydrology*, Prentice Hall, Engelwood Cliffs, New Jersey.
- Gelhar, L. W., and G. L. Axness (1983), Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. *Water Resources Research*, 19(1), 161-180, doi:10.1029/WR019i001p00161.
- Hoteit, H., R. Mose, A. Younes, F. Lehmann, and P. Ackerer (2002), Three-dimensional modeling of mass transfer in porous media using the mixed hybrid finite elements and the random-walk methods. *Mathematical Geology*, 34 (4), pp. 435-456.

- Jankovic, I., D. R. Steward, R. J. Barnes, and G. Dagan (2009), Is transverse macrodispersivity in three-dimensional groundwater transport equal to zero? A counterexample, *Water Resources Research*, 45, W08415, doi:10.1029/2009WR007741.
- Le Ravalec, M., B. Noetinger, and L. Y. Hu (2000), The FFT Moving Average (FFT-MA) Generator: An Efficient Numerical Method for Generating and Conditioning Gaussian Simulations. *Mathematical Geology*, 32(6), 701-723, doi:10.1023/A:1007542406333.
- Mosé, R., P. Siegel, and P. Ackerer (1994), Application of the mixed hybrid finite element approximation in a groundwater model: Luxury or necessity? *Water Resources Research*, 30, 3001-3012, doi:10.1029/94WR01786.
- Ramasomanana, F., and A. Younes (2011), Efficiency of the Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method for solving advection-dispersion equation on highly heterogeneous media. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 66, doi:10.1002/flid.2578.
- Ramasomanana, F., A. Younes, and M. Fahs (2011), Modeling 2D Multispecies Reactive Transport in Saturated/Unsaturated Porous Media with the Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method. *Water, Air, & Soil Pollution*.,pp. 1-13, doi:10.1007/s11270-011-0985-4.
- Rees, I., I. Masters, A. G. Malan, and R. W. Lewis (2004), An edge-based finite volume scheme for saturated-unsaturated groundwater flow. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(42-44), 4741-4759, doi:10.1016/j.cma.2004.04.003.
- Rubin, Y. (2003), *Applied Stochastic Hydrogeology*, 416 pp., Oxford Univ. Press, New York.
- Salandin, P., and V. Fiorotto (2000), Dispersion tensor evaluation in heterogeneous media for finite Peclet values. *Water Resources Research*, 36(6), 1449-1455, doi:10.1029/2000WR900037.
- Schwarze, H., U. Jaekel and H. Vereecken (2001), Estimation of macrodispersion by different approximation methods for flow and transport in randomly heterogeneous media. *Transport in Porous Media*, 43, 265-287, doi:10.1023/A:1010771123844.
- Trefry, M. G., F. P. Ruan, and D. McLaughlin (2003), Numerical simulations of preasymptotic transport in heterogeneous porous media: Departure from the Gaussian limit. *Water Resources Research*, 39(3), 1063, doi:10.1029/2001WR001101.

- Younes, A., and P. Ackerer (2005), Solving the advection-diffusion equation with the Eulerian–Lagrangian localized adjoint method on unstructured meshes and non uniform time stepping. *Journal of Computational Physics*, 208, 384–402, doi:10.1016/j.jcp.2005.02.019.
- Younes, A., P. Ackerer, and F. Lehmann (2006), A new efficient Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for solving the advection-dispersion equation on unstructured meshes. *Advances in Water Resources*, 29, 1056–1074, doi:10.1016/j.advwatres.2005.09.003.
- Younes, A., P. Ackerer, and F. Delay (2010), Mixed finite elements for solving 2-D diffusion-type equations. *Reviews of Geophysics*, 48, RG1004, doi:10.1029/2008RG000277.
- Younes A., M. Fahs, and P. Ackerer (2008), A new approach to avoid excessive numerical diffusion in Eulerian-Lagrangian methods. *Communication in Numerical Methods in Engineering*, 24, 897–910, doi:10.1002/cnm.996.
- Zhang, D. (2002), *Stochastic Methods for Flow in Porous Media: Coping With Uncertainties*, 350 pp., Academic, San Diego, Calif.

5.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons utilisé le schéma C_ELLAM afin d'apporter une contribution à l'étude et la caractérisation de la macrodispersion dans les milieux poreux hétérogènes. De par sa formulation, la méthode C_ELLAM permet la prise en compte des effets de la dispersion et de la diffusion locales sur le comportement de la macrodispersion.

Pour le cas advectif pur, les résultats obtenus sont similaires à ceux obtenus par *de Dreuzy et al.* [2007] qui ont utilisé la méthode « Random Walk Particle Method » pour la résolution du problème de transport. Néanmoins, les fluctuations autour de la valeur moyenne du coefficient asymptotique de macrodispersion transversale sont moins importantes avec les C_ELLAM.

D'autre part, nous avons démontré que l'ajout de la dispersion ou de la diffusion entraîne une augmentation de la macrodispersion transversale pour tous les degrés d'hétérogénéité considérés ($\sigma^2 \in [0,9]$). Par contre, la macrodispersion longitudinale diminue pour des valeurs de $\sigma^2 \geq 4$ tandis qu'aucune modification significative n'est observée pour $\sigma^2 \leq 2.25$.

Conclusion générale et perspectives

Le travail présenté dans ce mémoire comporte deux parties : la première partie porte sur quelques méthodes de résolution des problèmes d'écoulement et de transport avec une attention particulière sur la méthode EFMH et la méthode ELLAM ; la deuxième partie est consacrée au développement de la méthode C_ELLAM avec des applications pour la résolution des problèmes de transport réactif en milieux poreux fortement hétérogènes ainsi que pour la détermination de la macrodispersion par la mise en œuvre de simulations intensives de type Monte Carlo.

Malgré les avantages de la méthode EFMH pour la résolution des écoulements en milieu poreux, des oscillations non physiques peuvent apparaître lors de la modélisation des fronts d'infiltration raides. Nous avons proposé dans ce travail une procédure de condensation de la masse permettant de diminuer ces oscillations pour des cas d'infiltration en milieu non saturé. Une étude théorique sur la propriété M-matrice nous a permis d'établir que ces oscillations peuvent être supprimées lorsque l'équation de Richards est résolue avec la formulation EFMHC sur un maillage formé par des triangles avec des angles aigus [Belfort *et al.*, 2009].

Pour la résolution du problème de transport, des difficultés numériques peuvent apparaître en présence de fronts de concentration raides. Les méthodes eulériennes classiques imposent alors des contraintes de discrétisations spatiale et temporelle pouvant conduire à des temps de calcul prohibitifs. Les méthodes lagrangiennes constituent une classe de méthode alternative mais le mode de traitement du terme de dispersion rend difficile le couplage de ces méthodes avec d'autres processus. La combinaison du schéma lagrangien et du schéma eulérien avec les méthodes ELM permet de s'affranchir des contraintes de discrétisation imposées par les méthodes eulériennes. Cependant, il est connu que les méthodes ELM ne conservent pas la masse et ne peuvent traiter correctement toutes les conditions aux limites. La méthode ELLAM [Celia *et al.*, 1990a] est une amélioration des méthodes ELM car, par sa formulation, la masse est naturellement conservée et toutes les conditions aux limites peuvent être traitées de manière rigoureuse. Avec la formulation standard, la méthode ELLAM peut être sujette à des oscillations non physiques et/ou de la diffusion numérique lorsque l'on utilise plusieurs pas de temps.

La méthode C_ELLAM [Younes *et al.*, 2006a] permet de pallier ces difficultés numériques. Dans ce travail, nous avons étudié, dans un premier temps, les performances et l'applicabilité de la méthode C_ELLAM à des problèmes de transport linéaire en milieux fortement hétérogènes incluant des termes puits/source.

Dans cette étude, nous avons montré que, malgré l'hétérogénéité du milieu, une seule particule par maille suffit à la résolution du problème de transport. En outre, nous avons proposé le calcul d'un tenseur de dispersion équivalent D_{eq} qui permet d'éviter les erreurs lorsque l'on utilise des grands pas de temps. Avec le schéma C_ELLAM, le nombre de particules utilisées est proportionnel au nombre d'éléments du maillage multiplié par le nombre de pas de temps. Une procédure d'amélioration des calculs, lorsqu'une discrétisation spatiale fine et/ou des petits pas de temps sont requis, a alors été mise en œuvre. La procédure d'interpolation

que nous avons développée permet ainsi de diminuer considérablement les temps de calcul et les besoins en espace mémoire [*Ramasomanana and Younes, 2011*].

Dans un deuxième temps, nous nous sommes intéressés à la résolution du problème de transport réactif pour des régimes d'écoulement saturés et non saturés. Nous avons opté pour une résolution par séparation d'opérateurs (OS) avec l'approche SNIA (Sequential Non Iterative Approach) afin de résoudre l'opérateur de chimie. Il a été démontré que le couplage SNIA_ELLAM est efficace et mène à des résultats précis surtout pour des réactions cinétiques [*Younes and Fahs, 2007*]. Dans ce développement, la comparaison entre les modèles C_ELLAM_REACT et EFDMPFA_REACT montre que pour les réactions aqueuses, la séparation d'opérateurs n'introduit pas d'erreurs intrinsèques car tous les composants sont mobiles malgré l'utilisation de grands pas de temps avec les ELLAM. Par contre, lorsque des espèces fixes et mobiles sont à la fois mises en jeu, il est nécessaire de prendre des petits pas de temps car des erreurs de séparation d'opérateurs peuvent apparaître [*Ramasomanana et al., 2011*]. La procédure d'interpolation proposée par *Ramasomanana and Younes* [2011] permet néanmoins d'améliorer l'efficacité du schéma C_ELLAM_REACT par rapport aux EFDMPFA_REACT.

Ces différentes études nous ont permis de mettre en évidence la performance et l'efficacité du code de calcul basé sur la méthode C_ELLAM. Ceci nous a amené à l'utiliser pour la caractérisation de la macrodispersion dans les milieux poreux hétérogènes. En effet, l'étude de la macrodispersion requiert des outils de calculs performants pour la réalisation d'un très grand nombre de simulations sur des grilles de calcul de l'ordre du million de mailles. Nous avons principalement comparé nos résultats aux travaux de *de Dreuzy et al.*, [2007], la principale différence étant la méthode de résolution du problème de transport. Les résultats obtenus sont similaires pour le cas advectif pur avec des fluctuations moins importantes autour du coefficient asymptotique de macrodispersion transversale. Par ailleurs, nous avons démontré que l'ajout de la dispersion ou de la diffusion entraîne une augmentation de la macrodispersion transversale et une diminution de la macrodispersion longitudinale pour les degrés d'hétérogénéité élevés.

Dans les perspectives de cette thèse, plusieurs thèmes de recherche peuvent être envisagés :

- ✓ Le modèle numérique basé sur la formulation C_ELLAM a été validé sur des cas théoriques tirés de la littérature. De ce fait, une première piste serait de l'appliquer à des cas réels.
- ✓ L'extension de la formulation C_ELLAM pour des problèmes de transport en 3D : le fait de rajouter une dimension d'espace modifierait considérablement les efforts de calcul nécessaires au tracking des particules. Il serait alors intéressant de voir si la performance et la précision du modèle sont conservées, et de comparer le modèle pour différents types de maillages.
- ✓ Concernant le transport réactif, on pourrait s'intéresser à la résolution des problèmes de chimie à l'équilibre qui requièrent des petits pas de temps. Des analyses sur l'amélioration du schéma existant pourraient être menées.
- ✓ L'étude de la macrodispersion en milieu tridimensionnel afin de se rapprocher un peu plus des conditions réelles du milieu naturel.

Bibliographie

- Ackerer, P., R. Mosé and K. Semra (1990), Natural tracer test simulation by stochastic particle tracking method, *Transport and Mass Exchange Processes in Sand and Gravel Aquifers, Ottawa, October 1-4 1990, G. Moltyaner (ed.)*, 595-604.
- Arnold, D., and F. Brezzi (1985), Mixed and nonconforming finite element methods: implementation, postprocessing and error estimates. *RAIRO - Modélisation mathématique et analyse numérique*, 19: 7-32.
- Attinger, S., M. Dentz, and W. Kinzelbach (2004), Exact transverse macro dispersion coefficients for transport in heterogeneous media. *Stochastic Environmental Research*, 18: 9-15.
- Barry, D. A., K. Bajracharya, C. T. Miller (1996), Alternative split-operator approach for solving chemical reaction/groundwater transports models. *Advances in Water Resources*, 19: 261-275.
- Bear, J. (1979). *Hydraulic of groundwater*. Mc Grew-Hill Series in Water Resources and Environmental Engineering, New-York.
- Belfort, B., and F. Lehmann (2005), Comparison of equivalent conductivities for numerical simulation of one-dimensional unsaturated flow. *Vadose Zone Journal*, 4: 1191-1200.
- Belfort, B. (2006). Modélisation des écoulements en milieu poreux non saturés par la méthode des éléments finis mixtes hybrides. *Thèse de Doctorat. Université Louis Pasteur Strasbourg*.
- Belfort, B., F. Ramasomanana, A. Younes, and F. Lehmann (2009), An efficient lumped mixed hybrid finite element formulation for variably saturated groundwater flow. *Vadose Zone Journal*, 8: 352-362.

- Bell, L. S. J., and P. J. Binning (2004), A split operator approach to reactive transport with the forward particle tracking Eulerian Lagrangian localized adjoint method. *Advances in Water Resources*, 25: 1215-1231.
- Bergamaschi, L., S. Mantica, and F. Saleri (1998), A mixed finite element–finite volume formulation of the black-oil model. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 20: 970-997.
- Binning, P. J., and M. A. Celia (1996), A finite volume Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for solution of the contaminant transport equations in two-dimensional multi-phase flow systems. *Water Resources Research*, 32: 103-114.
- Brezzi, F., and M. Fortin (1991). Mixed and hybrid finite element methods. *Springer-Verlag, Berlin*.
- Carrayrou, J., R. Mosé, and P. Behra (2002), New efficient algorithm for solving thermodynamic chemistry. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 48(4): 894-904.
- Carrayrou, J., R. Mosé, and P. Behra (2004), Operator-splitting procedures for reactive transport and comparison of mass balance errors. *Journal of Contaminant Hydrology*, 68: 239-268.
- Celia, M. A., T. F. Russell, I. Herrera, and R. E. Ewing (1990a), An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for the advection-diffusion equation. *Advances in Water Resources*, 13: 187-206.
- Celia, M. A., E. T. Bouloutas, and R. L. Zarba (1990b), A general mass conservative numerical solution for unsaturated flow equation. *Water Resources Research*, 26(7): 1483-1496.
- Celia, M. A., and S. Zisman (1990), An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for reactive transport in groundwater, *Computational Methods in Subsurface Hydrology*, Ref. 25, pp. 383-390.

- Chavent, G., and G. Salzano (1982), A finite element method for 1D water flooding problem. *Journal of Computational Physics*, 45: 307-344.
- Chavent, G., and J. Jaffré (1986). *Mathematical Models and Finite Elements for Reservoir Simulation*. Elsevier Science Publishers B.V, Netherlands.
- Chavent, G., and B. Cockburn (1989), The local projection p0-p1 discontinuous-Galerkin finite element method for scalar conservation laws. *M2AN*, 23(4): 565-592.
- Cheng, R. T., V. Casulli, and S. N. Milford (1984), Eulerian-Lagrangian solution of the convection-dispersion equation in natural coordinates. *Water Resources Research*, 20(7): 944-952.
- Chertock, A., and A. Kurganov (2006), On a practical implementation of particle methods. *Applied Numerical Analysis*, 56: 1418-1431.
- Cirpka, O. A., F. de Barros, G. Chiogna, M. Rolle and W. Nowak (2011), Stochastic flux related analysis of transverse mixing in two dimensional heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, 47, W06515.
- Cockburn, B., and C. W. Shu (1991), The Runge-Kutta local projection P1 discontinuous Galerkin finite element method for scalar conservation laws, *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*. *M2AN*, 25: 337-361.
- Dagan, G. (1989). *Flow and Transport in Porous Formations*. 445 pp., Springer Verlag.
- Darcy, H. (1856). *Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon*. Dalmont, Paris.
- Daus, A., E.O., Frind, and E.A. Sudicky (1985), Comparative error analysis in finite element formulations of the advection-dispersion equation. *Advances in Water Resources*, 8: 86-95.

- de Dreuzy, J.R., A. Beaudoin, and J. Erhel (2007), Asymptotic dispersion in 2D heterogeneous porous media determined by parallel numerical simulations. *Water Resources Research*, 43: W1049.
- Degond, P., and F. J. Mustieles (1990), A deterministic approximation of diffusion equations using particles, *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 11(2): 293.
- Delay, F., P. Ackerer, and C. Danquigny (2005), Solution of solute transport in porous or fractured formations by random walk particle tracking: A review. *Vadose Zone Journal*, 4, 360-379, doi:10.2136/vzj2004.0125.
- de Marsily, G. (1981). *Hydrogéologie quantitative*. Masson, Paris, 215 p.
- Douglas, J. Jr., and T. F. Russell (1982), Numerical methods for convection-dominated diffusion problems based on combining the method of characteristics with finite element or finite difference procedures. *SIAM Journal on Numerical Analysis*; 19: 871-885.
- Fahs, M. (2007). Modélisation du transport réactif multicomposants en milieu poreux saturé. *Thèse de Doctorat. Université Louis Pasteur Strasbourg*.
- Fahs, M., A. Younes, and F. Delay (2009), On the use of large time steps with ELLAM for transport with kinetic reactions over heterogeneous domains. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 55: 1121-1126
- Farthing, M. W., C. E. Kees, and C. T. Miller (2003), Mixed finite element methods and higher order temporal approximations for variably saturated groundwater flow. *Advances in Water Resources*, 26: 373-394.
- Farthing, M. W., C. E. Kees, T. F. Russell, and C. T. Miller (2006a), An ELLAM approximation for advective–dispersive transport with nonlinear sorption. *Advances in Water Resources*, 29: 657-675.

- Farthing, M. W., C. E. Kees, T. F. Russell, and C. T. Miller (2006b), An ELLAM Approximation for Advective-Dispersive Transport with Nonlinear Equilibrium and Nonequilibrium Sorption. *XVI International Conference on Computational Methods in Water Resources*, Copenhagen, Denmark, 19-22 June 2006. Edited by: P.J. Binning, P.K. Engesgaard, H.K. Dahle, G.F. Pinder, and W.G. Gray.
- Fiori A., I. Jankovic, and G. Dagan (2011), The impact of local diffusion upon mass arrival of a passive solute in transport through three-dimensional highly heterogeneous aquifers. *Advances in Water Resources*, 34, 1563–1573.
- Gelhar, L. W., and G. L. Axness (1983), Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. *Water Resources Research*, 19(1): 161-180.
- Healy, R. W., and T. F. Russell (1993), A finite volume Eulerian-Lagrangian Adjoint Method for solution of the advection-Dispersion Equation. *Water Resources Research*, 29(7): 2399-2413.
- Herzer, J., and W. Kinzelbach (1989), Coupling of Transport and Chemical Processes in Numerical Transport Models. *Geoderma*, 44:115-127.
- Ippisch, O., H. J. Vogel, and P. Bastian (2006), Validity limits for the van Genuchten–Mualem model and implications for parameter estimation and numerical simulation. *Advances in Water Resources*, 29: 1780-1789.
- Jankovic, I., D. R. Steward, R. J. Barnes, and G. Dagan (2009), Is transverse macrodispersivity in three-dimensional groundwater transport equal to zero? A counterexample, *Water Resources Research*, 45, W08415.
- Kaaschieter, E. F. (1990), Mixed hybrid finite elements for saturated groundwater flow. In *Computer Methods in Water Resources*, Venice, Italy, June 11-15, Computational Mechanics Publications, 17-22.

- Kaluarachchi, J. J., and J. Morshed (1995), Critical assessment of the operator-splitting technique in solving the advection-dispersion-reaction equation: 1. First-order reaction. *Advances in Water Resources*, 18: 89-100.
- Kanney, J. F., C. T. Miller, and C. T. Kelley (2003), Convergence of iterative split operator for approximating non linear reactive transport problem. *Advances in Water Resources*, 26: 247-261.
- Kirkner, D. J., T. L. Theis, and A. A. Jennings (1984), Multicomponent solute transport with sorption and soluble complexation. *Advances in Water Resources*, 7:120-125.
- Kirkner, D. J., A. A. Jennings, and T. L. Theis (1985), Multi solute mass transport with chemical interaction kinetics. *Journal of Hydrology*, 76: 107-117.
- Kirkner, D. J., and H. Reeves (1988), Multicomponent mass transport with homogeneous and heterogeneous chemical reactions: Effects of the chemistry on the choice of numerical algorithm. 1. Theory. *Water Resources Research*, 24(10): 1719-1729.
- Konikow, L., and J. Bredehoeft (1978). Computer model of two dimensional solute transport and dispersion in groundwater. *US Government Printing Office, Washington, D.C.*
- Kräutle, S., and P. Knabner (2005), A new numerical reduction scheme for fully coupled multicomponent transport-reaction problems in porous media. *Water Resources Research*, 41(9): W09414.
- LaBolle, E. M., G. E. Fogg, and A. F. B. Tompson (1996), Random-Walk Simulation of Transport in Heterogeneous Porous Media: Local Mass-Conservation Problem and Implementation Methods, *Water Resources Research*, 32(3): 583-593.
- Lacombe, G., and S. Mas-Gallic (1999), Presentation and analysis of a diffusion-velocity method. *Third International Workshop on Vortex Flows and Related Numerical Methods, ESAIM Proceedings*, 7: 225-233.

-
- Meissner, U. (1973), A mixed finite element model for use in potential flow problem. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 6: 467-473.
- Miller, C. T., and A. J. Rabideau (1993), Development of split operator, Petrov-Galerkin methods to simulate transport and diffusion problems. *Water Resources Research*, 29(7): 2227-2240.
- Mosé, R. (1990). Application de la méthode des éléments finis mixtes hybrides et de la “marche au hasard” pour la modélisation de l’écoulement et du transport de masse en milieu poreux. *Thèse de Doctorat. Université Louis Pasteur Strasbourg*.
- Mosé, R., P. Siegel, Ph. Ackerer, and G. Chavent (1994), Application of the mixed hybrid finite element approximation in a ground water flow model: Luxury or necessity?. *Water Resources Research*, 30(11): 3001-3012.
- Peyret, R., and T. D. Taylor (1983). *Computational methods for Fluid Flow. Springer-Verlag, New-York*.
- Prickett, T. A., T. G. Naymik, and C. G. Lonquist (1981), A random walk solute transport model for selected groundwater quality evaluations. *Illinois State Water Survey, Bulletin* 65.
- Ramasomanana, F., and A. Younes (2011), Efficiency of the Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method for solving advection-dispersion equation on highly heterogeneous media. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 66 (in press).
- Ramasomanana, F., A. Younes, and M. Fahs (2011), Modeling 2D Multispecies Reactive Transport in Saturated/Unsaturated Porous Media with the Eulerian–Lagrangian Localized Adjoint Method. *Water, Air, & Soil Pollution.*, pp. 1-13.
- Raviart, P. A., and J. M. Thomas (1977), A mixed hybrid finite element method for the second order elliptic problem. *Lectures Notes in Mathematics*, 606: 292-315. Springer-Verlag, New York.

- Raviart, P. A. (1985). *An analysis of particle methods*. Numerical Methods in Fluid Dynamics Lecture Notes in Mathematics, 112: 243-324.
- Reed, W. H., and T. R. Hill (1973), Triangular mesh methods for the neutron transport equation. *Los Alamos Scientific Laboratory Report*, LA-UR: 73-479.
- Rees, I., I. Masters, A. G. Malan, and R. W. Lewis (2004), An edge-based finite volume scheme for saturated-unsaturated groundwater flow. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(42-44), 4741-4759.
- Remson, I., G. M. Hornberger, and F. J. Molz (1971). Numerical methods in subsurface hydrology. *Wiley, New-York*.
- Roe, P. L. (1986), Characteristic based schemes for the Euler equation. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 18: 337-365.
- Russell, T. F., and R. V. Trujillo (1990), Eulerian-Lagrangian localized adjoint methods with variable coefficients in multiple dimensions, *Computational Methods in Surface Hydrology, Proceedings of the Eighth International Conference on Computational Methods in Water Resources, Italy, Venice*, pp: 357-363.
- Russell, T. F. (2002), Numerical dispersion in Eulerian-Lagrangian methods. *in: S.M. Hassanizadeh et al., (Eds), Computational methods in Water Resources Elsevier, Amsterdam*; 2: 963-970.
- Russell, T. F., and P. Binning (2004), Oh no, not the wiggles again! A revisit of an old problem and a new approach. *In Computational Methods in Water Resources*, Miller CT et al. (eds), 1:483-494. Elsevier: Amsterdam.
- Russell, T. F., and M. A. Celia (2002), An overview of research on Eulerian-Lagrangian Localized adjoint methods (ELLAM). *Advances in Water Resources*, 25: 1215-31.

-
- Saaltink, M. W., C. Ayora, and J. Carrera (1998), A mathematical formulation for reactive transport that eliminates mineral concentrations. *Water Resources Research*, 34(7): 1649-1656.
- Saaltink, M. W., J. Carrera, and C. Ayora (2001), On the behavior of approaches to simulate reactive transport. *Journal of Contaminant Hydrology*, 48: 213-235.
- Salandin, P., and V. Fiorotto (2000), Dispersion tensor evaluation in heterogeneous media for finite Peclet values. *Water Resources Research*, 36(6), 1449-1455.
- Steefel, C., and A. Lasaga (1994), A coupled model for transport of multiple chemical species and kinetic precipitation/dissolution reactions with application to reactive flow in single phase hydrothermal systems. *American Journal of Science*, 294: 529-592.
- Vag, J. E., H. Wang, and H. K. Dahle (1996), Eulerian-Lagrangian localized adjoint methods for systems nonlinear advective-diffusive-reactive transport equations. *Advances in Water Resources*, 19 (5): 297-315.
- Valocchi, A. J., R. L. Street, and P. V. Roberts (1981), Transport of ion exchanging solutes in ground water: Chromatographic theory field simulation. *Water Resources Research*, 17(5): 1517-1527.
- Valocchi, A. J., and M. Malmstead (1992), Accuracy of operator splitting for advection-dispersion reaction problems. *Water Resources Research*, 28(5): 1471-1476.
- van Genuchten, M. T. (1980), A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44: 892-898.
- Vogel, T., M. Th . van Genuchten, and M. Cislerova (2001), Effect of the shape of the soil hydraulic functions near saturation on variably-saturated flow predictions. *Advances in Water Resources*, 24: 133-144.
- Wang, J. F., and M. P. Anderson (1982). Introduction to groundwater modelling. *Freeman, San Francisco*.

- Wang, H., R.E. Ewing, and M. A. Celia (1995), Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for reactive transport with biodegradation. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 11: 229-254.
- Yeh, G. T., and V. S. Tripathi (1989), A critical evaluation for recent developments in hydrogeochemical transport models of reactive multichemical components. *Water Resources Research*, 25(1): 93-108.
- Yeh, G. T., and V. S. Tripathi (1991), A model for simulating transport of multi-species components: Model development and demonstration. *Water Resources Research*, 27(12): 3075-3094.
- Younes, A. (1998). Modélisation de l'écoulement et du transport de masse en milieu poreux avec les éléments finis mixtes et discontinues : prise en compte du contraste de masse volumique et de viscosité. *Thèse de Doctorat. Université Louis Pasteur Strasbourg*.
- Younes, A. (2004), An accurate moving grid Eulerian-Lagrangian localized method for solving the one dimensional variable coefficient ADE. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 45: 157-178.
- Younes, A., P. Ackerer, and G. Chavent (2004), From mixed finite elements to finite volumes for elliptic PDEs in two and three dimensions. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 59: 365-388.
- Younes, A., and P. Ackerer (2005), Solving the advection-diffusion equation with the Eulerian-Lagrangian localized adjoint method on unstructured meshes and non uniform time stepping. *Journal of Computational Physics*, 208: 384-402.
- Younes, A., P. Ackerer, and F. Lehmann (2006a), A new efficient Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for solving the advection-dispersion equation on unstructured meshes. *Advances in Water Resources*, 29: 1056-1074.
- Younes, A., P. Ackerer, and F. Lehmann (2006b), A new mass lumping scheme for the mixed hybrid finite element method, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 67: 89-107.

Younes, A., and M. Fahs (2007), Direct and split operator approaches with ELLAM for reactive transport equations. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 53: 2161-2169.

Younes A., M. Fahs, and P. Ackerer (2008), A new approach to avoid excessive numerical diffusion in Eulerian-Lagrangian methods. *Communication in Numerical Methods in Engineering*, 24: 897-910.

Liste des figures

	Page
Figure 1 : Les fonctions d'interpolation (RT_0) dans le cas des triangles.	27
Figure 2 : Le code de calcul pour la résolution de l'hydrodynamique.	34
Figure 3 : Schéma des différences finies amont.	51
Figure 4 : Comparaison de la méthode VD pour différents pas de temps.	55
Figure 5 : Comparaison de la méthode VD pour différents nombre de particules.	56
Figure 6 : Solution avec $\varepsilon_p = 0.25\sqrt{\Delta\mathbf{x}_p^{max}}$.	57
Figure 7 : Solution avec $\varepsilon_p = 0.75\sqrt{\Delta\mathbf{x}_p^{max}}$.	57
Figure 8 : Le forward-tracking avec la MOC.	59
Figure 9 : Défaut de masse du au maillage.	61
Figure 10 : Comparaison de la MOC pour différents maillages.	62
Figure 11 : Initialisation et backtracking avec la MMOC.	63
Figure 12 : Deuxième pas de temps de calcul avec la MMOC.	64
Figure 13 : Comparaison de la MMOC pour différents pas de temps.	64
Figure 14 : Fonction test pour la méthode FE-ELLAM.	67
Figure 15 : Fonction test pour la méthode FV-ELLAM.	67
Figure 16 : Les points d'intégration pour l'approche backward-tracking.	72
Figure 17 : Les points d'intégration pour l'approche forward-tracking.	73
Figure 18 : Les points d'intégration utilisés par l'approche backward-tracking pour le calcul de l'intégrale de masse entrante.	74
Figure 19 : Les points d'intégration utilisés par l'approche forward-tracking pour le calcul de l'intégrale de masse entrante.	75
Figure 20 : Les points d'intégration nécessaires au calcul de l'intégrale de masse au pas de temps (n) et de la masse sortante.	77
Figure 21 : Comparaison des approches forward et backward avec les ELLAM.	79

Figure 22	: La diffusion numérique avec les ELLAM.	81
Figure 23	: Le backward-tracking avec la méthode C_ELLAM.	85
Figure 24	: Le forward-tracking avec la méthode C_ELLAM.	86
Figure 25	: Mise à jour des concentrations et forward-tracking.	87
Figure 26	: Le code de calcul pour la résolution du transport.	88

