

PRÉAMBULE

Ce rapport rend compte en partie du projet:

FLEUVE SAINT-LAURENT -Modélisation intégrée du suivi de la qualité de l'eau du tronçon Tracy - Lac Saint-Pierre

La liste suivante donne les titres et numéros d'archivage des documents constituant la série complète de rapports sur ce projet:

- RAPPORT No 1: MEME TITRE QUE CELUI DU PROJET

Volume 1,

Tome 1: *Modélisation hydrodynamique des écoulements en eau libre du tronçon Tracy
- lac Saint-Pierre*

INRS-Eau - No RS-317a

Volume 1,

Tome 2: Annexe infographique:

*Atlas numérique des courants et autres caractéristiques des écoulements en
eau libre du tronçon Tracy - lac Saint-Pierre*

INRS-Eau - No RS-317b ; format 28cm x 43cm (en couleur).

Volume 2: *Caractérisation de la diffusivité des écoulements du tronçon Tracy - Lac
Saint-Pierre par tests de rhodamine et télédétection aéroportée*

INRS-Eau - No RS-318

Volume 3: *Analyse numérique de la contamination du tronçon Tracy - lac Saint-Pierre
par les effluents industriels et les tributaires.*

INRS-Eau - No RS-319

- RAPPORT No 2: (LE PRÉSENT DOCUMENT)

**DEVELOPPEMENT ET VALIDATION ANALYTIQUE D'UN
MODELE LAGRANGIEN DE SIMULATION DES PANACHES
D'EFFLUENTS ET DE TRIBUTAIRES**

INRS-Eau - No RS-320

- RAPPORT No 3: LOGICIEL PANACHE: MANUEL DE L'UTILISATEUR

INRS-Eau - No RS-321

ÉQUIPE DE RÉALISATION

CENTRE SAINT-LAURENT (Environnement Canada, Conservation et Protection)

Déléguée scientifique : Lynn Cleary, M.Sc., bio.

Spécialiste : Isabelle Goulet, géog.

INSTITUT NATIONAL DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE - Eau

Directeur de projet : Michel Leclerc, M.Sc., D.Ing., ing.
Professeur-chercheur

Responsable du développement : Grégoire Martin, M.Sc., Math.-info.

Conseiller scientifique : Olivier Banton, D.Ing., géol.

Génie logiciel : Martin Montminy, B.Sc., Info.-math.
: Jérôme Benoit, B.Sc., Phys., info.

Hydrodynamique : Paul Boudreau, M.Sc.-Eau, ing.

ASSEAU inc. (Consultant)

Directeur de projet : Paul Boudreault, M.Sc. Eau, biol.

Spécialistes : Pierre Lavallée, Ph.D., ing., Prés.
: Pierre Desjardins, M.Sc, Géogr. phys.
: François Ouzillot, Ph.D., ing.



TABLE DES MATIERES

RESUME	1
1 INTRODUCTION	3
2 DESCRIPTION DU MODELE THEORIQUE	5
2.1 Modèle hydrodynamique bidimensionnel	5
2.1.1 Equations de conservation	5
Equation de conservation de la masse.	6
Equations de conservation de la quantité de mouvement.	6
2.1.2 Conditions initiales et aux limites	8
2.1.3 Discrétisation	9
2.2 Modèle de propagation d'un soluté	12
2.2.1 Forme tridimensionnelle locale et instantanée	12
2.2.2 Pondération des variables: intégration temporelle	14
2.2.3 Equation aux valeurs pondérées	16
2.2.4 Méthode d'intégration verticale	18
2.2.5 Modèle bidimensionnel (2D) horizontal	19
2.2.6 Conditions initiales et aux limites	22
2.2.7 Méthode de résolution	23
Approches eulériennes - vs - lagrangiennes.	23
Diverses expériences pratiques.	26
L'équation de Fokker-Planck.	26
Solution par la marche au hasard.	27
Cas simplifié: l'écoulement uniforme.	28
2.2.8 Choix des paramètres	29
Concept de longueur de mélange.	30
Longueur de mélange et dispersion d'un soluté.	32
Estimation de la diffusivité de fond: D_f	32
Diffusivité turbulente transversale: D_N	34
Diffusivité combinée: D	38
Anisotropie, diffusivité longitudinale D_L	38



Transposition en valeurs nodales.	38
3 METHODE D'IMPLANTATION	39
3.1 Principes	39
3.1.1 Le repérage codé une fois pour toutes: discrétisation mixte	40
3.1.2 Le déplacement moyen calculé une fois pour toutes: grille mobile	40
3.1.3 La réutilisation d'un panache partiel: principe de convolution	42
3.1.4 Les particules adimensionnelles: panache unitaire	42
3.1.5 Le lissage diffusif contrôlé	43
3.2 Schéma algorithmique d'ensemble	44
4 TRAITEMENT DE LA DISPERSION	46
4.1 Solution analytique de l'équation de diffusion	47
4.2 Traitement aléatoire de la dispersion	47
4.3 Générateur de nombres aléatoires	51
5 TRAITEMENT DE LA CONVECTION	55
5.1 Algorithmes de calcul du pas convectif	55
5.1.1 Schéma d'Euler explicite	55
5.1.2 Schéma de Runge-Kutta	57
5.1.3 Schéma itératif semi-implicite d'Euler	59
5.1.4 Schéma d'Euler explicite avec pas de temps divisé	62
5.1.5 Schéma d'Euler semi-implicite avec pas de temps divisé	63
5.2 Convection par déplacement d'un maillage d'éléments finis	64
5.2.1 Caractéristiques de la méthode d'interpolation par éléments finis	65
5.2.2 Déplacement du maillage	67
5.2.3 Interpolation des variables sur le maillage déplacé	68
Sommet à l'intérieur du domaine mouillé et du maillage de départ.	68
Sommet dans le domaine mouillé mais hors du maillage.	69
Sommet hors du domaine mouillé mais dans le maillage.	70
5.2.4 Utilisation du maillage déplacé dans le déplacement des particules (pas convectif)	71
Optimisation du calcul.	72



5.3	Couplage de la convection et de la dispersion	74
5.3.1	Repérage des noeuds et des particules	74
	Zone de simulation.	75
	Grille de repérage.	76
	Particule sortant du domaine mouillé.	78
5.3.2	Evaluation des coefficients de dispersion sur une ligne de courant	78
6	CALCUL DE LA CONCENTRATION	80
6.1	Méthode de calcul classique avec une grille régulière	80
6.1.1	Problèmes de la grille régulière	81
	Maille trop petite, oscillations dans la distribution de la concentration.	82
	Maille trop grande, dispersion artificielle.	82
6.1.2	Conséquences méthodologiques	84
6.2	Méthode de la zone d'influence des particules	84
6.2.1	Principe de la méthode	85
6.2.2	Considérations temporelles	87
6.2.3	Détermination de la zone d'influence ou emprise des particules	88
6.3	Evolution des charges de contaminant	89
6.4	Panache unitaire	90
6.5	Dynamique non-conservative d'un contaminant	91
6.5.1	Fonction évolutive adimensionnelle	91
6.5.2	Forme dégradée	92
6.5.3	Types de dégradation	93
6.6	Modes d'injection	94
6.6.1	Injection ponctuelle	94
6.6.2	Injection répartie uniforme	94
6.6.3	Injection répartie gaussienne	95
6.6.4	Injection répartie proportionnelle au débit spécifique	96
7	TESTS	98
7.1	Tests sur l'étape convective	98
7.1.1	Algorithmes considérés	98



7.1.2 Tests sur le déplacement du maillage	103
7.1.3 Tests sur la précision du calcul convectif	104
Description du cas testé.	104
Comparaison de la précision des divers algorithmes.	105
Discussion.	106
Influence du choix du pas de temps.	109
Influence du degré implicite des méthodes (choix du paramètre α).	110
7.2 Tests sur l'étape diffusive aléatoire	115
7.2.1 Dispersion gaussienne d'un nuage de particules	116
7.2.2 Tests sur le pas de temps et le nombre de particules	117
7.2.3 Test avec un champ de vitesse non-nul	117
7.3 Tests sur le calcul des concentrations	119
7.3.1 Conventions de calcul	120
7.3.2 Tests sur un panache non-convectif	120
7.3.3 Tests sur un panache convectif	127
Influence de ρ	128
Effet du débit particulière.	133
8 CONCLUSION	139
8.1 Sur le choix de la méthode lagrangienne	139
8.2 Sur les développements théoriques	139
8.3 Sur le choix des paramètres de diffusivité	140
8.4 Sur les choix algorithmiques et leur vérification	140
8.5 Sur l'implantation informatique et la convivialité	140
8.6 Sur les réserves d'application	141
8.7 Sur une nouvelle méthodologie d'analyse de la contamination	142
BIBLIOGRAPHIE	143
LISTE DES SYMBOLES	149
GLOSSAIRE	155



Liste des figures

2.1	Conventions du modèle hydrodynamique	6
2.2	Conventions des conditions aux limites	9
2.3	Représentation des variables et données du modèle hydrodynamique	10
2.4	Discrétisation par éléments finis du tronçon Tracy - lac Saint-Pierre (tiré du rapport #1, vol. #1 de cette série)	11
2.5	Flux massiques au travers d'un volume élémentaire	12
2.6	Hypothèse de Reynolds	15
2.7	Conventions verticales	19
2.8	Représentation théorique des profils verticaux de vitesses et de concentration	21
2.9	Conditions aux limites	23
2.10	Contraintes turbulentes dans un écoulement	30
3.1	Déplacement et repérage une fois pour toutes	41
3.2	Découpage temporel d'une simulation	43
3.3	Méthodologie générale de calcul du logiciel PANACHE	45
4.1	Transformation d'une variable aléatoire en distribution normale	52
5.1	Calcul du pas convectif par un schéma d'Euler explicite	57
5.2	Calcul du pas convectif par un schéma Runge-Kutta d'ordre 4	59
5.3	Calcul du pas convectif par un schéma d'Euler semi-implicite	60
5.4	Transformation de l'élément triangulaire $T6$ en quatre $T3$ et numérotation des noeuds	65
5.5	Déplacement du maillage pour le calcul du pas convectif	67
5.6	Interpolation des attributs du modèle hydrodynamique pour le maillage déplacé ..	68
5.7	Cas du sommet sortant du domaine de simulation à une frontière ouverte	69
5.8	Déplacement des sommets à la limite du domaine mouillé	70
5.9	Définition de la zone de simulation et de la grille de repérage	76
5.10	Recoupement de plusieurs éléments $T3$ par une maille de repérage	77
6.1	Calcul de la concentration sur une grille régulière	81
6.2	Discontinuité du champ produite par une grille de calcul régulière à pas trop petit	83
6.3	Dispersion artificielle produite par une grille de calcul régulière à pas trop grand	83



6.4	Diverses fonctions de distribution unidimensionnelle de l'influence (ou emprise) d'une particule	85
7.1	Esquisse du maillage utilisé pour le test de déplacement d'une grille	103
7.2	Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec un schéma d'Euler explicite ..	107
7.3	Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec un schéma d'Euler semi-implicite	107
7.4	Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec un schéma d'Euler explicite avec pas divisé	107
7.5	Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec un schéma d'Euler semi-implicite avec pas divisé	108
7.6	Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec un schéma Runge-Kutta	108
7.7	Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec un schéma itératif de Runge-Kutta	108
7.8	Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec un schéma de Runge-Kutta à pas divisé	109
7.9	Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec un schéma de Runge-Kutta à pas divisé explicite	109
7.10	Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma d'Euler semi-implicite et $\alpha = 0,1$	112
7.11	Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec schéma d'Euler semi-implicite et $\alpha = 0,5$	112
7.12	Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma d'Euler semi-implicite et $\alpha = 0,9$	112
7.13	Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec schéma itératif de Runge-Kutta et $\alpha = 0,1$	114
7.14	Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma itératif de Runge-Kutta et $\alpha = 0,5$	114
7.15	Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec schéma itératif de Runge-Kutta et $\alpha = 0,9$	114
7.16	Panache convectif - Effet de lissage avec $\rho = 0,1$	123
7.17	Panache convectif - Effet de lissage avec $\rho = 0,2$	124
7.18	Panache convectif - Effet de lissage avec $\rho = 0,3$	124



7.19	Panache convectif - Effet de lissage avec $\rho = 0,4$	125
7.20	Panache convectif - Effet de lissage avec $\rho = 0,5$	125
7.21	Panache convectif - Effet de lissage avec $\rho = 0,6$	126
7.22	Panache convectif - Effet de lissage avec $\rho = 0,8$	126
7.23	Panache convectif - Effet de lissage avec $\rho = 1,0$	127
7.24	Panache convectif - Effet de lissage avec $\rho = 0,1$	129
7.25	Panache convectif - Effet de lissage avec $\rho = 0,2$	129
7.26	Panache convectif - Effet de lissage avec $\rho = 0,3$	130
7.27	Panache convectif - Effet de lissage avec $\rho = 0,4$	130
7.28	Panache convectif - Effet de lissage avec $\rho = 0,5$	131
7.29	Panache convectif - Effet de lissage avec $\rho = 0,6$	131
7.30	Panache convectif - Effet de lissage avec $\rho = 0,8$	132
7.31	Panache convectif - Effet de lissage avec $\rho = 1,0$	132
7.32	Panache convectif - Transect à 5 kilomètres - Effet du débit particulaire avec $Q_p = 0,5/s$ et $\rho = 0,3$	134
7.33	Panache convectif - Transect à 5 kilomètres - Effet du débit particulaire avec $Q_p = 0,5/s$ et $\rho = ,4$	134
7.34	Panache convectif - Transect à 5 kilomètres - Effet du débit particulaire avec $Q_p = 1/s$ et $\rho = 0,3$	135
7.35	Panache convectif - Transect à 5 kilomètres - Effet du débit particulaire avec $Q_p = 1/s$ et $\rho = 0,4$	135
7.36	Panache convectif - Transect à 3 kilomètres - Effet du débit particulaire avec $Q_p = 6/s$ et $\rho = 0,3$	136
7.37	Panache convectif - Transect à 3 kilomètres - Effet du débit particulaire avec $Q_p = 6/s$ et $\rho = 0,4$	136
7.38	Panache convectif - Profil longitudinal - Effet du débit particulaire avec $Q_p = 0,5/s$ - Effet de lissage avec $\rho = 0,3$ et $0,4$	137
7.39	Panache convectif - Profil longitudinal - Effet du débit particulaire avec $Q_p = 1,0/s$ - Effet de lissage avec $\rho = 0,3$ et $0,4$	137
7.40	Panache convectif - Profil longitudinal - Effet du débit particulaire avec $Q_p = 3,0/s$ - Effet de lissage avec $\rho = 0,3$ et $0,4$	138



7.41	Panache convectif - Profil longitudinal - Effet du débit particulaire avec $Q_p = 6,0/s$ - Effet de lissage avec $\rho = 0,3$ et $0,4$	138
------	---	-----



Liste des tableaux

2.1	Valeurs typiques de diffusivité à diverses échelles	22
2.2	Mesures du mélange transversal dans des canaux rectangulaires à côtés lisses (extrait de Fischer et coll. , 1979)	35
2.3	Mesures du mélange transversal dans des cours d'eau avec méandres et singulari- tés (extrait de Fischer et coll. , 1979)	36
7.1	Temps de calcul pour le déplacement circulaire d'un maillage de 2500 noeuds	104
7.2	Précision du déplacement circulaire d'une particule avec $\Delta t = 0,05$ s	105
7.3	Précision du déplacement circulaire d'une particule avec $\Delta t = 0,005$ s	110
7.4	Influence du choix du paramètre α sur le déplacement circulaire d'une particule avec le schéma d'Euler semi-implicite	111
7.5	Influence du choix du paramètre α sur le déplacement circulaire d'une particule avec le schéma de Runge-Kutta	113
7.6	Sensibilité de la dispersion par rapport nombre de particules et au pas de temps Δt	118
7.7	Rôle du rayon d'influence des particules sur la distribution de masse après la calcul de la concentration	122

Liste des algorithmes

Algorithme 5.1	Calcul du pas convectif avec un schéma d'Euler explicite (EE)	56
Algorithme 5.2	Calcul du pas convectif avec un schéma Runge-Kutta d'ordre 4 (RK)	58
Algorithme 5.3	Calcul du pas convectif avec itération du schéma d'Euler semi- implicite (ESI)	61
Algorithme 5.4	Calcul du pas convectif avec schéma d'Euler et pas de temps divisé (EPPD)	62
Algorithme 5.5	Calcul du pas convectif avec schéma itératif d'Euler et pas de temps divisé (ESIPD)	63
Algorithme 7.1	Calcul du pas convectif avec un schéma Runge-Kutta itératif d'or- dre 4 (RKI)	99



Algorithme 7.2	Calcul du pas convectif avec schéma de Runge-Kutta d'ordre 4, et pas de temps divisé par m (RKPD)	100
Algorithme 7.3	Calcul du pas convectif avec schéma itératif de Runge-Kutta d'ordre 4 et pas de temps divisé par m (RKIPD)	101



RESUME

A l'issu d'un projet expérimental consacré à la modélisation et à l'analyse de la contamination du tronçon Tracy - lac Saint-Pierre sur le fleuve Saint-Laurent, le présent rapport porte sur les bases théoriques et algorithmiques de *PANACHE*, un logiciel créé spécifiquement afin de représenter le transport et la dispersion des contaminants à partir d'effluents industriels ou urbains.

Les bases mathématiques du modèle hydrodynamique bidimensionnel horizontal *HYDREAU* sont d'abord revues. Les résultats produits à cette étape (vitesses, profondeurs, diffusivités) sont requis pour appliquer un modèle de propagation d'un soluté en milieu fluvial. Ce modèle est la pierre angulaire du logiciel *PANACHE*. L'hypothèse d'un milieu bien mélangé dans la verticale qui sous-tend le modèle retenu est vérifiée dans la plupart des milieux non-stratifiés à écoulement gravitationnel où les dimensions horizontales prédominent nettement sur la profondeur. Après avoir été démontrée à partir de sa version tridimensionnelle locale et instantanée, l'équation de base bidimensionnelle du modèle est enfin transformée pour être admissible à une résolution par la méthode de la marche au hasard.

L'exposé sur ce modèle accorde une importance primordiale à l'établissement de la valeur des paramètres de diffusion. Ceux-ci sont formulés à l'aide du concept de "longueur de mélange" en fonction d'une part de l'intensité de la turbulence produite localement par la rugosité du lit, et des contraintes turbulentes produites par les variations du champ de vitesses dans le plan horizontal, d'autre part.

Connue également sous le nom de méthode de "déplacement aléatoire de particules de référence", la méthode de résolution de l'équation de propagation d'un soluté considère la dispersion dans un milieu continu comme un phénomène aléatoire. Le déplacement d'une particule de référence peut donc être décrit par deux mouvements indépendants. Le premier résulte de l'advection contrôlée par la vitesse moyenne de l'écoulement. Le second est généré par la dispersion des particules autour de leur position moyenne, mouvement aléatoire résultant de la turbulence au sein de l'écoulement.

Avec cette méthode, les calculs doivent être optimisés à tous les niveaux et elle est tributaire d'une bonne stratégie d'ensemble. Plusieurs principes ont inspiré nos choix algorithmiques:

- Une *discrétisation mixte* pour porter l'information hydrodynamique et repérer les particules;



-
- Une grille mobile pour le déplacement convectif des particules;
 - Une simulation découpée en tronçons (convolutions) pour éviter la répétition inutile de calculs;
 - Un pré-calcul de concentration en valeur unitaire définissant le pouvoir de dilution du milieu récepteur sans égard aux charges rejetées;
 - Un lissage diffusif contrôlé des résultats de concentration.

L'implantation de la méthode de la marche au hasard dans le logiciel *PANACHE* a été vérifiée de différentes façons pour être considérée comme représentative d'un processus de convection-diffusion. Le but de ces tests est de vérifier la programmation et la qualité des résultats attendus; ils visent également à mettre en évidence les limites du logiciel et les meilleures valeurs de paramètres à utiliser. La validation sur le terrain est également une étape majeure à franchir avant de procéder à l'implantation d'un tel outil dans la pratique¹. Les tests analytiques essentiels présentés dans ce rapport portent sur la convection, la dispersion et le calcul des concentrations.

¹ Voir le rapport #1 - volume 2: *Caractérisation de la diffusivité des écoulements du tronçon Tracy - Lac Saint-Pierre par tests de rhodamine et télédétection aéroportée* ; et volume 3: *Analyse numérique de la contamination du tronçon Tracy - Lac Saint-Pierre par les effluents industriels et les tributaires*



1 INTRODUCTION

A l'issue d'un projet expérimental consacré à la modélisation et à l'analyse de la contamination du tronçon Tracy - lac Saint-Pierre sur le fleuve Saint-Laurent, le présent rapport porte sur les bases théoriques et algorithmiques de *PANACHE*, un logiciel créé spécifiquement afin de représenter le transport et la dispersion des contaminants à partir d'effluents industriels ou urbains.

Les buts de ce rapport sont:

- *de démontrer la provenance mathématique de l'équation de propagation d'un soluté à deux dimensions ainsi que la signification des paramètres empiriques de ce modèle;*
- *de justifier le choix de l'approche lagrangienne retenue pour résoudre numériquement ce modèle en démontrant sa pertinence, sa supériorité sur d'autres méthodes et sa faisabilité;*
- *de donner les bases algorithmiques de son implantation informatique dans le logiciel PANACHE; et,*
- *de démontrer la validité analytique de l'outil à l'aide de tests appropriés.*

Dans ce contexte, le chapitre 2 porte sur le développement mathématique bidimensionnel à partir des équations locales et instantanées à trois dimensions de propagation d'un soluté dans un milieu fluvial. La démonstration inclut des considérations sur le modèle hydrodynamique qui le sous-tend, ainsi que sur la turbulence et les paramètres empiriques qui en découlent. La faisabilité d'une approche lagrangienne est ensuite démontrée.

Le chapitre 3 est consacré aux principes algorithmiques de base qui ont été appliqués pour l'implantation de cette approche dans le logiciel *PANACHE*. Des critères d'efficacité informatique, de précision et de consistance des résultats y sont proposés pour le développement de l'outil.

Les chapitres 4, 5 et 6 portent sur la description et l'implantation proprement dite des algorithmes proposés. Les trois volets majeurs du programme, soit la dispersion aléatoire, la convection sur la trajectoire des lignes de courant et le calcul de la concentration d'un soluté y sont successivement abordés.



Enfin, le dernier chapitre prouvera à l'aide de multiples tests la valeur analytique de l'outil dans ses diverses fonctionnalités. Il ne s'agit pas encore ici d'une validation à l'aide de données de terrain, cette étape constituant une phase distincte de nos travaux¹.

Nous prévenons le lecteur moins averti des considérations mathématiques que certains développements lui apparaîtront peut-être inaccessibles et nous nous excusons de ce fait. Cependant, ces développements algébriques, quoique nécessaires pour démontrer la valeur scientifique de l'outil, ne sont pas essentiels à la compréhension générale de la méthode. C'est pourquoi nous avons essayé dans la mesure du possible, d'introduire des passages de nature plus descriptive et de nombreuses illustrations qui permettront aux lecteurs et utilisateurs de comprendre l'essentiel de la philosophie du programme et les bases algébriques utiles aux applications.

Le programme informatique résultant de ces développements est accompagné d'un manuel-guide qui assistera l'utilisateur dans les applications pratiques. Ce guide fait l'objet d'un rapport² spécifique dans le cadre de la présente série de documents.

Une interface-usager conviviale, c'est-à-dire, comportant des ressources ergonomiques et info-graphiques appropriées, a également été élaborée pour assister visuellement l'utilisateur dans ses travaux d'analyse. Ce faisant, nous avons attaché une importance considérable au graphisme afin que l'utilisateur puisse constater l'évolution des phénomènes auxquels il s'intéresse.

Mentionnons enfin que le programme a été développé en langage C sur une plate-forme Intel/80386(80486) - OS2/PM™ (*Presentation Manager*) et qu'il comporte des ponts informatiques permettant les transferts de données avec les programmes SPANS™ d'Intera TYDAC (Système d'information géographique), HYDREAU d'INRS (modèle hydrodynamique) et SOCOUS (Système interactif de gestion de base de données sur les contaminants du fleuve Saint-Laurent) développé par la firme ASSEAU Inc. de Québec.

¹ Voir le Volume #3 du Rapport 1: *Analyse numérique de la contamination du tronçon Tracy - lac Saint-Pierre par les effluents industriels et les tributaires*.

² Voir *LE LOGICIEL PANACHE. Guide de l'utilisateur* (Rapport #3 de la présente série).



2 DESCRIPTION DU MODELE THEORIQUE

Dans ce chapitre, nous allons exposer les bases mathématiques du modèle de propagation d'un soluté en milieu fluvial. Nous allons mettre l'emphasis sur la description bidimensionnelle horizontale qui sous-tend l'hypothèse d'un milieu généralement bien mélangé dans la verticale. Cette hypothèse est vérifiée dans la plupart des milieux non-stratifiés à écoulement gravitationnel où les dimensions horizontales prédominent nettement sur la profondeur.

Notre démonstration commencera par un exposé sur le modèle hydrodynamique dont les résultats (vitesses, profondeurs, diffusivités) sont requis pour appliquer le modèle de propagation d'un soluté. Toutefois, le volet hydrodynamique ne sera abordé que sommairement; une démonstration plus complète est disponible dans le volume 1¹ du premier rapport de la présente série.

2.1 Modèle hydrodynamique bidimensionnel

La modélisation bidimensionnelle des écoulements à surface libre à l'aide des équations de Saint-Venant est devenue un outil scientifiquement reconnu dans le cadre de nombreuses études de génie hydraulique. On trouvera des exemples classiques de ce type de modèle dans Grotkop (1973), Connor et Wang (1974), Taylor et Davis (1975), Brebbia et Partridge (1976), Cochet (1979), Walters et Cheng (1980), Ouellet et coll. (1986).

De plus en plus, on voit apparaître des applications de ces modèles pour comprendre le milieu en tant qu'habitat pour les espèces de poissons (Boudreault et coll., 1988, 1989; Leclerc et coll., 1990a) et dans le cadre d'études d'impacts de projets d'ingénierie (De Broissia, 1987).

2.1.1 Equations de conservation

Le modèle qui est présenté ici a fait l'objet de diverses communications détaillées dans la littérature scientifique (Leclerc et coll., 1987, 1990 b,c). La version choisie est probablement la plus classique. Le modèle comprend une équation de conservation de la masse (continuité) et deux équations pour la conservation de la quantité de mouvement.

¹FLEUVE SAINT-LAURENT. *Modélisation intégrée du suivi de la qualité de l'eau du tronçon Tracy - Lac Saint-Pierre* (Rapport #1): *Modélisation des écoulements en eau libre du tronçon* (Volume #1).



Pour l'obtenir, les équations tridimensionnelles locales et instantanées sont d'abord intégrées dans le temps et sur la verticale. Cette procédure est analogue à celle démontrée à la section 2.2 (Modèle de propagation d'un soluté). Ces opérations font apparaître des termes de dispersion de la quantité de mouvement et permettent de représenter le milieu à l'aide de valeurs moyennes dans la verticale. Deux hypothèses majeures sont également posées: la pression est hydrostatique et l'eau est incompressible et a une densité constante. Ces hypothèses restreignent les applications dans les milieux stratifiés (lacs, estuaires marins). En fait, le modèle de Saint-Venant est approprié pour les milieux peu profonds, typiquement, les canaux, rivières, fleuves et estuaires supérieurs en eau douce.

Equation de conservation de la masse. (les symboles sont décrits à la figure 2.1):

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial Hu}{\partial x} + \frac{\partial Hv}{\partial y} = 0 \quad [2.1]$$

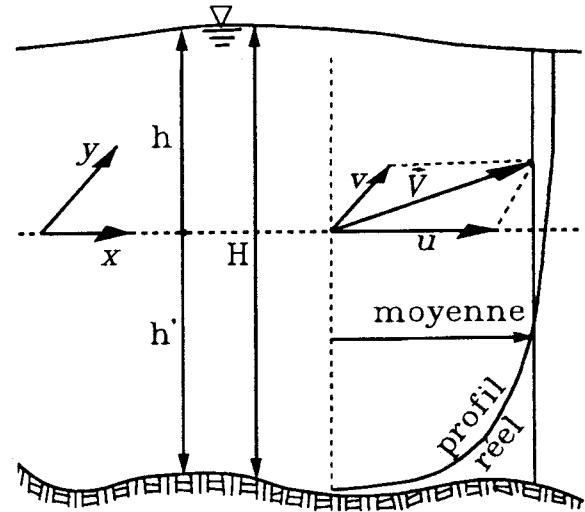


Figure 2.1.
Conventions du modèle hydrodynamique

Equations de conservation de la quantité de mouvement. Le momentum est une quantité physique vectorielle; pour cette raison, deux équations sont nécessaires pour en exprimer les composantes dans l'espace horizontal. Le modèle est le suivant:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + g \frac{\partial h}{\partial x} = F_x \quad [2.2]$$



$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + g \frac{\partial h}{\partial y} = F_y \quad [2.3]$$

$$F_x = -\frac{g n^2 |V| u}{H^{4/3}} + f_c v + \frac{\partial \tau_{xx}}{\rho \partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\rho \partial y} + \frac{C_w \rho_a |W| W_x}{\rho H} \quad [2.4]$$

$$F_y = -\frac{g n^2 |V| v}{H^{4/3}} - f_c u + \frac{\partial \tau_{yx}}{\rho \partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\rho \partial y} + \frac{C_w \rho_a |W| W_y}{\rho H} \quad [2.5]$$

C_w :	coefficient de traînée du vent;
f_c :	facteur de Coriolis;
F_x, F_y :	forces massiques résultantes en x et y;
g :	accélération gravitationnelle;
h :	cote du plan d'eau par rapport à un référentiel de niveau;
h' :	cote bathymétrique par rapport au même référentiel;
H :	profondeur totale;
n :	coefficient de frottement de Manning;
u, v :	composantes moyennes (dans la verticale) de la vitesse selon x et y;
$ \vec{V} $:	module de la vitesse du courant;
W_x, W_y :	composantes de la vitesse du vent;
$ \vec{W} $:	module de la vitesse du vent;
ρ :	masse spécifique de l'eau;
ρ_a :	masse spécifique de l'air;
τ_{ij} :	contraintes de Reynolds (dispersion de la quantité de mouvement).

Le coefficient de frottement de Manning tient compte d'un certain nombre de facteurs de résistance à l'écoulement comme la rugosité du lit, la présence d'un champ de glace ou encore, les macrophytes. Les contraintes de Reynolds peuvent être définies ainsi en utilisant la notation d'Einstein:

$$\tau_{ij} = \mu_T \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad \begin{matrix} i = 1, 2 \\ j = 1, 2 \end{matrix} \quad [2.6]$$



La viscosité cinématique turbulente μ_T est un paramètre ajustable du modèle. Il peut être spécifié comme constant pour l'ensemble du domaine de simulation ou encore, être évalué localement d'après le champ de vitesse en utilisant une expression du type "longueur de mélange". Nous reviendrons sur ce concept de longueur de mélange à la section 2.2.8 (Choix des paramètres).

2.1.2 Conditions initiales et aux limites

Les conditions aux limites sont symbolisées à la figure 2.2. Elles peuvent être du type:

- A) Débit ou niveau d'eau et orientation des courants à l'entrée des tributaires et à la limite amont du modèle;

$$Q = \hat{Q} \quad \text{ou} \quad h(t) = \hat{h}(t) \quad \text{et} \quad u_T = 0 \quad \text{sur} \quad S_{\text{amont}}$$

- B) Imperméabilité et, adhérence ou glissement aux limites latérales (rives):

$$\begin{aligned} u_N &= 0 && \text{(imperméabilité)} \\ u_T &= 0 && \text{(adhérence)} \\ u_T &= \text{libre} && \text{(glissement)} \end{aligned} \quad \text{sur} \quad S_{\text{rives}}$$

N, T : respectivement les directions normale et tangentielle à la frontière;

- C) Niveau d'eau et direction de l'écoulement à la limite ouverte;

$$h(t) = \hat{h}(t) \quad \text{et} \quad u_T = 0 \quad \text{sur} \quad S_{\text{aval}}$$

Les conditions initiales sont nécessaires pour simuler les écoulements transitoires. On les exprime ainsi:

$$\begin{aligned} u(x, y, t_0) &= u_0(x, y) \quad , \quad v(x, y, t_0) = v_0(x, y) \\ h(x, y, t_0) &= h_0(x, y) \quad \text{et} \quad Q(x, y, t_0) = Q_0(x, y) \end{aligned}$$

Toutefois, lorsque l'écoulement varie peu dans le temps (état de quasi-stationnarité), on applique les conditions de régime permanent; cette approche ne nécessite pas de prise en compte spéciale des conditions initiales. Toutefois, elle requiert des techniques particulières pour atteindre rapidement l'état d'équilibre recherché.

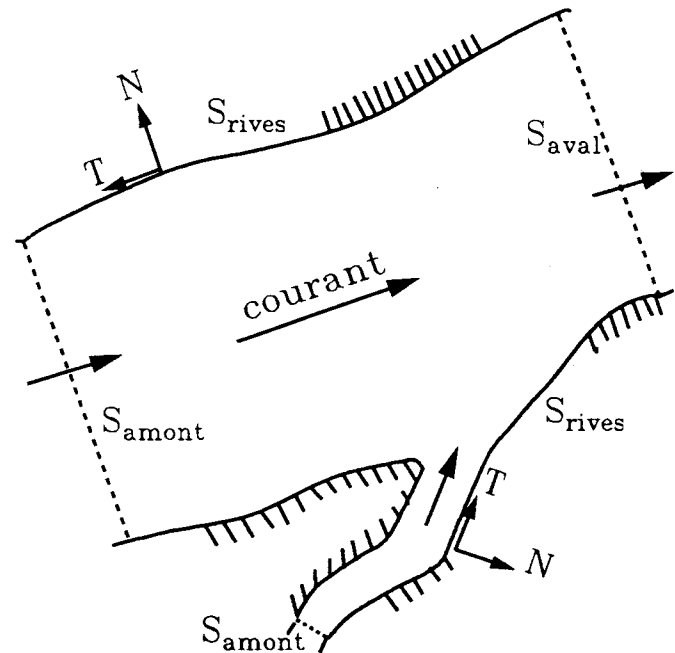


Figure 2.2.
Conventions des conditions aux limites

2.1.3 Discretisation

La discrétisation du domaine d'écoulement consiste à subdiviser celui-ci en cellules élémentaires sur lesquelles les équations précédentes sont appliquées et résolues. En pratique, cela revient à satisfaire les équilibres fondamentaux du mouvement à une échelle locale de la taille de la cellule.

La méthode des éléments finis et la méthode des différences finies sont les deux approches numériques qui permettent de discrétiser le modèle mathématique afin d'obtenir un système algébrique. La méthode des différences finies utilise généralement une grille à maille régulière. Par contre, les éléments finis ont une taille ajustable, déterminée localement en fonction de la géométrie du domaine et des besoins de précision. Cette caractéristique représente un avantage déterminant pour les études hydrodynamiques reliées à l'analyse de la propagation d'un soluté.

C'est cette approche qui est utilisée dans le modèle retenu pour la présente étude. L'interpolation nodale des variables et de la géométrie (bathymétrie) sur un élément est représentée à la figure 2.3. L'élément est un triangle à six noeuds; les vitesses sont interpolées quadratiquement tandis que la hauteur d'eau et la bathymétrie le sont linéairement. Le substrat et l'état des macrophytes sont des paramètres ou données constants sur l'élément. La variabilité spatiale de tous ces facteurs est déterminante dans la construction de la grille du modèle.



La figure 2.3 montre à titre d'exemple le maillage du tronçon Tracy - lac Saint-Pierre qui, à titre d'exemple, est développé pour répondre à des besoins accrus de précision dans la région amont.

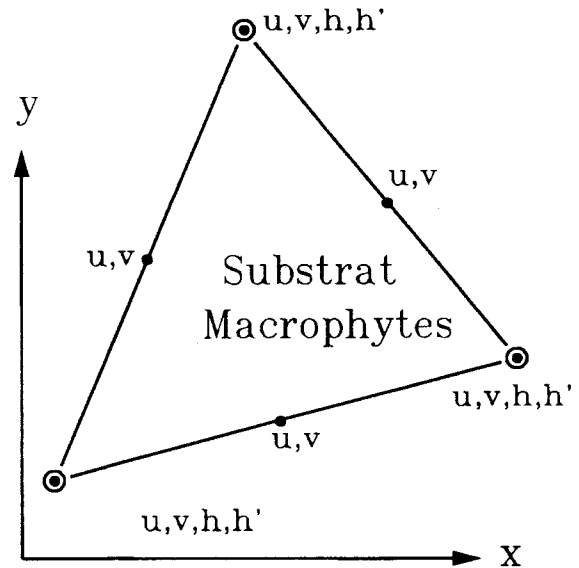


Figure 2.3.

Représentation des variables et données du modèle hydrodynamique avec l'élément T6

Par ailleurs, un modèle d'écoulement fluvial doit être de type couvrant-découvrant si la position du rivage varie significativement en fonction du débit (ou de la marée, dans la portion estuarienne). Dans ce genre de modèle, dont on trouve très peu d'exemples dans la bibliographie (Voir Herrling, 1982; Lynch et Gray, 1978, Kawahara et Umetsu, 1986), l'algorithme de calcul permet de déterminer la position de la frontière de l'écoulement dans le cours du processus de résolution.

Cette fonctionnalité est primordiale dans le fleuve Saint-Laurent à cause de la morphologie à faible pente des estrans et de la sensibilité de la frontière au débit et à la marée. L'algorithme de découvrage-recouvrement du modèle utilisé dans la présente étude est expliqué dans le volume 1 du premier rapport de cette série. Il a également été décrit dans Leclerc (1990b,c).

Les nombreuses études auxquelles nous avons participé jusqu'à maintenant nous ont permis d'évaluer à 10% la précision moyenne atteinte sur les vitesses d'écoulement. Cependant, seules les structures d'une échelle comparable à celle du modèle sont représentées. Les circulations d'une taille inférieure sont lissées par le modèle qui les considère comme de la dispersion de quantité de mouvement. L'adéquation des résultats est excellente quand on considère la précision intrinsèque des variables environnementales qui sont analysées à l'aide des champs de vitesse.

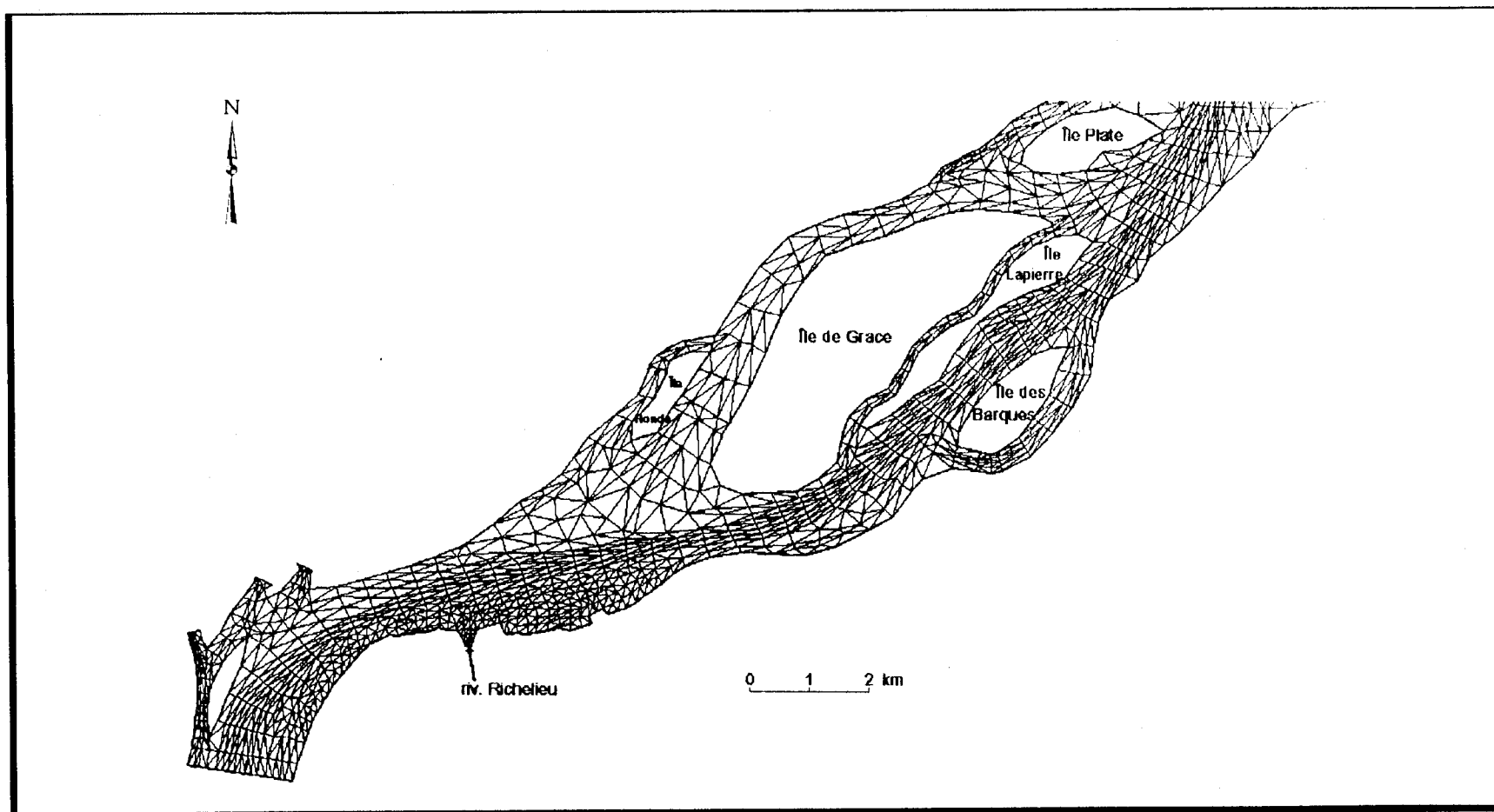


Figure 2.4. Discretisation par éléments finis du tronçon Tracy - lac Saint-Pierre (tiré du rapport #1, vol. #1 de cette série)



2.2 Modèle de propagation d'un soluté

En raison de la rareté d'une telle démonstration dans la bibliographie, nous avons jugé utile de dériver ici l'équation que permet de résoudre le programme PANACHE. Celle-ci décrit la propagation par transport, diffusion et dispersion d'un soluté dans un milieu récepteur peu profond. Partant de la forme tridimensionnelle (3D) locale et instantanée (la forme fondamentale), nous allons dériver la forme pondérée dans l'espace et le temps, puis, suite à une discussion sur la fermeture des termes turbulents, nous allons réduire cette forme à deux dimensions (2D) par une méthode d'intégration verticale.

2.2.1 Forme tridimensionnelle locale et instantanée

L'obtention de la forme fondamentale de l'équation de propagation de la masse d'un soluté dans un fluide découle de l'application d'un principe déterministe de conservation:

Le bilan des flux massiques d'un soluté entrant et sortant d'un volume élémentaire pendant un intervalle de temps est équilibré par le taux de variation de la masse résiduelle de soluté dans cet élément.

La figure 2.5 illustre certains flux à travers un volume élémentaire cubique de dimension infinitésimale.

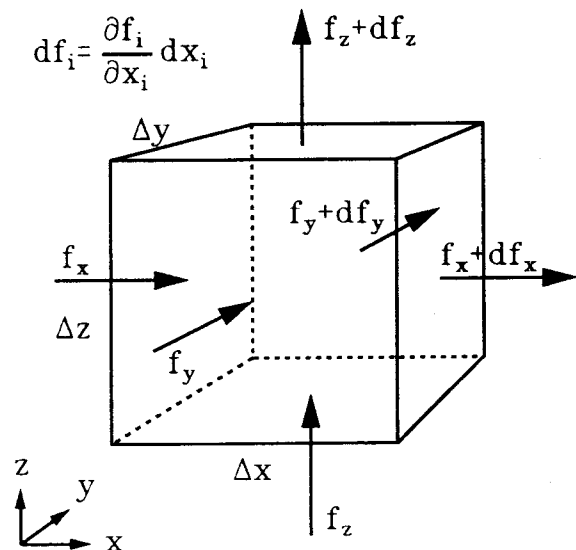


Figure 2.5.

Flux massiques au travers d'un volume élémentaire

Ce principe s'exprime mathématiquement ainsi:



$$\begin{aligned}
 \frac{DC}{Dt} dx dy dz = & f_x dy dz - \left(f_x + \frac{\partial f_x}{\partial x} dx \right) dy dz \\
 & + f_y dx dz - \left(f_y + \frac{\partial f_y}{\partial y} dy \right) dx dz \\
 & + f_z dx dy - \left(f_z + \frac{\partial f_z}{\partial z} dz \right) dx dy
 \end{aligned} \quad [2.7]$$

où

D/Dt : l'opérateur de dérivation totale;

f_i : les flux diffusifs de soluté à l'échelle moléculaire;

C : la concentration du soluté.

En simplifiant, on obtient:

$$\frac{DC}{Dt} = -\frac{\partial f_x}{\partial x} - \frac{\partial f_y}{\partial y} - \frac{\partial f_z}{\partial z} \quad [2.8]$$

Les flux diffusifs moléculaires sont habituellement représentés par une loi fickienne, i.e.:

$$f_i = -D_m \frac{\partial C}{\partial x_i}; \quad i = 1, 2, 3 \quad [2.9]$$

Le taux de variation (dérivée totale) de C contient les termes advectifs lesquels apparaissent suite à l'application de la règle de la dérivation en chaîne:

$$\frac{DC}{Dt} = \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial C}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial C}{\partial z} \frac{dz}{dt} \quad [2.10]$$

Et puisque:

$$u = \frac{dx}{dt} \quad v = \frac{dy}{dt} \quad w = \frac{dz}{dt} \quad [2.11]$$

où u , v et w sont les vitesses locales et instantanées, alors:



$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = D_m \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad [2.12]$$

En adoptant la convention d'Einstein¹ pour réduire la formule, on obtient:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_j \frac{\partial C}{\partial x_j} = D_m \frac{\partial^2 C}{\partial x_j^2} \quad j = 1, 2, 3 \quad [2.13]$$

On peut démontrer que cette expression est équivalente à:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial u_j C}{\partial x_j} = D_m \frac{\partial^2 C}{\partial x_j^2} \quad j = 1, 2, 3 \quad [2.14]$$

En effet, le terme de transport modifié $\partial u_j C / \partial x_j$ est formé de la somme du terme original et d'un autre terme exprimant la continuité ou la conservation de la masse au sein de l'écoulement (milieu incompressible):

$$\frac{\partial u_j C}{\partial x_j} = u_j \frac{\partial C}{\partial x_j} + C \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \right) \equiv u_j \frac{\partial C}{\partial x_j} \quad [2.15]$$

2.2.2 Pondération des variables: intégration temporelle

L'étape suivante consiste à appliquer le principe de Reynolds (1883) et d'intégrer l'équation de base sur un intervalle de temps suffisamment long pour éliminer les petites fluctuations des variables reliées à la turbulence.

Reynolds a proposé que les variables du problème soient représentées dans le temps par la somme d'une moyenne et d'une fluctuation aléatoire autour de cette valeur (figure 2.6). Cette hypothèse s'exprime mathématiquement comme suit:

$$\begin{aligned} u &= \bar{u} + u' \\ C &= \bar{C} + C' \end{aligned} \quad [2.16]$$

¹ Dans la convention d'Einstein, $i = 1, 2, 3$ produit trois expressions indépendantes tandis que $j = 1, 2, 3$ est interprété comme l'addition de trois termes dans la même expression.

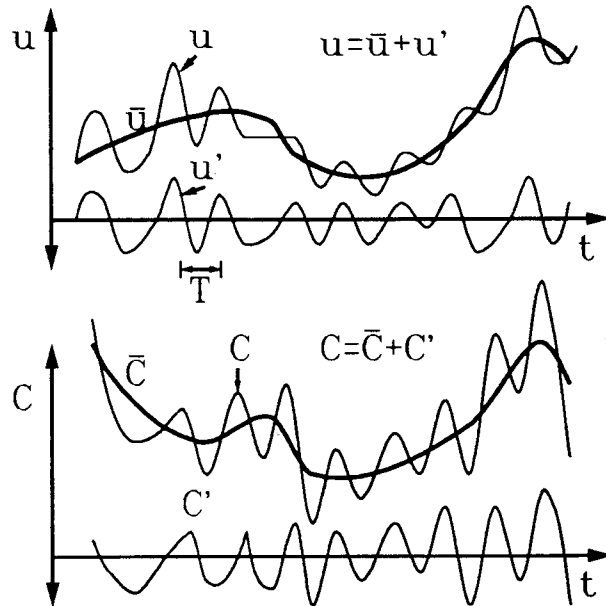


Figure 2.6.
Hypothèse de Reynolds

Lorsque des données expérimentales sont disponibles, la moyenne est obtenue par l'application d'un filtre sur une période finie. Ainsi, si α est la variable considérée:

$$\bar{\alpha} = \langle \alpha, f \rangle \equiv \int_T \alpha(t - \tau) f(\tau) d\tau \quad [2.17]$$

où:

- $f(\tau)$: une fonction de pondération;
- T : la période du filtre;
- τ : une référence de temps mobile;
- $\langle \alpha, f \rangle$: l'opérateur de filtrage.

La fonction de pondération a la propriété suivante:

$$\langle f \rangle = \int_T f(\tau) d\tau = 1,0$$

Les propriétés de l'opérateur sont les suivantes:



$$\langle a, f \rangle = a$$

$$\langle a\alpha, f \rangle = a \langle \alpha, f \rangle$$

$$\langle \alpha + \beta, f \rangle = \langle \alpha, f \rangle + \langle \beta, f \rangle$$

$$\left\langle \frac{\partial \alpha}{\partial x_j}, f \right\rangle = \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \alpha, f \rangle$$

a : une constante quelconque.

L'usage de ce filtre revient à ne retenir des mesures (ou à ne simuler) que les variations de période longue ($>T$) comme par exemple, les phénomènes reliés à la marée ou à l'évolution hydrologique horaire ou journalière. Les fluctuations de faible période sont englobées dans la notion générale de turbulence et sont prises en compte empiriquement dans les équations de conservation (masse, mouvement, soluté). Elles sont souvent considérées comme de l'énergie ou de la masse de soluté répercutées vers des échelles plus fines d'espace et de temps jusqu'au stade moléculaire ultime.

2.2.3 Equation aux valeurs pondérées

Lorsque soumise à l'opérateur $\langle \alpha, f \rangle$, l'équation du transport-diffusion est aisément convertie (du moins, les termes linéaires) en équation aux valeurs pondérées en utilisant les propriétés de celui-ci. En appliquant $\langle \alpha, f \rangle$ à l'équation de propagation du soluté, on retiendra que:

$$\alpha' = \alpha - \bar{\alpha} = \alpha - \langle \alpha, f \rangle$$

$$\langle \alpha', f \rangle = 0 \quad [2.18]$$

On obtiendra donc:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \left\langle \frac{\partial (\bar{u}_j + u_j') (\bar{C} + C')}{\partial x_j}, f \right\rangle = D_m \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x_j^2} \quad [2.19]$$

Le filtre doit être appliqué de façon particulière au terme de transport à cause de sa non-linéarité. Un à un, les termes deviennent:



$$\begin{aligned}
 < \frac{\partial \overline{u_j C}}{\partial x_j}, f > = \frac{\partial \overline{u_j C}}{\partial x_j} \\
 < \frac{\partial \overline{u_j C'}}{\partial x_j}, f > = 0 \\
 < \frac{\partial u_j' \overline{C}}{\partial x_j}, f > = 0 \\
 < \frac{\partial u_j' C'}{\partial x_j}, f > = \frac{\partial}{\partial x_j} < u_j' C', f > \quad [2.20]
 \end{aligned}$$

Subsistent donc de ce filtrage un terme semblable à l'expression originale du transport advectif et un terme en $< u_j' C', f >$ qui exprime le résidu covariant des fluctuations u' et C' . Ce terme représente la diffusion turbulente.

En pratique, la diffusion turbulente est représentée de la même façon que la diffusion moléculaire, c'est-à-dire, par une loi fickienne:

$$< u_j' C', f > = -D_j' \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_j} \quad [2.21]$$

où:

D_j' : un coefficient de diffusion turbulente établi empiriquement.

Contrairement au processus moléculaire qui est une propriété intrinsèque du fluide, la diffusion turbulente est une propriété de l'écoulement et doit être considérée comme anisotrope et variable dans l'espace et le temps si l'écoulement est transitoire et non-uniforme. Par ailleurs, dans un écoulement à prédominance turbulente, les processus moléculaires sont intégrés dans l'échelle turbulente ainsi:

$$D_{Tj} = D_j' + D_m \quad [2.22]$$

Finalement, on revient à une expression semblable à celle du départ [2.14] mais dans laquelle les valeurs instantanées sont remplacées par des valeurs moyennes (valeurs pondérées sur T). Le terme diffusif a changé quelque peu à cause de l'hétérogénéité du coefficient D_{Tj} .



$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_j \bar{C}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} D_{Tj} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_j} \quad j = 1, 2, 3 \quad [2.23]$$

A compter de maintenant, la notation de la moyenne $(\bar{u}, \bar{C})$ sera abandonnée pour alléger les expressions, i.e.:

$$u \equiv \bar{u}; \quad C \equiv \bar{C}$$

et

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial u_j C}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} D_{Tj} \frac{\partial C}{\partial x_j} \quad j = 1, 2, 3 \quad [2.24]$$

2.2.4 Méthode d'intégration verticale

Dans les milieux peu profonds tels les rivières, les fleuves et les estuaires supérieurs, la colonne d'eau est considérée comme bien mélangée ce qui justifie l'intégration verticale des équations de mouvement et de continuité (le modèle hydrodynamique utilisé pour cette étude appartient, on l'a vu, à cette catégorie) de même que l'intégration de l'équation de propagation d'un soluté. Il en résulte un modèle bidimensionnel (2D) horizontal. Suite à cette opération, les variables ne seront plus considérées comme des fonctions de la coordonnée verticale z , i.e.:

$$u_j(z) = cte; \quad j = 1, 2 \quad \text{et} \quad C(z) = cte$$

Pour procéder à l'intégration verticale, il est d'abord nécessaire de se rappeler le théorème de Leibniz qui stipule que:

$$\int_a^b \frac{\partial \alpha}{\partial x_j} d\xi = \frac{\partial}{\partial x_j} \int_a^b \alpha d\xi - \alpha(b) \frac{\partial b}{\partial x_j} + \alpha(a) \frac{\partial a}{\partial x_j} \quad [2.25]$$

Quand $\xi = x_3 \equiv z$

$$\int_a^b \frac{\partial \alpha}{\partial z} dz = \alpha(b) - \alpha(a) \quad [2.26]$$

Pour procéder à l'intégration verticale de l'équation de propagation d'un soluté, posons comme notation que (symboles de la figure 2.7):



$$\langle \rangle \equiv \int_{-h'}^h dz \quad [2.27]$$

2.2.5 Modèle bidimensionnel (2D) horizontal

Procédons terme à terme à l'intégration verticale de [2.23] avec [2.25], [2.26] et [2.27].

$$\langle \frac{\partial C}{\partial t} \rangle \equiv \int_{-h'}^h \frac{\partial C}{\partial t} dz = \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} - C(h) \frac{\partial h}{\partial t} + C(-h') \frac{\partial(-h')}{\partial t} \quad [2.28]$$

$$\langle \frac{\partial u_j C}{\partial x_j} \rangle = \frac{\partial \langle u_j C \rangle}{\partial x_j} - u_j(h) C(h) \frac{\partial h}{\partial x_j} + u_j(-h') C(-h') \frac{\partial(-h')}{\partial x_j} \quad [2.28b]$$

$$\langle \frac{\partial w C}{\partial z} \rangle = w(h) C(h) - w(-h') C(-h') \quad [2.28c]$$

$$\langle \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_{Tj} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) \rangle = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_{Tj} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \left(D_{Tj} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right)_h \frac{\partial h}{\partial x_j} + \left(D_{Tj} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right)_{-h'} \frac{\partial(-h')}{\partial x_j} \quad [2.28d]$$

$$\langle \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{Tz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) \rangle = \left(D_{Tz} \frac{\partial C}{\partial z} \right)_h - \left(D_{Tz} \frac{\partial C}{\partial z} \right)_{-h'} ; \quad j = 1, 2 \quad [2.28e]$$

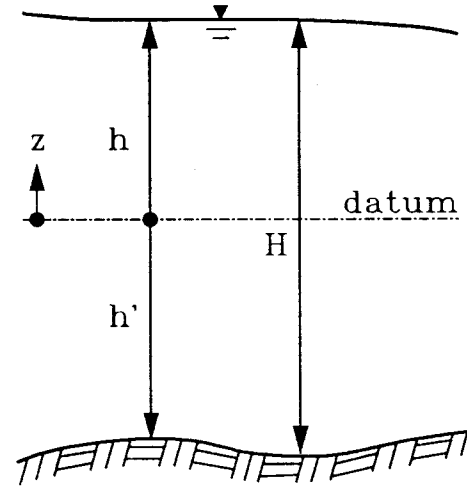


Figure 2.7. Conventions verticales



L'introduction de la condition cinématique de la surface libre et de la vitesse verticale au fond permet de simplifier ces expressions. En effet:

$$w(h)C(h) = \left(\frac{\partial h}{\partial t} + u_j(h) \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) C(h); \quad j = 1, 2 \quad [2.29]$$

$$w(-h')C(-h') = \left(\frac{\partial(-h')}{\partial t} + u_j(-h') \frac{\partial(-h')}{\partial x_j} \right) C(-h') \quad [2.30]$$

La sommation de [2.28 a, b, c, d et e], de [2.29] et [2.30] d'une part, ainsi que l'introduction de conditions de diffusion turbulente nulles aux limites supérieure et inférieure d'autre part, donnent finalement:

$$\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} + \frac{\partial \langle u_j C \rangle}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\langle D_{Tj} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right\rangle; \quad j = 1, 2 \quad [2.31]$$

Comme avec l'hypothèse de Reynolds, les profils verticaux de vitesse et de concentration sont représentés comme la somme d'une valeur moyenne et d'un écart de moyenne nulle (Robert, 1983), soit (figure 2.8):

$$u(z) = \bar{u}(1 + \varepsilon_u(z)) \quad \text{et} \quad C(z) = \bar{C}(1 + \varepsilon_C(z)) \quad [2.32]$$

Avec:

$$\langle \varepsilon_i \rangle \equiv \int_{-h'}^h \varepsilon_i(z) dz = 0 \quad [2.33]$$

Ainsi,

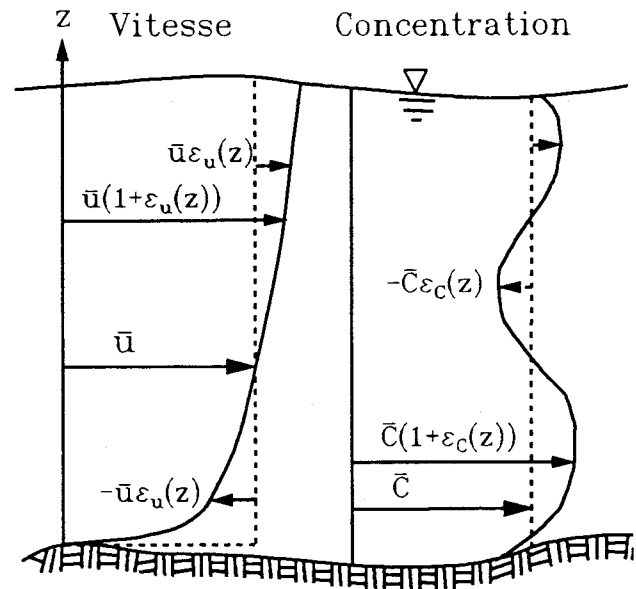
$$\langle C \rangle = H\bar{C} \quad \text{et} \quad \langle u_j C \rangle = \bar{u}_j \bar{C} (H + \langle \varepsilon_u \varepsilon_C \rangle) \quad [2.33]$$

En posant que:

$$\left\langle D_{Tj} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right\rangle \approx H D_{Tj} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_j} \quad [2.34]$$



Figure 2.8.
Représentation théorique des profils
verticaux de vitesse et de concentration



Avec [2.32], [2.33] et [2.34], l'équation [2.31] devient:

$$\frac{\partial H\bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial H\bar{u}_j\bar{C}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{u}_j\bar{C} \langle \varepsilon_u \varepsilon_c \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(HD_{\tau_j} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_j} \right) \quad [2.35]$$

Comme pour la pondération des équations instantanées, on retrouve une covariance résiduelle non-nulle, i.e., $\langle \varepsilon_u \varepsilon_c \rangle \neq 0$

De nouveau, le modèle est fermé à l'aide d'une expression fickienne comme suit:

$$-\bar{u}_j\bar{C} \langle \varepsilon_u \varepsilon_c \rangle = HD_j \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_j} \quad [2.36]$$

Le paramètre D_j qui apparaît dans la dernière relation est défini comme un *coefficient de dispersion horizontale*.

La notion de dispersion permet de traduire sous la forme d'un processus diffusif des mouvements cohérents d'échelle intermédiaire qui ne peuvent être simulés directement à cause de la forme réduite du modèle. C'est le cas ici du profil vertical de vitesse qui est négligé dans la transformation à deux dimensions du modèle tridimensionnel.



De la même façon, lorsque le modèle bidimensionnel est amené à une seule dimension (ce qui n'est pas notre cas), les variations du champ de vitesse dans la direction transversale à l'écoulement sont ignorés dans la formulation et ces mouvements sont pris en compte par de la diffusion longitudinale. On peut considérer qu'à chaque fois qu'une dimension spatiale est sacrifiée dans le traitement de l'hydrodynamique, la diffusion prend le relais de la convection et on appelle *dispersion* ce processus. Le coefficient qui représente empiriquement le phénomène s'accroît à chaque fois d'un ordre de grandeur. Ainsi, McDowell et O'Connor (1977) proposent les ordres de grandeur suivants pour différentes échelles d'intégration des modèles de transport-diffusion.

Tableau 2.1. Valeurs typiques de diffusivité à diverses échelles

PARAMETRE	Valeur typique [m ² /s]
Diffusion moléculaire	10 ⁻³ - 10 ⁻²
Diffusion turbulente	10 ⁻² - 10 ⁻¹
Dispersion longitudinale	1 - 10

En réduisant de nouveau la notation de la moyenne, on obtient donc la forme classique de l'équation bidimensionnelle de propagation moyenne d'un soluté dans le plan horizontal. C'est dans cette forme que le modèle permet une approche de résolution par la méthode de la "marche au hasard".

$$\frac{\partial HC}{\partial t} + \frac{\partial HC u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(HD_j \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) \quad [2.37]$$

2.2.6 Conditions initiales et aux limites

Les conditions initiales sont habituellement représentées ainsi:

$$C(x, y, t_0) = C_0(x, y)$$

Les conditions aux limites peuvent être de type (figure 2.9):

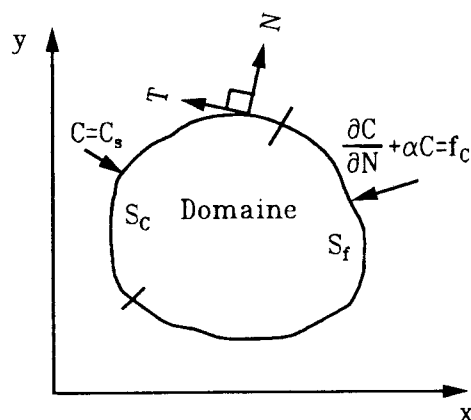


Figure 2.9. Conditions aux limites
(adapté de Dhatt et Touzot, 1981)

- Dirichlet (condition sur C):

$$C = C_s \quad \text{sur} \quad S_c$$

- Cauchy-Neumann (condition de flux):

$$\frac{\partial C}{\partial N} + \alpha C = f_c \quad \text{sur} \quad S_c$$

$$\alpha \neq 0 \rightarrow \text{Cauchy}$$

$$\alpha = 0 \rightarrow \text{Neumann}$$

2.2.7 Méthode de résolution

Approches eulériennes - vs - lagrangiennes. Deux grandes classes de méthodes de résolution existent pour résoudre ce modèle numériquement: eulérienne et lagrangienne. L'approche eulérienne consiste à résoudre l'équation différentielle dans l'espace de la variable d'état du modèle (calcul direct de la concentration). La méthode lagrangienne fournit une solution indirecte à travers l'espace des déplacements (ex: particules); la concentration est obtenue par post-traitement.

Les équations différentielles de mouvement (section 2.1: Modèle hydrodynamique bidimensionnel) qui sont de type parabolique peuvent être aisément résolues par une des méthodes numériques eulériennes de différences finies ou d'éléments finis. Pour ce modèle, notre choix s'est porté, on



l'a vu, sur la méthode de résolution par éléments finis à cause principalement de sa souplesse dans le traitement de la géométrie du domaine d'écoulement. En effet, cette forme de discrétisation permet d'ajuster localement la précision du modèle.

A l'opposé, l'équation différentielle du transport d'un soluté devient hyperbolique sous des conditions d'advection pure (nombre de Peclet élevé) et sa résolution eulérienne par les méthodes des différences finies ou des éléments finis engendre des problèmes de dispersion numérique parasite relativement difficiles à contrôler (Rodi, 1980). Des schémas numériques d'ordre supérieur, la méthode des caractéristiques, une pondération des équations ajustée en fonction de la direction du courant (Taylor-Galerkin), ou encore une discrétisation locale plus raffinée permettent d'améliorer le résultat de la modélisation sans toutefois en assurer la justesse et la consistance.

Afin d'éviter ces problèmes, de nombreux auteurs (Tompson et Gelhar, 1990; Tompson et Dougherty, 1988; Kinzelbach, 1987; Ahlstrom et Foote, 1976) ont montré que la solution de l'équation du transport pour des solutés non réactifs peut être obtenue par la méthode lagrangienne de marche au hasard basée sur l'analyse du mouvement numérique de particules.

Connu également sous le nom de méthode de "déplacement aléatoire de particules de référence", ce procédé de calcul considère la dispersion dans un milieu continu comme un phénomène aléatoire. Le déplacement d'une particule de référence peut donc être décrit par deux mouvements indépendants. Le premier résulte de l'advection contrôlée par la vitesse moyenne de l'écoulement. Le second est généré par la dispersion des particules autour de leur position moyenne, mouvement aléatoire résultant de la turbulence au sein de l'écoulement.

La méthode de marche au hasard est, en un sens, une formule mixte eulérienne-lagrangienne. En effet, les vitesses, les niveaux d'eau et les profondeurs sont obtenues directement dans leur propre espace de variable alors que les concentrations nécessitent le calcul du déplacement de particules. La méthode est également mixte quand on considère le traitement déterministe du transport et aléatoire de la dispersion.

Pour le calcul des concentrations, cette technique présente sur les méthodes numériques eulériennes (différences finies et éléments finis) les principaux avantages suivants (Prickett et coll., 1981; Kinzelbach, 1987):

- 1) la masse de soluté est conservée intégralement;



-
- 2) la dispersion numérique parasite est absente dans la résolution de l'équation du transport y compris dans les cas de forte anisotropie du milieu ou de nombre de Peclet élevé (advection dominante);
 - 3) la mobilisation du modèle est rapide et ne requiert pas d'effort particulier de raffinement local du maillage;
 - 4) le mouvement des particules est continu dans l'espace ce qui permet le suivi et le traçage de la contamination;
 - 5) les solutions sont additives;
 - 6) le temps de calcul sur ordinateur peut être considérablement réduit;

Deux autres avantages importants sont offerts par la méthode:

- 1) certains attributs particuliers des particules peuvent être conservés comme résultats (leur âge, par exemple) et servir éventuellement à introduire d'autres formes de dynamiques;
- 2) les résultats se traitent facilement et rapidement par les méthodes infographiques.

Cependant, si des précautions ne sont pas prises lors de l'application, certains inconvénients peuvent se manifester:

- 1) les particules de masse étant des entités spatiales finies, le passage de ces masses en concentrations peut engendrer une fluctuation grossière des concentrations résultantes, de même qu'une dispersion parasite du même type que celle qu'on cherchait à éviter dans l'approche eulérienne;
- 2) des concentrations plus grandes que celles des conditions aux limites (à l'injection) peuvent apparaître, surtout quand une discrétisation spatiale non-appropriée est utilisée pour convertir les masses en concentrations;
- 3) dans certains cas, la méthode nécessite un nombre élevé de particules pour l'obtention d'une solution acceptable.

Ces inconvénients peuvent cependant être résolus relativement aisément en respectant certaines règles d'application, règles qui seront édictées dans la suite de ce rapport.



Diverses expériences pratiques. Compte tenu de ses avantages sur les approches eulériennes, la méthode de marche au hasard est de plus en plus utilisée pour la résolution numérique des équations différentielles de type hyperbolique. C'est surtout dans le domaine du transport des solutés dans les eaux souterraines que l'on rencontre son application, et les modèles développés y sont nombreux (Walton, 1989; Konikow et Bredehoeft, 1978; Kinzelbach, 1988; Bear et Verruijt, 1987; Prickett et coll., 1981; Schwartz et Crowe, 1980).

Dans le domaine des eaux de surface, l'application de cette méthode a été jusqu'à présent limitée à quelques cas spécifiques, dont Van Dam (1981) et Dykes et Robertson (1985) pour le milieu marin et Heemink (1990) en estuaire.

Enfin, un avantage non-négligeable est fourni par la versatilité de la méthode. Ceci tient au fait que chaque particule est un modèle en soi qui peut être contrôlé individuellement. Le modèle appliqué aux particules peut être modifié de manière à prendre en compte des mécanismes de dégradation, d'adsorption-désorption, de sédimentation, d'évaporation et même d'étalement en surface (huiles). Ainsi, cette méthode a déjà été utilisée par certains auteurs (Andricevic et Fouloula-Georgiou, 1990, Thompson et Dougherty (1988), Konikow et Bredehoeft, 1978, Dougherty et coll., 1989) pour simuler le transport des solutés réactifs (adsorption) et non-conservatifs (dégradation). On compte également de nombreuses applications dans le domaine du suivi de nappes flottantes d'hydrocarbures déversées accidentellement dans le milieu (ex: Sydor, 1978; Mackay et Paterson, 1978).

L'équation de Fokker-Planck. L'équation 2.37 ne peut être soumise telle quelle à une résolution lagrangienne. Des transformations mineures sont nécessaires pour l'emmener sous la forme de l'équation de Fokker-Planck, laquelle admet une solution par la méthode de marche au hasard. En posant $P = CH$, l'équation [2.37] devient:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial u_j P}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_j H \frac{\partial (P/H)}{\partial x_j} \right) ; \quad j = 1, 2$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial u_j P}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_j H \left[\frac{H \partial P / \partial x_j - P \partial H / \partial x_j}{H^2} \right] \right)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial u_j P}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{D_j}{H} \left[H \frac{\partial P}{\partial x_j} - P \frac{\partial H}{\partial x_j} \right] \right)$$



$$\begin{aligned}\frac{\partial P}{\partial t} &= -\frac{\partial u_j P}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_j \frac{\partial P}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{D_j P}{H} \frac{\partial H}{\partial x_j} \right) \\ \frac{\partial P}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x_j} \left[P \left(u_j + \frac{D_j}{H} \frac{\partial H}{\partial x_j} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_j \frac{\partial P}{\partial x_j} \right)\end{aligned}\quad [2.38]$$

Puisque:

$$\frac{\partial^2 (D_j P)}{\partial x_j^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[P \frac{\partial D_j}{\partial x_j} + D_j \frac{\partial P}{\partial x_j} \right]$$

Soit:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[D_j \frac{\partial P}{\partial x_j} \right] = \frac{\partial^2 (D_j P)}{\partial x_j^2} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[P \frac{\partial D_j}{\partial x_j} \right]$$

que l'on substitue dans [2.38] qui devient:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left[P \left(u_j + \frac{D_j}{H} \frac{\partial H}{\partial x_j} \right) \right] + \frac{\partial^2 (D_j P)}{\partial x_j^2} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(P \frac{\partial D_j}{\partial x_j} \right)$$

soit finalement

$$\boxed{\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left[P \left(u_j + \frac{D_j}{H} \frac{\partial H}{\partial x_j} + \frac{\partial D_j}{\partial x_j} \right) \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} (2D_j P)} \quad [2.39]$$

L'équation [2.39] obtenue a une forme identique à l'équation de Fokker-Planck (Jazwinski, 1970) qui représente en deux dimensions la probabilité de fonction $p(x,y,t)$, $t > t_0$ avec les conditions initiales:

$$p(x, y, t_0) = \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \quad [2.40]$$

Solution par la marche au hasard. Il a été démontré que l'équation de Fokker-Planck admet une solution construite avec les équations stochastiques différentielles de Itô suivantes (Heemink, 1990):

$$dx_t = \left[u + \frac{1}{H} \left(\frac{\partial H}{\partial x} D_x \right) + \frac{\partial D_x}{\partial x} \right] dt + \sqrt{2D_x} d\alpha_t \quad [2.41]$$



$$dy_t = \left[u + \frac{1}{H} \left(\frac{\partial H}{\partial y} D_y \right) + \frac{\partial D_y}{\partial y} \right] dt + \sqrt{2D_y} d\beta_t \quad [2.42]$$

où:

$$w_t = \langle \alpha_t \quad \beta_t \rangle^T$$

est un processus aléatoire brownien tel que:

$$E[\{dw_t\} \langle dw_t, \rangle] = [I]dt$$

E : l'espérance mathématique;

$[I]$: la matrice identité;

$\{ \}$: un vecteur-colonne;

$\langle \rangle$: un vecteur-ligne; $\langle \rangle^T \equiv \{ \}$;

$[]$: une matrice.

Les équations précédentes [2.41] et [2.42] permettent donc la résolution de l'équation différentielle du transport [2.39].

Cas simplifié: l'écoulement uniforme. Lorsque le milieu est uniforme, on a:

$$\frac{\partial H}{\partial x_i} \approx 0$$

$$\frac{\partial D_i}{\partial x_i} \approx 0$$

Les équations précédentes [2.41] et [2.42] se simplifient alors ainsi:

$$dx_t = u dt + \sqrt{2D_x} d\alpha_t \quad [2.43]$$

$$dy_t = u dt + \sqrt{2D_y} d\beta_t \quad [2.44]$$

Kinzelbach et Ackerer (1986) de même que Uffink (1987) ont démontré que le terme tenant compte du gradient de dispersion est nécessaire, d'un point de vue physique, pour éviter l'accumulation des particules dans des zones de faible dispersion (diffusion pure), à côté des frontières ou dans des culs-de-sac qui résulteraient de l'utilisation des équations restreintes [2.43] et [2.44].



De même, Heemink (1990) a montré que le terme tenant compte du gradient de hauteur est nécessaire pour les zones de faible hauteur d'eau.

L'erreur statistique introduite par un nombre fini de particules peut être approchée en utilisant la distribution de Poisson avec n comme probabilité que k particules soient localisées dans une surface donnée, n étant le nombre de particules trouvées dans cette surface après simulation.

Quoique d'après Prickett et coll. (1981), une solution exacte demande théoriquement un nombre élevé de particules (d'ordre moléculaire), des expériences pratiques ont montré qu'un nombre relativement limité de particules est suffisant pour le calcul du transport. Ainsi, au moins 25 particules par maille semble suffisant lorsque le calcul des concentrations est effectué sur des mailles de grandeur fixe. Notre approche est différente à cet égard comme le montrerons les prochains chapitres.

2.2.8 Choix des paramètres

L'application du modèle nécessite un choix judicieux des paramètres de diffusivité. On a que la dispersion transversale ainsi que la diffusion turbulente sont des propriétés de l'écoulement et du degré d'agrégation des processus dans la représentation mathématique.

En pratique, dans les modèles bidimensionnels, deux processus majeurs de mélange d'un soluté dans un milieu récepteur sont considérés (figure 2.10):

- la contrainte turbulente associée à l'interaction entre l'écoulement et le lit du cours d'eau;
- les instabilités horizontales produites par les variations du champ de vitesse dans le plan et à l'interface entre deux masses d'eau d'inertie différente. Ces dernières sont produites par les cisaillements et les compressions turbulentes.

Nous allons exposer dans ce qui suit comment ces processus seront pris en considération tout en tenant compte de leur degré d'hétérogénéité et d'anisotropie.

Après avoir introduit le concept dit "à zéro-équation" de longueur de mélange utilisé pour prendre en compte la turbulence des écoulements, nous allons montrer comment cette notion est utilisée pour le calcul du mélange d'un soluté. Par la suite, nous considérerons plus précisément le choix des paramètres et leur évaluation en pratique.

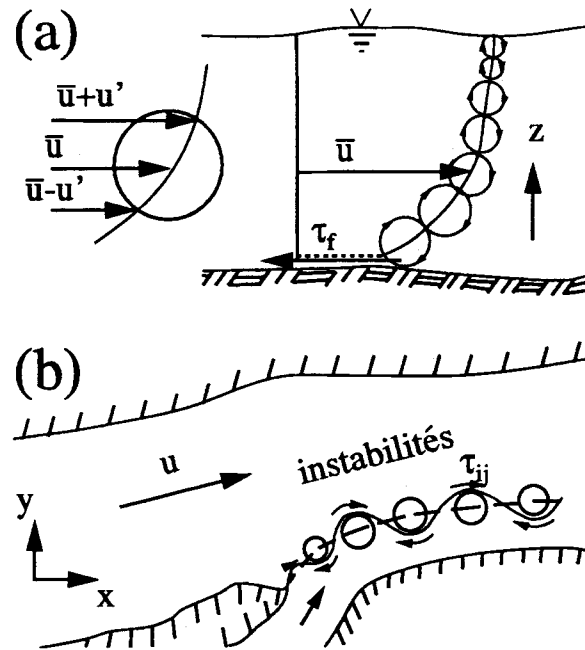


Figure 2.10.
Contraintes turbulentes dans
un écoulement

Concept de longueur de mélange. Dans les écoulements où la turbulence est principalement produite par la rugosité du fond, la théorie de la longueur de mélange permet de décrire l'écoulement de manière relativement satisfaisante. Selon Prantl (1925),

$$\frac{\tau_{xz}'}{\rho} = -\overline{u'w'} = D_T \frac{\partial \bar{u}}{\partial z}$$

où:

D_T : un coefficient de diffusion turbulente;

ρ : la masse spécifique de l'eau;

τ_{xz}' : une contrainte tangentielle selon x produite par les fluctuations de vitesse selon z.

Conformément à la définition classique, le concept de longueur de mélange l_m est présenté ainsi par Rodi, 1980:

"Quand une cellule fluide se déplaçant à une vitesse moyenne initiale est déplacée de Δx_T par un mouvement turbulent dans la direction transversale, sa vitesse en ce nouveau point différera des vitesses

moyennes immédiatement environnantes par Δu . La distance Δx_T à laquelle Δu est égal à la fluctuation moyenne transversale de la vitesse est la longueur de mélange."

Schlichting (1979) et Dhatt et coll. (1985) présentent la démarche de Prantl résumée ici. La moyenne des fluctuations selon x est évaluée ainsi:

$$|\overline{u'}| = \delta \left| \frac{\partial \overline{u}}{\partial z} \right|$$

$$|\overline{w'}| = c_1 |\overline{u'}| = c_1 \delta \left| \frac{\partial \overline{u}}{\partial z} \right|$$

où:

δ : une distance caractéristique de la turbulence;

c_1 : une constante de l'ordre de 1;

$|\overline{u'}|$: la moyenne des valeurs absolues des fluctuations.

Selon Schlichting (1979), la covariance $\overline{u'w'}$ est différente de zéro et négative:

$$\overline{u'w'} = -c_2 |\overline{u'}| \cdot |\overline{w'}|$$

où:

c_2 : une constante du type "coefficient de corrélation".

Alors:

$$\frac{\tau_{xz}'}{\rho} = -\overline{u'w'} = c_1 c_2 \delta^2 \left(\frac{\partial \overline{u}}{\partial z} \right)^2 = l_m^2 \left| \frac{\partial \overline{u}}{\partial z} \right| \cdot \frac{\partial \overline{u}}{\partial z} \quad [2.45]$$

La longueur de mélange intègre donc les coefficients c_1 et c_2 et la notation $||$ permet de spécifier le signe de la contrainte.

Le concept de viscosité cinématique turbulente est ainsi défini:



$$\frac{\tau_{xz}'}{\rho} = \nu_T \cdot \frac{\partial \bar{u}}{\partial z}$$

avec:

$$\nu_T = l_m^2 \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right|$$

Dans le plan horizontal, la viscosité turbulente cinématique de type "longueur de mélange" est définie de manière analogue (Rodi, 1980) en supposant les variations verticales négligeables (et i , contrairement à la notation d'Einstein, jouant le même rôle que j) :

$$\nu_{TH} = l_m^2 \sqrt{\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \cdot \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)} ; \quad i = 1,2 \quad \text{et} \quad j = 1,2 \quad [2.46]$$

$$= l_m^2 \sqrt{2 \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \cdot \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2} \quad [2.47]$$

On constate que l'opérateur de calcul donne un résultat isotrope mais variable dans l'espace en fonction du champ de vitesse. Un degré d'anisotropie peut être introduit dans l'opérateur en choisissant une longueur de mélange variable selon la direction, longitudinale ou transversale, du courant.

Longueur de mélange et dispersion d'un soluté. Développé originellement pour décrire le mouvement, le concept de longueur de mélange a été appliqué aux covariances $-\overline{u_i' C'}$ décrivant le mélange turbulent d'un soluté (Rodi, 1980). La dépendance entre les deux coefficients serait linéaire.

$$f_i' = -\overline{u_i' C'} = \frac{\nu_T}{\sigma_T} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i} \quad [2.48]$$

f_i' : un flux diffusif turbulent;

σ_T : le nombre de Schmidt applicable au transport d'espèces en solution.

Estimation de la diffusivité de fond: D_{f-} La rugosité du lit retarde l'écoulement près du fond et produit un profil vertical de vitesse de type logarithmique:



$$u(z) = \bar{u} + \left(\frac{u_*}{\kappa} \right) \left[1 + \ln \left(\frac{z+H}{H} \right) \right]$$

où:

z : la dimension verticale, positive vers le haut et nulle à la surface de l'eau;

u_* : la vitesse dite "de cisaillement";

κ : le nombre de Prantl (environ 0,4).

L'utilisation de ce profil lors de l'intégration verticale donne une viscosité turbulente cinématique égale à (Fischer et coll., 1979):

$$\bar{v}_T = 0,067 H u_* = 0,067 H \sqrt{\frac{|\tau_f|}{\rho}}$$

$|\tau_f|$: le module de la contrainte de cisaillement sur le fond;

ρ : la masse spécifique de l'eau.

On voit qu'en plus de la vitesse de cisaillement, la profondeur est une dimension caractéristique importante de la turbulence verticale. Cette turbulence générée par le fond se transpose dans le plan pour donner un mélange horizontal. Cet aspect particulier a fait l'objet de nombreuses recherches empiriques. Ayant souvent comme objet des écoulements quasi-uniformes en canal, ces travaux ont permis d'identifier la relation suivante (2.49) entre un coefficient de diffusivité de fond D_f et le cisaillement au bas de la couche limite turbulente de tels milieux. Le tableau 2.2 résume les données de ces essais empiriques.

$$D_f = K H u_* \quad [2.49]$$

où:

K : une constante entre 0,135 et 0,17.

Cette relation est souvent appelée "formule de Taylor".

La contrainte de cisaillement du fond, rappelons-le, se calcule comme suit: (relations [2.4] et [2.5]; voir la section 2.1.1: Modèle hydrodynamique, Equations de conservation).

$$|\tau_f| = \frac{\rho g n^2 |\bar{V}|^2}{H^{1/3}} \quad [2.50]$$



g : l'accélération gravitationnelle;

n : le coefficient de Manning.

Ce paramètre peut être évalué directement à la sortie des résultats du modèle hydrodynamique. Etant donné que ce modèle est discrétisé (méthode des éléments finis), le coefficient peut être fourni sous la forme d'un champ ou comme valeur nodale.

$$D_f(x, y) = 0,15\sqrt{g} H(x, y)^{5/6} n(x, y) |V(x, y)| \quad [2.51]$$

Diffusivité turbulente transversale: $D_{N\perp}$ Dans un cours d'eau naturel, la dispersion transversale (indice N pour normal à l'écoulement dans le repère local de celui-ci) associée aux contraintes de cisaillement latérales est globalement proportionnelle elle aussi à la contrainte de fond mais avec des écarts nettement plus considérables dûs à l'ampleur des gradients de vitesse produits par les singularités et la morphologie transversale du lit. Dans les cours d'eau légèrement méandrés et de section normale, la valeur du coefficient D (qui incorpore la diffusivité de fond) varierait ainsi selon Fischer et coll. (1979):

$$D = (0,6 \pm 50\%)Hu_* \quad [2.52]$$

Cette relation a été obtenue et confirmée par de nombreuses recherches empiriques comme le montre le tableau 2.3. Le coefficient multiplicateur peut prendre des valeurs nettement plus considérables lorsque le milieu présente des singularités plus importantes comme en témoignent les résultats de Yotsukura et Sayre (1976) et Sayre et Yeh (1973). Leurs expériences ont donné un coefficient multiplicateur de 3,4.

Les singularités plus importantes comme les jets, les confluences de cours d'eau, les structures de génie ou les méandres accentués produisent des circulations secondaires fortement génératrices de turbulence et une manière pratique d'en tenir compte est d'introduire dans le calcul du coefficient de dispersion les éléments de base de la déformation angulaire (gradients de vitesse) des masses d'eau de même que les longueurs caractéristiques des processus. La notion de longueur de mélange permet justement de construire un bon indicateur des processus de mélange.



Tableau 2.2. Mesures du mélange transversal dans des canaux rectangulaires à côtés lisses (extrait de Fischer et coll., 1979)

REFERENCE	Type de canal	Type de rugosité de fond	Largeur moyenne W : (cm)	Profondeur moyenne H : (cm)	Vitesse moyenne $ V $: (cm/s)	Vitesse de cisaillement u_* : (cm/s)	Coefficient de dispersion D_f : (cm ² /s)	$\frac{D_f}{Hu_*}$
Elder (1959)	Laboratoire	Lisse	36	1.2	21.6	1.59	-	0.16
Sayre and Chang (1968)	Laboratoire	Taquets de bois	283	14.8-37.1	23.5-37.1	3.81-6.04	9.6-36.9	0.160-0.179
Sullivan (1968)	Laboratoire	Lisse	76	7.3-10.2	15.3-22.9	0.83-1.29	0.90-1.18	0.107-0.13
Okoye (1970)	Laboratoire	Lisse	85	1.5-17.3	27.1-42.8	1.6-2.2	0.64-2.9	0.09-0.20
Okoye (1970)	Laboratoire	Lisse	110	1.7-22.0	30.0-50.4	1.4-2.6	0.79-3.3	0.11-0.24
Okoye (1970)	Laboratoire	Pierres	110	6.8-17.1	35.3-42.8	3.6-5.2	4.8-7.5	0.11-0.14
Prych (1970)	Laboratoire	Lisse	110	4.0-11.1	35.4-46.0	1.9-2.0	1.1-3.6	0.14-0.16
Prych (1970)	Laboratoire	Lattes de métal	110	3.9-6.4	37.3-45.9	3.7-4.0	2.0-3.5	0.14
Miller and Richardson (1974)	Laboratoire	Blocs rectangulaires	59.7	12.5-13.2	30.5-81.4	3.0-16.3	3.7-36.3	0.10-0.18
Lau and Krishnappan (1977)	Laboratoire	Lisse	60	3.9-5.0	15.5-33.7	0.9-2.0	0.74-1.4	0.16-0.20
		Sable 0.4 mm	45-60	1.4-4.0	19.7-20.3	1.6-2.1	0.34-0.88	0.11-0.14
		Sable 2.0 mm	30	1.6-3.4	20.0-20.4	1.9-2.4	0.74-0.92	0.14-0.20
		Sable 2.7 mm	45-60	1.3-3.9	19.5-20.4	1.8-2.8	0.59-1.16	0.13-0.26
Fischer (1967b)	Canal d'irrigation	Dunes de sable	1830	66.7-68.3	63-66	6.1-6.3	102	0.24-0.25



Tableau 2.3. Mesures du mélange transversal dans des cours d'eau avec méandres et singularités (extrait de Fischer et coll., 1979)

REFERENCE	Cours d'eau étudié	Morphologie du lit	Largeur moyenne W : (m)	Profondeur moyenne H : (m)	Vitesse moyenne $ V $: (m/s)	Vitesse de cisaillement u_* : (m/s)	Coefficient de dispersion D : (m ² /s)	$\frac{D}{Hu_*}$
Yotsukura et coll. (1970)	Fleuve Missouri près de Blair, Nebraska	Tronçon à méandres	200	2,7	1,75	0,074	0,12	0,6
Holley and Abraham (1973a)	Laboratoire	Côtés et fond lisses; épis de 0,15 m en rives	2,2	0,097	0,11	-	-	0,36-0,49
Idem (1973a)	Laboratoire	idem; épis de 0,5 m	2,2	0,097	0,11	-	-	0,3-0,4
Idem (1973a)	Modèle réduit du fleuve IJssel	Epis en rives et courbes légères	1,22	0,9	0,11	-	-	0,45-0,77
Idem (1973b)	Fleuve IJssel	Idem	69,5	4,0	0,96	0,075	-	0,51
Mackay (1970) ^a	Fleuve Mackenzie de Fort Simpson à Norman Wells	Tronçon droit ou légèrement courbé; îles nombreuses et barres de sable	1240	6,7	1,77	0,152	0,67	0,66
Yotsukura and Sayre (1976) and Sayre and Yeh (1973)	Fleuve Missouri aval de centrale nucléaire de Cooper, Nebraska	Tronçon incluant des courbes à 90° et 180°	210-270	4,0	5,4	0,08	1,1	3,4
Jackman and Yotsukura (1977)	Fleuve Potomac; tronçon de 29 km aval de centrale Dickerson	Tronçon à méandres peu accentués (courbes < 60°)	350	0,73-1,74	0,29-0,58	0,033-0,051	-	0,52-0,65



Le traitement de la dispersion associée aux instabilités dans le plan horizontal sera donc effectué à partir de ce concept. Variable dans l'espace, la viscosité turbulente cinématique nécessite le choix d'une longueur caractéristique l_m . Appliquant cette approche, Ouellet et coll. (1986) proposent d'utiliser $l_m = \lambda H$ comme longueur de mélange. λ est une constante numérique de l'ordre du rapport entre la taille du maillage et la plus petite profondeur d'eau de l'élément. La valeur finale de ce coefficient est obtenue par optimisation numérique du modèle, le procédé consistant en pratique à trouver le plus petit rapport possible permettant au modèle de converger vers une solution. C'est cette approche qui a été retenue pour la présente étude.

L'estimation des gradients de vitesse est effectuée à partir des résultats du modèle hydrodynamique et en mettant à profit la dérivabilité des fonctions d'interpolation de la méthode des éléments finis.

Le coefficient de diffusivité transversale D_N peut être obtenu par la relation suivante:

$$D_N = \beta v_{TN} = \beta l_m^2 \sqrt{2 \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \cdot \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2} \quad [2.53]$$

β une constante de calibration.

Comme la diffusivité transversale présentée ici ne comprend pas celle produite distinctement par le fond, le coefficient D_N devrait être calibré pour reproduire de manière générale le registre de valeurs suivant:

$$\begin{aligned} [(0,6 - 50\%) - 0,15] &\leq \left(\frac{D_N}{Hu_*} \right) \leq [(0,6 + 50\%) - 0,15] \quad \text{ou} \\ 0,15 &\leq \left(\frac{D_N}{Hu_*} \right) \leq 0,75 \end{aligned}$$

La borne maximale peut être dépassée en se souvenant que le registre a été établi pour des écoulements légèrement à moyennement méandrés. Localement, le rapport peut donc prendre des valeurs nettement plus considérables comme on l'a vu précédemment, en particulier, à la confluence de cours d'eau ou de bras de delta, ou encore près de singularités comme des quais ou ports. Comme le modèle hydrodynamique ne permet pas de reproduire fidèlement les écoulements secondaires à une échelle inférieure à la taille du maillage, on doit s'attendre à ce que le coefficient de dispersion obtenu perde de la précision dans les zones à forts gradients et discrétisées de manière approximative.



Diffusivité combinée: D . Finalement, la diffusivité produite par la turbulence de fond τ_f sera combinée à celle produite par la turbulence horizontale pour donner la diffusivité totale du milieu.

$$D = D_f + D_N \quad [2.54]$$

Anisotropie, diffusivité longitudinale D_L . Si la dispersion du milieu était isotrope, le coefficient D serait le même quelle que soit la direction considérée. Cependant, l'expérience montre que la dispersion longitudinale est supérieure à la dispersion latérale (Fischer et coll., 1979). Un certain degré d'anisotropie doit donc être introduit dans le coefficient de dispersion en réglant la valeur relative des composantes longitudinale et transversale. Fischer et coll. (1979) proposent d'utiliser une valeur de dispersion longitudinale D_L qui se situerait autour de 6 fois Hu_* ce qui est environ 10 fois la valeur du coefficient de base combiné D . Toutefois, ce coefficient est établi en fonction d'une utilisation dans les modèles unidimensionnels. C'est par calibration qu'on arrivera en pratique à déterminer la valeur de ce coefficient.

Transposition en valeurs nodales. Comme on cherche à obtenir des valeurs de diffusivité aux noeuds du modèle et que les gradients de vitesse sont discontinus aux frontières des éléments, il résulte autant de valeurs de diffusivité au noeud qu'il y a d'éléments connectés à ce noeud. Une procédure de pondération par les angles des éléments participant au noeud est donc appliquée. Ainsi,

$$D = \frac{\sum_k^N D_k \cdot \beta_k}{\sum_k^N \beta_k} \quad [2.55]$$

- D_k : la valeur nodale de la diffusivité turbulente donnée par l'élément k connecté au noeud;
 N : le nombre d'éléments ayant le noeud considéré dans leurs connectivités;
 β_k : l'angle au noeud considéré de l'élément k .



3 METHODE D'IMPLANTATION

A partir de ce chapitre, nous allons porter notre attention sur l'implantation particulière qui a été faite de la méthode de la marche au hasard dans le cadre de ce projet. Avant d'aborder les nombreux algorithmes spécifiques que nécessite une telle démarche, nous allons présenter, de façon générale, la méthodologie employée.

3.1 Principes

Le choix de la méthodologie particulière d'implantation vise à obtenir des résultats de qualité et ce, en un minimum de temps de calcul. De nombreux problèmes doivent être résolus dans cette double optique. Toutefois, l'effort algorithmique porte surtout sur l'accélération des calculs, le résultat de cet effort étant indirectement lié à la précision des résultats. En effet, pour un temps d'attente donné, un programme rapide produit une simulation comportant plus de particules ce qui permet d'accroître la précision. Conséquemment, une simulation précise peut être obtenue avec un temps d'attente inférieur. Cependant, lorsqu'un choix se pose entre la précision des calculs et la vitesse d'exécution, notre principe directeur est d'opter pour la qualité du résultat.

L'optimisation des calculs se fait à divers niveaux mais elle est d'abord tributaire d'une bonne stratégie d'ensemble. Celle-ci comporte quelques choix de base:

- les données hydrodynamiques sont portées sur une grille d'éléments finis mais les particules sont repérées en différences finies (*principe de discrétisation mixte*);
- le déplacement convectif est effectué en déplaçant la grille plutôt que les particules (*principe de la grille mobile*);
- lorsqu'un tronçon de panache est décrit en régime d'écoulement permanent, il n'est plus nécessaire de continuer à le simuler pour procéder sur le tronçon aval; ainsi, la simulation est découpée en tronçons quasi-indépendants (*principe de convolution*);
- les particules ont un poids adimensionnel *a priori* et la concentration obtenue est unitaire (*principe de panache unitaire*);
- le calcul des concentrations s'effectue en optimisant le besoin de lissage et en minimisant la diffusion artificielle ainsi induite (*principe de lissage diffusif contrôlé*);



- la concentration réelle est linéairement dépendante de la masse de contaminant introduite dans le milieu (*principe de linéarité*).

3.1.1 Le repérage codé une fois pour toutes: discrétisation mixte

Le calcul du mouvement d'une particule est une opération pouvant s'avérer très coûteuse en temps de calcul. Deux problèmes se posent: l'interpolation du champ de vitesse au lieu où la particule se trouve et son repérage au point d'arrivée en vue de reprendre le cycle de calcul. En différences finies, le repérage est simple en raison de la régularité de la grille. Le maillage d'éléments finis, plus adaptable, est cependant plus lourd à utiliser pour le repérage des particules en raison de son irrégularité.

Pour la modélisation hydrodynamique (section 2.1), notre choix s'est porté sur la méthode des éléments finis en raison de la précision locale que ce procédé procure. En conservant ce choix pour le programme de marche au hasard, il fallait trouver un schéma algorithmique qui minimise à la fois le calcul convectif (et diffusif) et le problème du repérage. Un transfert des données de la grille d'éléments finis du modèle hydrodynamique vers une grille régulière, quoiqu'envisageable, n'est pas apparu nécessaire étant donné les solutions algorithmiques qui ont été trouvées. De plus, ce transfert implique nécessairement une dégénérescence de l'information et il a été décidé de respecter le plus possible la méthode de génération des données dans l'exploitation de celles-ci.

Un procédé mixte s'appuyant sur le maillage d'éléments finis pour porter l'information hydrodynamique et utilisant une grille régulière pour le repérage des particules a finalement été retenu. Les avantages de la grille régulière sont très supérieurs à l'égard du suivi des particules. La procédure employée consiste à construire une grille carrée et d'associer à chaque pas de la grille le ou les éléments de la grille d'éléments finis qui le recoupe. Le résultat qui prend la forme d'un *code de repérage* est emmagasiné en mémoire pour accès rapide en cours de simulation. Il s'agit en quelque sorte d'un *repérage une fois pour toutes* qui peut aussi être conservé sur fichier pour des simulations ultérieures.

3.1.2 Le déplacement moyen calculé une fois pour toutes: grille mobile

Abordons maintenant la méthode de déplacement des particules. A l'instar du code de repérage qui peut être construit une fois pour toutes, le déplacement moyen des particules peut être calculé en minimisant l'effort consenti. Pour expliquer notre approche, considérons un groupe de particules

incluses dans un élément. Ces particules occupent une position relative dans celui-ci. Après un intervalle de temps donné, les particules se seront déplacées en moyenne selon le champ de vitesse local, c'est-à-dire sur des lignes de courant. Leur position d'arrivée pourra se situer dans divers éléments d'autant plus nombreux que la grille évoluera vers une densité plus fine que l'élément de départ.

Si, plutôt que de déplacer les particules, on déplace l'élément lui-même avec les particules qui s'y trouvent, on obtient un résultat strictement équivalent en déplacement, sauf que toutes les particules restent groupées au sein de cet élément conservant même leur position relative (en réservant le déplacement dispersif pour une phase ultérieure). Cette option comporte des conséquences considérables quant à l'optimisation des calculs comme on le verra en détail au chapitre 4.

Ainsi, plutôt que de déplacer les particules en valeur moyenne, on déplace la grille elle-même. Dans un mouvement stationnaire, cette opération n'a besoin d'être effectuée qu'une seule fois et une fois pour toutes. En pratique, l'algorithme ne comprend qu'un ensemble d'opérations de transformations géométriques pour le calcul de la position réelle d'arrivée des particules (accomplies sur la position de la grille déplacée) et d'accès directs au code de repérage pour localiser les particules dans la grille initiale. Cette procédure est démontrée à la figure 3.1.

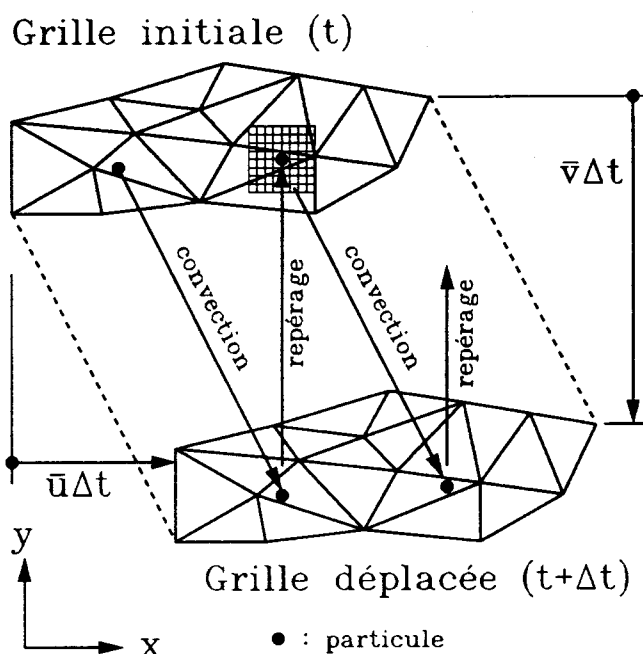


Figure 3.1.
Déplacement et repérage une fois pour toutes



Le calcul de la dispersion s'intercale dans ce schéma algorithmique entre le calcul du déplacement convectif moyen et le repérage des particules sur la grille de départ. Cette procédure nécessite l'interpolation des caractéristiques diffusives comme nous le verrons au chapitre 5.

3.1.3 La réutilisation d'un panache partiel: principe de convolution

Le principe de convolution vise essentiellement l'optimisation des calculs en évitant de recalculer plusieurs fois un ou des tronçons qui ont déjà été décrits de façon satisfaisante et en réservant le calcul des concentrations pour une phase ultérieure.

Un tronçon est constitué d'un segment du panache de particules, segment assez long pour être considéré comme statistiquement indépendant en moyenne de ses voisins. Ainsi, lorsque des particules ont été propagées en débit continu dans un milieu pendant une période ΔT , il n'est plus nécessaire de continuer la simulation sur le tronçon concerné; autrement, le résultat obtenu serait redondant.

Il est préférable de stopper l'injection des particules (interrompre la condition limite de flux), de sauvegarder le résultat obtenu sur ce premier tronçon, et de poursuivre la simulation sur le tronçon suivant en aval en y appliquant comme conditions initiales ce dernier résultat. De nouveau, après le même intervalle de temps ΔT , le résultat est sauvegardé pour usage ultérieur (assemblage global) et comme conditions initiales pour le tronçon suivant.

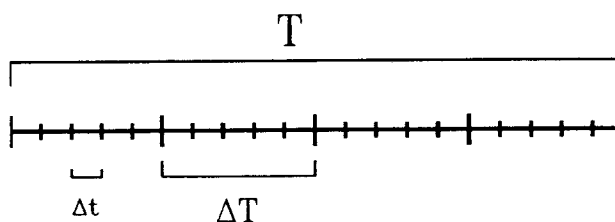
Le pas de temps de la simulation Δt est dicté par des contraintes de précision. Un ensemble de pas de temps forment une période dite "de convolution" ΔT et un ensemble de périodes de convolution forment la durée totale T de la simulation (figure 3.2).

3.1.4 Les particules adimensionnelles: panache unitaire

Dans un premier temps, toutes les particules ont un poids numérique équivalent, unitaire et adimensionnel. On peut donc calculer des concentrations dites unitaires correspondant à une injection unitaire, c'est-à-dire, à une unité de contaminant injectée par unité de temps. Si le régime d'injection de contaminant est permanent (stationnaire), les concentrations réelles du panache sont directement proportionnelles au débit massique réel de contaminant introduit dans le milieu. Dans le même contexte, le panache de concentration unitaire peut servir pour les divers contaminants considérés. Encore là, on obtient un *panache en concentration calculé une fois pour toutes*.



Si le régime d'injection varie dans le temps, les particules sont affectées d'une masse de contaminant en fonction de leur âge dans la simulation. La masse ainsi allouée à la particule dépend de la variation temporelle à la source du débit de contaminant.



T : période ou durée de la simulation

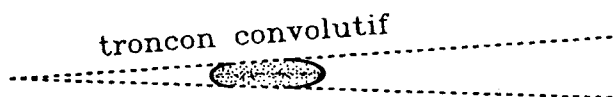
ΔT : période de la convolution

Δt : pas de temps de la simulation

Figure 3.2.

Découpage temporel d'une simulation

Deux panaches qui s'interpénètrent peuvent également être additionnés directement (en conservant leurs attributs) puisque les masses de contaminants sont additives pour un volume considéré.



3.1.5 Le lissage diffusif contrôlé

Le choix du volume contenant les particules affecte directement la concentration obtenue. Donc, ce choix ne peut être arbitraire. Un volume de référence (cellule de calcul) trop petit nécessite un grand nombre de particules pour que chaque cellule du modèle soit décrite. Si le nombre des particules est insuffisant, plusieurs cellules restent vides et la concentration y est nulle. Un volume trop grand nécessite moins de particules au total, mais le résultat est entaché d'une dispersion additionnelle indésirable.

L'idéal est de choisir une dimension de cellule variable dans le temps et l'espace. Lorsque les particules sont jeunes, elles sont relativement groupées et le volume total qui est affecté est petit. Une cellule petite convient pour décrire le champ de concentration sans dispersion indésirable et



sans trou dans le champ. A l'autre extrême, lorsque les particules sont vieilles, elles sont très dispersées dans le milieu et le volume affecté est beaucoup plus grand. Alors, le volume de la cellule doit être accru pour éviter les trous de concentration.

Il est difficile d'établir une grille d'interprétation variable dans l'espace. La trajectoire du panache n'est pas connue *a priori* et on devrait redéfinir la grille à chaque simulation. De plus, le choix du pas de grille ne peut pas être laissé à l'arbitraire de l'utilisateur. Enfin, le fait de devoir utiliser une discrétisation variable à chaque simulation introduit *a posteriori* cet inconvénient intrinsèque des méthodes eulériennes qu'on cherchait à éviter avec la démarche lagrangienne.

Il a donc été décidé de centrer la cellule d'interprétation des concentrations sur la particule elle-même et de répartir la masse de contaminant de la particule sur sa propre zone d'influence. Ce schéma est certes diffusif mais il peut aisément être contrôlé en fonction du temps de parcours des particules. Une particule jeune a un petit rayon d'influence alors qu'une vieille particule affecte un volume beaucoup plus grand.

La concentration en un point donné est la somme des influences significatives des particules comprises dans le rayon immédiat du point. Si l'on désire obtenir des concentrations sur une grille régulière, le pas de celle-ci n'affectera en rien le résultat final.

Cette procédure peut être interprétée comme si l'on décrivait le mélange turbulent, en partie à une échelle macroscopique par la dispersion aléatoire et en partie par une diffusion calculée analytiquement sur une zone d'influence. Dès lors, il est souhaitable de choisir comme patron d'influence diffusive, un schéma gaussien comme nous le verrons au chapitre 6 (Calcul des concentrations).

3.2 Schéma algorithmique d'ensemble

Le schéma algorithmique d'ensemble du programme PANACHE est illustré à la figure 3.3.

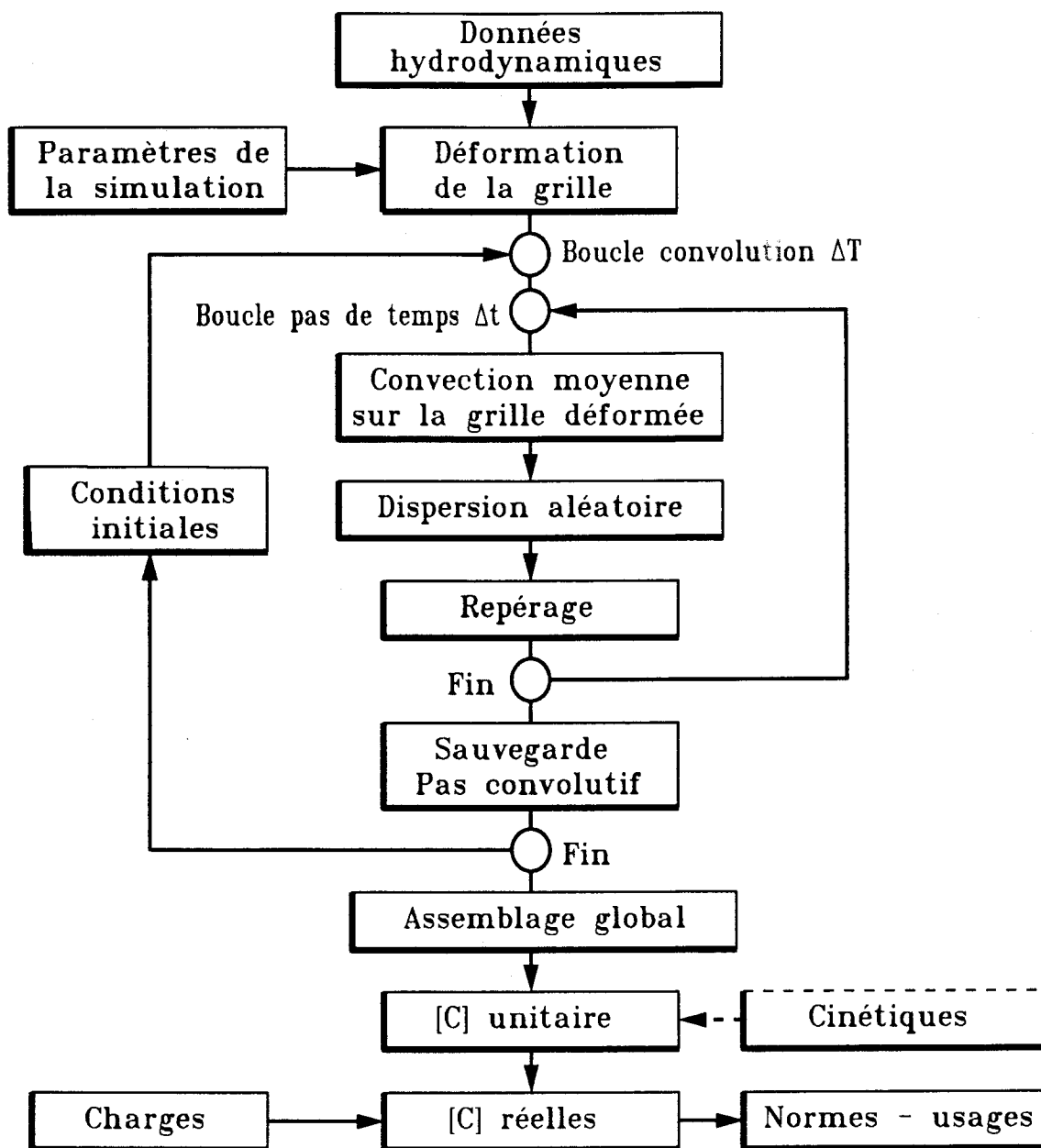


Figure 3.3. Méthodologie de calcul du programme PANACHE



4 TRAITEMENT DE LA DISPERSION

La méthode de résolution lagrangienne de marche au hasard permet de découpler les processus de convection et de dispersion représentés par l'équation de propagation d'un soluté. Il est alors plus simple d'appliquer à chacun de ces phénomènes le schéma numérique approprié. La partie convective représente le transport du contaminant par le champ de vitesse; c'est celle qui, dans l'équation [2.37], se rattache aux termes:

$$\text{Convection} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial H C u}{\partial x} + \frac{\partial H C v}{\partial y}$$

De son côté, la dispersion est associée aux termes:

$$\text{Dispersion} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(H D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(H D \frac{\partial C}{\partial y} \right)$$

La méthode de la marche au hasard s'occupe de manière très différente de ces deux phénomènes. C'est l'utilisation de la forme de Fokker-Plank qui, on l'a vu au chapitre 2, permet d'isoler les deux termes pour la résolution. La partie advective est traitée comme une équation différentielle ordinaire avec conditions initiales. Le chapitre 5 portera spécifiquement sur cet aspect. De son côté, le comportement dispersif du contaminant est vu comme un processus aléatoire.

Les deux schémas utilisés ne sont donc pas couplés lors de la résolution comme ce serait le cas avec les méthodes eulériennes. On divise plutôt la simulation en intervalles de temps Δt , et on résout séparément, à l'intérieur de ces pas de temps, les équations associées aux deux phénomènes. On somme ensuite les deux composantes du processus de propagation.

En agissant ainsi, on assume que le transport du contaminant par convection et son transport par dispersion sont deux processus séparés, mais additifs. Ceci revient à considérer que la dispersion a lieu de la même façon à l'intérieur d'un fluide en mouvement que lorsque le fluide est stationnaire.

Ce chapitre est consacré uniquement au traitement aléatoire de la dispersion. Après avoir examiné la solution analytique du problème, nous allons considérer le théorème de la "limite centrale" qui décrit la probabilité d'un processus aléatoire avec une fonction analogue. Le chapitre est complété par un exposé sur les méthodes de génération de nombres aléatoires.



4.1 Solution analytique de l'équation de diffusion

Considérons un problème purement diffusif où la profondeur et le coefficient de diffusion sont constants. On a alors comme point de départ l'équation suivante:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x_j^2}; \quad j = 1, 2$$

Cette relation représente le mode de transfert de la masse du soluté selon un processus fickien. Si l'on applique cette relation à la dispersion d'une soluté de masse M , injecté ponctuellement en $x_j = 0$, au temps $t = 0$, la solution analytique générale du problème est donnée par :

$$C(x_j, t) = \frac{M}{(2\pi)^{N/2} (Dt)^{N/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \frac{x_j^2}{Dt}\right) \quad \text{avec} \quad \exp \alpha \equiv e^\alpha$$

Ici, N représente le nombre de dimensions spatiales prises en compte par le problème. A deux dimensions, on a:

$$\text{Avec } N = 2 \quad \text{et} \quad \begin{bmatrix} x_1 \equiv x \\ x_2 \equiv y \end{bmatrix} \quad C(x, y, t) = \frac{M}{2\pi Dt} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{4Dt}\right) \quad [4.1]$$

Cette équation ressemble à la courbe normale, ou gaussienne, fréquemment utilisée en statistique. Cette ressemblance n'est pas fortuite. Elle se trouve être la pierre angulaire de la méthode de la marche au hasard.

4.2 Traitement aléatoire de la dispersion

Regardons maintenant le problème de la diffusion moléculaire en considérant un fluide comme étant composé de millions de molécules constamment en mouvement et entrant en collision les unes avec les autres. Représentons la matière en solution par des particules distinctes de celles du fluide. Ces particules se retrouvent en nombre beaucoup plus petit et elles subissent aussi de multiples collisions par seconde. La quantité de collisions dépend de la dimension des particules du contaminant, de la densité du fluide et de sa température. Quoi qu'il en soit, les heurts sont si fréquents qu'une molécule perd rapidement la mémoire de sa trajectoire initiale, et son déplacement n'est plus prévisible à moyen terme. Le chemin suivi tend alors à être une marche au hasard.



Une bonne façon de décrire le mouvement des particules est alors de le considérer statistiquement. Afin de simplifier l'analyse, plaçons nous dans un cadre unidimensionnel. Supposons que le déplacement d'une molécule de contaminant consiste en une série de pas de longueur égale, Δx prenant chacun un temps Δt . Le sens de ce pas est totalement aléatoire, avec la même probabilité qu'il soit d'avant ou d'arrière.

Où se trouve la particule après plusieurs pas de temps? On ne peut pas répondre précisément à cette question. Cependant, on sait que cette particule a effectué plusieurs pas en avant et en arrière. C'est ici qu'intervient un important résultat de l'analyse statistique, le "*théorème de limite centrale*" qui se présente comme suit:

Si un échantillon de n événements indépendants suit une loi de probabilité de moyenne μ et de variance σ^2 , alors, lorsque n devient assez grand, la somme de ces observations suit une loi normale de moyenne $n\mu$ et de variance $n\sigma^2$.

A l'aide de ce théorème, il est possible de montrer qu'après plusieurs pas aléatoires, la probabilité qu'une particule, partie en $x = 0$, se trouve entre $m\Delta x$ et $(m + 1)\Delta x$ s'approche de la valeur qu'a une fonction de densité normale de moyenne nulle, et de variance $\sigma^2 = t\Delta x^2/\Delta t$ (Feller, 1968). Il faut cependant que:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x^2}{\Delta t} = \text{constante}$$

Dans ce cas, la probabilité que la particule se retrouve dans l'intervalle $[x, x + \Delta x]$ est donnée approximativement par :

$$P(x \leq X \leq x + \Delta x, t) \approx \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \Delta x$$

Cette relation tend vers l'égalité avec $\Delta x \rightarrow 0$.

Si un ensemble de n particules est lâché à l'origine au temps $t = 0$, la probabilité totale qu'une particule se retrouve au voisinage de x au temps t est déterminée par la somme des probabilités individuelles des particules, c'est-à-dire:



$$\begin{aligned}
 P(x \leq X \leq x + \Delta x, t) &\approx \sum_{j=1}^n \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \Delta x \\
 &= \frac{n}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \Delta x
 \end{aligned}$$

Maintenant, si l'on désire connaître la concentration dans l'intervalle $[x, x + \Delta x]$, on divise la probabilité totale par la longueur de l'intervalle considéré :

$$C(x \leq X \leq x + \Delta x, t) = \frac{P(x \leq X \leq x + \Delta x, t)}{\Delta x} \approx \frac{n}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$$

En passant à la limite, on trouve l'égalité suivante :

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} C(x \leq X \leq x + \Delta x, t) = C(x, t) = \frac{n}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$$

L'équation se généralise en 2 et 3 dimensions. Ainsi, à deux dimensions, on a :

$$C(x_1, x_2, t) = \frac{n}{\sigma_1 \sigma_2 2\pi} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x_1^2}{\sigma_1^2} + \frac{x_2^2}{\sigma_2^2} \right)\right] \quad [4.2]$$

σ_i^2 représente la variance selon les axes considérés.

La ressemblance entre cette forme statistique [4.2] et la solution analytique [4.1] de l'équation de la diffusion pure est évidente, et il suffit de substituer $\sigma_1 = \sigma_2 = \sqrt{2Dt}$ pour retrouver une solution probabiliste au problème. Cette substitution est conséquente car elle revient à poser :

$$2D = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x^2}{\Delta t}$$

et on retrouve bien les unités d'un coefficient de diffusion.

Le processus que l'on vient de décrire est celui de la diffusion moléculaire. Comparativement à la diffusion turbulente présente dans les eaux de surface, ce processus est négligeable, car il se produit à une échelle microscopique. Contrairement à la diffusion qui est une propriété du fluide, la diffusion



turbulente et la dispersion sont des propriétés de l'écoulement. La turbulence définit l'agitation macroscopique de l'écoulement. Etant aussi un phénomène aléatoire, on considère cette dispersion macroscopique comme analogue à la diffusion moléculaire mais à une échelle supérieure.

En conséquence, la méthode de la marche au hasard consiste à simuler le déplacement aléatoire de plusieurs particules, sur plusieurs pas de temps. La concentration en un point est trouvée en examinant la densité des particules dans le voisinage de celui-ci.

La simulation exige le choix *a priori* d'un pas de temps Δt pendant lequel on décrit un mouvement $(\Delta x_1, \Delta x_2)$ de particule. Ce pas de temps doit être assez petit. Le déplacement dispersif d'une particule se fera en considérant qu'à chaque pas, la probabilité qu'elle s'éloigne de sa position selon l'un des axes suit une loi normale de moyenne nulle et de variance $2D\Delta t$. Les déplacements en x_i seront alors estimés comme suit pour le cas anisotrope:

$$\Delta x_i = Z_i \sqrt{2D_i \Delta t} ; \quad i = 1, 2 \quad [4.3]$$

où,

Z_1, Z_2 des variables aléatoires indépendantes de distribution normale de moyenne nulle et de variance 1, i.e., $N(0,1)$.

Si l'on suppose que les directions ($i = 1, 2$) correspondent respectivement aux directions longitudinales et transversales à l'écoulement, les coefficients D_1 et D_2 représentent respectivement D_L et D les coefficients de dispersion longitudinale (L) et transversale dans le repère local de l'écoulement (voir la section 2.2.8, Choix des paramètres). Un tel traitement requiert de rétablir les déplacements dans le repère global ce qui s'accomplit ainsi:

$$\begin{Bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \end{Bmatrix} \quad [4.4]$$

$$\theta = \arctan \left(\frac{u}{v} \right)$$

où,

θ : l'angle de rotation du repère local par rapport au repère global obtenu ainsi:

(u, v) : les composantes de la vitesse selon x et y .



4.3 Générateur de nombres aléatoires

L'équation 4.3 montre que trois aspects conditionnent le déplacement dispersif. Le coefficient de dispersion D , le pas de temps Δt et un mouvement aléatoire que dictent Z_1 et Z_2 . D et D_L sont des paramètres que fournit la résolution par éléments finis du modèle hydrodynamique. Pour ce qui est de Z_1 et Z_2 , il faut pouvoir produire en grande quantité des nombres aléatoires. Dans les applications informatiques, on utilise pour ce faire un *générateur de nombres aléatoires*.

Cette section ne se propose pas d'innover en introduisant un générateur plus performant que ceux disponibles, ni d'en modifier un existant dans le but d'en améliorer les performances. La littérature propose déjà quantité de générateurs de nombres aléatoires très efficaces. Cependant, les utiliser sans en connaître les limites ni les principes peut être dangereux.

En effet, les générateurs de nombres aléatoires dépendent souvent de l'architecture même de l'ordinateur que l'on utilise. De plus, une simulation typique de propagation d'un panache à l'aide de la méthode de la marche aléatoire comporte des milliers de particules. Chaque particule devant être déplacée des centaines de fois, une très grande quantité de tirages aléatoires doivent être réalisés. Dans certains cas, une telle multitude de nombres fait ressortir les limites inhérentes à tout générateur, en produisant un biais systématique dans les valeurs produites.

Il est important que les nombres utilisés dans la simulation soient réellement aléatoires, ou plutôt, qu'ils ne soient pas entachés d'un biais, car sinon, c'est la simulation elle-même qui risque d'être faussée. Pour cette raison, il est utile de comprendre les principes moteurs des générateurs de nombres aléatoires et de connaître leurs conditions d'application.

Une première propriété des générateurs est qu'ils produisent des nombres uniformément distribués dans l'intervalle $[0,1]$. Comme on requiert des valeurs distribuées selon une loi normale, on doit appliquer une transformation (figure 4.1).

Cette transformation est analytique, et ne pose pas de difficulté. La production de nombres uniformément distribués dans un intervalle est plus délicate.

La grande majorité des générateurs se basent sur une équation de la forme:

$$E_i = (aE_{i-1} + c) \text{ (modulo } m)$$

où:



a : le multiplicateur;
 c : l'incrément;
 m : le modulo;
 E_i : est la $i^{\text{ème}}$ valeur produite.

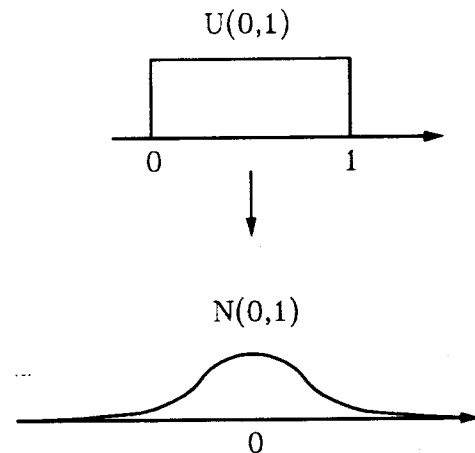


Figure 4.1.

Transformation d'une variable aléatoire en distribution normale

Pour commencer la génération, il faut une *racine*, c'est-à-dire, un premier nombre E_0 .

Les générateurs de cette forme sont appelés *linéaires congruents*. On remarque que les entiers produits se situent entre 0 et $m-1$ inclusivement. Pour obtenir une valeur dans l'intervalle $[0,1]$, on pose

$$U_i = \frac{E_i}{m-1}$$

Un observateur peut objecter que les E_i produits ne sont pas aléatoires, puisqu'en connaissant E_0 et les paramètres, il est facile de déduire les E_i subséquents. Cette objection s'applique cependant à l'ensemble des générateurs arithmétiques, c'est pour cette raison qu'ils sont souvent appelés *pseudo-aléatoires*.

Ainsi, les générateurs proposés ne sont jamais pleinement aléatoires car la forme même des équations utilisées fait que les nombres engendrés sont prévisibles. Cependant une telle prévisibilité ne gêne pas nécessairement lors de leur utilisation. Ce qui importe, c'est qu'il n'y ait pas d'*ordre logique* dans la séquence de nombre. Une suite de m valeurs comme celle-ci:



$$1, 2, 3, 4, \dots, m$$

est sans doute mauvaise. Mais si on ne connaît pas la fonction génératrice, et que ces m entiers apparaissent d'une façon telle qu'il n'est pas possible de déduire rationnellement un arrangement, on pourra dire de cette suite qu'elle est aléatoire, puisqu'imprévisible. Pour cette raison, les générateurs pseudo-aléatoires demeurent l'approche privilégiée.

Le fait que l'on ait que des entiers compris entre 0 et $m-1$ limite à m le nombre possible de valeurs distinctes, m est la *période* maximale du générateur. En effet, un choix quelconque de a , c et m donne généralement une période de génération plus petite que m . Il est souhaitable d'augmenter le plus possible la période car cela revient à rendre plus uniforme la distribution dans l'intervalle $[0,1]$.

L'efficacité du générateur dépend alors d'une sélection judicieuse des paramètres a , c et m . En premier lieu, on choisira un m assez grand afin d'augmenter les chances d'avoir une distribution suffisamment uniforme entre 0 et 1. Pour ce qui est des choix de a et c , il existe certaines règles à suivre si l'on cherche à avoir une période de génération égale à m .

- 1) *le seul entier positif divisant exactement m et c doit être 1;*
- 2) *si q est un nombre premier divisant exactement m et c , alors q doit diviser $a - 1$;*
- 3) *si 4 divise m alors 4 doit diviser $a - 1$.*

Maintenant que l'on connaît un peu mieux les caractéristiques mathématiques des générateurs, considérons l'aspect informatique de la question. Pour obtenir des résultats intéressants, il faut effectuer les calculs avec de très grands entiers. Il devient donc primordial de s'assurer que les nombres manipulés ne soient pas supérieurs au plus grand entier machine. Dans le cas contraire, m serait remplacé par l'entier maximal (*MAXINT*) de l'ordinateur et tous les efforts consentis pour le choix des paramètres du générateur s'avèreraient inutiles.

De plus, si la quantité de nombres à générer est très importante, il faut s'arranger pour minimiser l'effort de calcul. Une bonne idée dans ces conditions est précisément de choisir m égal à l'entier maximal, c'est-à-dire:

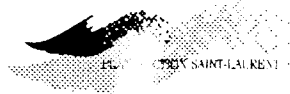
$$m = 2^b$$

où

b : le nombre de bits dans un mot machine.



Pour un ordinateur câblé à 32 bits, on a $b = 32$, ce qui rend possible une période optimale. De plus, ce choix permet d'éviter une division explicite par m en utilisant le débordement mémoire (mémoire virtuelle). En effet, utiliser le débordement mémoire diminue significativement le rendement de l'effort de calcul. Il est aussi possible d'utiliser cette stratégie dans le cas où m est plus petit, mais près de l'entier maximal.



5 TRAITEMENT DE LA CONVECTION

Le calcul du mouvement convectif est assez simple. On suppose que si une particule est lâchée dans un champ de vitesse, elle suivra tout simplement un filet de courant. On utilise le même pas de temps que pour le transport dispersif. On laisse donc le mouvement s'étaler durant une petite période Δt . On considère séparément le mouvement selon les axes de coordonnées (x, y) . L'équation [5.1] issue de la forme de Fokker-Planck (voir la relation [2.39] représente l'approche classique du traitement de la convection par la méthode de la marche au hasard:

$$\Delta x_i = \left(u_i + \frac{D_i}{H} \frac{\partial H}{\partial x_i} + \frac{\partial D_i}{\partial x_i} \right) \Delta t \quad i = 1, 2 \quad [5.1]$$

Comme on le voit, le champ de vitesse (u, v) n'est pas le seul facteur qui détermine le mouvement lors du calcul. Deux expressions additionnelles y sont greffées. Celles-ci sont constituées de termes dispersifs dont la forme algébrique reste assimilable à celle de la convection. L'équation de Fokker-Planck les associe au champ de vitesse pour le calcul du transport de type convectif. La résultante forme le *champ de vitesse apparent* u^+ [5.2]. L'approche introduite par l'équation [5.1] est classique dans les méthodes de marche au hasard.

$$\frac{\Delta x_i}{\Delta t} = u_i^+ = \left(u_i + \frac{D_i}{H} \frac{\partial H}{\partial x_i} + \frac{\partial D_i}{\partial x_i} \right) \quad i = 1, 2 \quad [5.2]$$

5.1 Algorithmes de calcul du pas convectif

Différents algorithmes sont disponibles pour calculer le mouvement convectif. Plusieurs seront proposés, analysés et ensuite testés. Les résultats de ces tests seront donnés au chapitre 7.

5.1.1 Schéma d'Euler explicite

On note (x', y') la position finale d'un point (par exemple, un noeud de grille) ou d'une particule transportés durant un pas de temps. Le calcul du déplacement net d'un point ou d'une particule situés en (x_0, y_0) peut être effectué par l'algorithme suivant:



Algorithme 5.1 Calcul du pas convectif avec le schéma d'Euler explicite (EE)

Début

$$x' = x_0 + \left(u_0 + \frac{D_0}{H_0} \frac{\partial H_0}{\partial x} + \frac{\partial D_0}{\partial x} \right) \Delta t \equiv x_0 + u_0^+ \Delta t$$

$$y' = y_0 + \left(v_0 + \frac{D_0}{H_0} \frac{\partial H_0}{\partial y} + \frac{\partial D_0}{\partial y} \right) \Delta t \equiv y_0 + v_0^+ \Delta t$$

Fin

Ici, $H_0 = H(x_0, y_0)$, $D_0 = D(x_0, y_0)$ et $u_0 = u(x_0, y_0)$

L'algorithme 5.1 permet de résoudre le système d'équations différentielles ordinaires avec conditions initiales suivant:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, y) = u^+$$

$$\frac{dy}{dt} = g(x, y) = v^+$$

$$x(0) = x_0 \quad y(0) = y_0$$

Sans entrer plus en détail dans cette méthode, il est intéressant d'en connaître certains aspects. Le déplacement en x est calculé de la façon suivante:

$$\Delta x = u^+(x_0, y_0) \Delta t$$

Utiliser le schéma d'Euler explicite revient à considérer que le mouvement d'une particule n'est conditionné que par le champ de vitesse au point de départ. On ne tient donc pas compte de la variation de celui-ci sur le chemin parcouru par une particule. Cette approche peut conduire à des erreurs qui dépendent du gradient de vitesse apparente et du pas de temps (figure 5.1). Il existe donc une limite à ne pas dépasser sur le pas de temps. Le schéma d'Euler explicite est le plus simple mais le moins précis des algorithmes utilisables pour de tels problèmes.

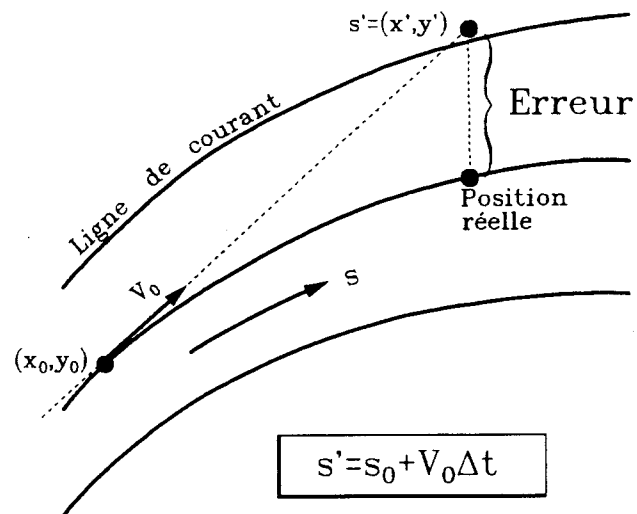


Figure 5.1.
Calcul du pas convectif par un schéma d'Euler explicite

s : une coordonnée curviligne

5.1.2 Schéma de Runge-Kutta

Si une plus grande précision est recherchée, il est nécessaire d'utiliser une méthode d'ordre plus élevé telle le schéma classique de *Runge-Kutta*. L'algorithme 5.2 décrit la méthode de Runge-Kutta 4 pour un système à deux équations.

La méthode de Runge-Kutta prend en considération la variation possible du champ de vitesse en chemin. K_1 et L_1 représentent le même mouvement que celui calculé par le schéma explicite d'Euler. Les valeurs de K_2 et L_2 résultent cependant du raisonnement suivant. On place une particule au milieu du chemin engendré par K_1 et L_1 , c'est-à-dire à la position $(x_0 + K_1/2, y_0 + L_1/2)$. On observe ensuite de quelle façon cette particule est transportée par le champ de vitesse apparent à ce point (figure 5.2).

K_2 et L_2 décrivent ce déplacement. On reporte la tête de ce deuxième chemin en (x_0, y_0) . De nouveau, on dépose une particule à mi-parcours, en $(x_0 + K_2/2, y_0 + L_2/2)$ afin de connaître le déplacement qu'elle subit à cet endroit. K_3 et L_3 sont alors trouvés. K_4 et L_4 sont calculés de la même façon. Le déplacement final est une pondération des quatre parcours. Cette procédure prend en considération le champ de vitesse en quatre points dont trois en aval de (x_0, y_0) .



Algorithme 5.2 Calcul du pas convectif avec un schéma de Runge-Kutta 4 (RK)
Début

$$K_1 = u^+(x_0, y_0) \Delta t$$

$$L_1 = v^+(x_0, y_0) \Delta t$$

$$K_2 = u^+\left(x_0 + \frac{K_1}{2}, y_0 + \frac{L_1}{2}\right) \Delta t$$

$$L_2 = v^+\left(x_0 + \frac{K_1}{2}, y_0 + \frac{L_1}{2}\right) \Delta t$$

$$K_3 = u^+\left(x_0 + \frac{K_2}{2}, y_0 + \frac{L_2}{2}\right) \Delta t$$

$$L_3 = v^+\left(x_0 + \frac{K_2}{2}, y_0 + \frac{L_2}{2}\right) \Delta t$$

$$K_4 = u^+\left(x_0 + \frac{K_3}{2}, y_0 + \frac{L_3}{2}\right) \Delta t$$

$$L_4 = v^+\left(x_0 + \frac{K_3}{2}, y_0 + \frac{L_3}{2}\right) \Delta t$$

$$x' = x_0 + \frac{(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)}{6}$$

$$y' = y_0 + \frac{(L_1 + 2L_2 + 2L_3 + L_4)}{6}$$

Fin

Bien sûr, un tel schéma est plus précis mais il nécessite un effort de calcul plus grand. Il faut cependant garder à l'esprit que le calcul du mouvement convectif se fait par l'intermédiaire du déplacement du maillage (notion introduite au chapitre précédent) et que la majorité des calculs ne sont effectués qu'une seule fois. On peut donc envisager d'utiliser des approches encore plus précises afin d'obtenir des résultats plus représentatifs.

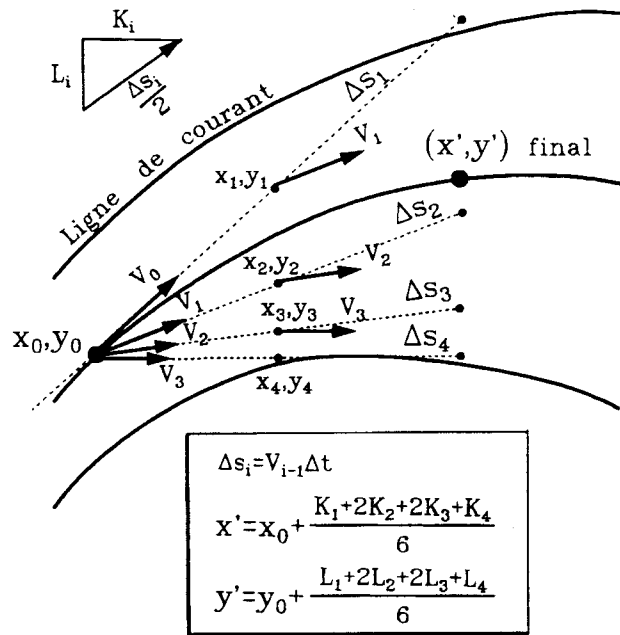


Figure 5.2.
Calcul du pas convectif par un
schéma Runge-Kutta d'ordre 4

5.1.3 Schéma itératif semi-implicite d'Euler

Dans ces conditions, on peut faire appel aux méthodes itératives. Le schéma d'Euler semi-implicite en fait partie. Celui-ci tient compte de la vitesse au point d'arrivée, la position duquel étant inconnue *a priori*. La position de ce point ne peut être connue qu'itérativement. Cette procédure est démontrée à la figure 5.3. En pratique, on doit d'abord estimer un premier mouvement, à l'aide de l'algorithme explicite 5.1.

$$\Delta x = u_0^+ \Delta t, \quad \Delta y = v_0^+ \Delta t$$

On dépose une particule en bout de trajet

$$(x_{(1)}, y_{(1)}) = (x_0 + \Delta x, y_0 + \Delta y)$$

et on calcule un second déplacement:

$$\Delta x_{(1)} = u^+(x_{(1)}, y_{(1)}) \Delta t \quad \text{et} \quad \Delta y_{(1)} = v^+(x_{(1)}, y_{(1)}) \Delta t$$

On combine alors ces deux chemins en un schéma implicite:



$$x_{(2)} = x_0 + (1 - \alpha)\Delta x + \alpha\Delta x_{(1)}$$

$$y_{(2)} = y_0 + (1 - \alpha)\Delta y + \alpha\Delta y_{(1)} \quad [5.3]$$

$$0 \leq \alpha \leq 1$$

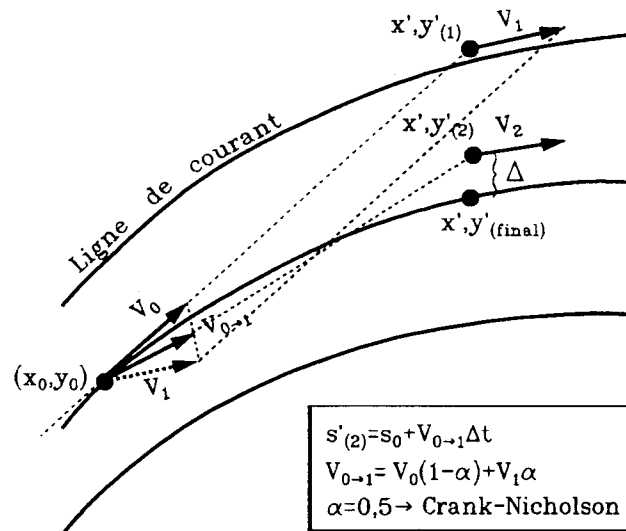


Figure 5.3.

Calcul du pas convectif par un schéma d'Euler semi-implicite

Δ { "distance" ou erreur résiduelle
après une itération
Si $\Delta > \varepsilon \rightarrow$ itération suivante

La nouvelle position $(x_{(2)}, y_{(2)})$ est le résultat du déplacement d'une particule dans un champ de vitesse constitué par le couplage des champs en (x_0, y_0) et $(x_{(1)}, y_{(1)})$.

$$V_{\alpha}^{+} = (1 - \alpha)V_0^{+} + \alpha V_{(1)}^{+}$$

où:

α : représente l'importance relative accordée au point d'arrivée.

Si $\alpha = 0$ on retrouve un schéma d'Euler explicite. En augmentant α , on donne moins d'importance à la valeur du champ apparent au point de départ. Avec $\alpha = 1$, on ne considère plus que le champ de vitesse au point d'arrivée (schéma totalement implicite). Quand $\alpha = 0,5$, on a le schéma semi-implicite de Crank-Nicholson.



La procédure semi-implicite permet d'améliorer nettement les résultats obtenus mais il peut s'avérer nécessaire d'itérer le processus plusieurs fois si le champ comporte de forts gradients.

On calcule le transport d'une particule à la nouvelle coordonnée $(x_{(2)}, y_{(2)})$ et à l'aide du schéma semi-implicite 5.3 on trouve une autre position $(x_{(3)}, y_{(3)})$. L'algorithme 5.3 effectue ce calcul itératif. On note $(x_{(k)}, y_{(k)})$ le $k^{ième}$ calcul de la position. On a alors que: $u_{(k)}^+ = u^+(x_{(k)}, y_{(k)})$

Algorithme 5.3 Calcul du pas convectif avec itération du schéma d'Euler semi-implicite (ESI)

Début

$$\Delta x = u_0^+ \Delta t$$

$$\Delta y = v_0^+ \Delta t$$

$$x_{(1)} = x_0 + \Delta x$$

$$y_{(1)} = y_0 + \Delta y$$

$$k = 1$$

$$Distance = 2 * \epsilon$$

Tant que Distance $\geq \epsilon$

Début

$$\Delta x_{(k)} = u_{(k)}^+ \Delta t$$

$$\Delta y_{(k)} = v_{(k)}^+ \Delta t$$

$$x_{(k+1)} = x_0 + (1 - \alpha)\Delta x + \alpha\Delta x_{(k)}$$

$$y_{(k+1)} = y_0 + (1 - \alpha)\Delta y + \alpha\Delta y_{(k)}$$

$$Distance = \sqrt{(x_{(k+1)} - x_{(k)})^2 + (y_{(k+1)} - y_{(k)})^2}$$

$$k = k + 1$$

Fin

$$x' = x_{(k)} \quad \text{et} \quad y' = y_{(k)}$$

Fin



Cette approche utilise les valeurs de (u^+, v^+) aux extrémités du parcours de la particule.

5.1.4 Schéma d'Euler explicite avec pas de temps divisé

L'introduction d'un schéma plus précis peut sembler difficile, cependant, il est encore possible, avec une idée toute simple, d'améliorer les résultats. Il est clair que toute diminution du pas de temps rend la simulation encore plus représentative. Cette diminution allonge cependant la durée de la simulation car il y a davantage de mouvements de particules à simuler.

Cependant, rien n'empêche de discrétiser le pas de temps Δt en sous-pas dans le calcul du déplacement du maillage. Le résultat à conserver sera le point d'arrivée du dernier sous-pas. Utilisons par exemple un sous-pas de temps $\Delta t/m$. Pour retrouver le pas de temps total, il faut transporter chaque particule m fois. La composition de ces m mouvements donne cependant une meilleure approximation du parcours réel de la particule.

L'algorithme 5.4 décrit le calcul du déplacement d'une particule en découpant par m le pas de temps. On notera (x_l, y_l) la position d'une particule déplacée durant un temps $l\Delta t/m$. Le schéma appliqué est celui d'Euler explicite.

Algorithme 5.4 Calcul du pas convectif avec schéma d'Euler et pas de temps divisé (EEPD)

Début

Pour $l = 0, \dots, m - 1$

Début

$$x_{l+1} = x_l + u_l^+ \frac{\Delta t}{m}$$

$$y_{l+1} = y_l + v_l^+ \frac{\Delta t}{m}$$

$$l = l + 1$$

Fin

$$x' = x_m$$

$$y' = y_m$$



Fin

5.1.5 Schéma d'Euler semi-implicite avec pas de temps divisé

Il est assez simple maintenant d'imaginer le couplage des algorithmes 5.3 (Euler semi-implicite) et 5.4 (Euler à pas divisé), chaque sous-déplacement pouvant être calculé itérativement. La composition finale des chemins serait alors très représentative de la course de la particule. Voici l'algorithme qui définit les opérations dans ce cas.

On note $(x_{l(k)}, y_{l(k)})$ la $k^{\text{ième}}$ itération pour le calcul du $l^{\text{ième}}$ sous pas de temps $\Delta t/m$.

Algorithme 5.5 Calcul du pas convectif avec schéma itératif d'Euler et pas de temps divisé (ESIPD)

Début

Pour $l = 0, \dots, m - 1$

Début

$$\Delta x_l = u_l^+ \frac{\Delta t}{m}$$

$$\Delta y_l = v_l^+ \frac{\Delta t}{m}$$

$$x_{l+1} = x_l + \Delta x_l$$

$$y_{l+1} = y_l + \Delta y_l$$

$$k = 1$$

$$Distance = 2 + \epsilon$$

Tant que $Distance \geq \epsilon$

Début



$$\Delta x_{l(k)} = u_{l(k)}^+ \frac{\Delta t}{m}$$

$$\Delta y_{l(k)} = v_{l(k)}^+ \frac{\Delta t}{m}$$

$$x_{l+1(k+1)} = x_l + (1 - \alpha)\Delta x_l + \alpha\Delta x_{l(k)}$$

$$y_{l+1(k+1)} = y_l + (1 - \alpha)\Delta y_l + \alpha\Delta y_{l(k)}$$

$$Distance = \sqrt{(x_{l+1(k+1)} - x_{l+1(k)})^2 + (y_{l+1(k+1)} - y_{l+1(k)})^2}$$

$$k = k + 1$$

Fin

$$x_{l+1} = x_{l+1(k)}$$

$$y_{l+1} = y_{l+1(k)}$$

$$l = l + 1$$

Fin

$$x' = x_m$$

$$y' = y_m$$

Fin

Il est également possible d'intégrer un schéma de Runge-Kutta à l'intérieur des algorithmes 5.3 et 5.4. Les différents algorithmes exposés ici ont été dûment testés et les résultats de ces tests seront introduits à la section 7.1.

5.2 Convection par déplacement d'un maillage d'éléments finis

Au chapitre 3, nous avons mentionné le principe du *déplacement de maillage*, grâce auquel le calcul du pas convectif est réalisé. Le déplacement du maillage a lieu avant la simulation proprement dite. Cette section décrit plus précisément les techniques utilisées pour effectuer ce déplacement. Nous

commencerons par décrire quelques bases de la méthode d'interpolation par éléments finis car la procédure qui préside au calcul convectif y est intimement liée. Puis, nous aborderons la méthode du déplacement elle-même.

5.2.1 Caractéristiques de la méthode d'interpolation par éléments finis

Le maillage est la structure qui supporte l'information reliée à l'hydrodynamique du milieu, information nécessaire à la simulation du transport d'un contaminant. Il s'agit dans notre cas d'une grille de type éléments finis à deux dimensions. Le maillage est constitué d'une famille d'éléments triangulaires à six noeuds (**T6**) que l'on subdivise pour les fins du calcul de la convection en quatre triangles à trois noeuds (**T3**) (voir la figure 5.4).

Nous n'aborderons pas ici l'utilisation des éléments finis pour la résolution eulérienne d'équations aux dérivées partielles comme le modèle hydrodynamique. Nous nous concentrerons plutôt sur l'aspect géométrique de la méthode, en particulier, sur l'interpolation des variables (incluant la position d'un point).

Les éléments de type **T3** comportent trois sommets appelés *noeuds* lesquels portent les données hydrodynamiques du problème (variables nodales). Pour un élément donné, les sommets seront désignés conventionnellement dans le sens anti-horaire S_1 , S_2 et S_3 . Chacun a une position (x_i, y_i) dans un système de coordonnées déterminé.

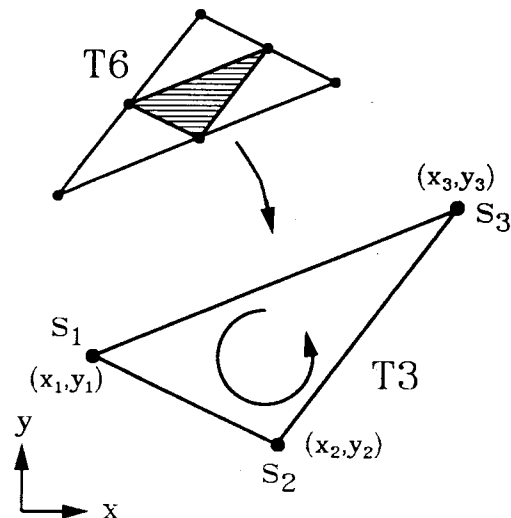


Figure 5.4.
Transformation de l'élément triangulaire
T6 en quatre T3 et numérotation des
noeuds



Une première propriété d'un élément est la possibilité de définir tout point (x, y) du plan comme une combinaison linéaire des coordonnées des trois sommets, c'est-à-dire:

$$\begin{aligned}(x, y) &= \lambda_1 S_1 + \lambda_2 S_2 + \lambda_3 S_3 \\ &= \lambda_1(x_1, y_1) + \lambda_2(x_2, y_2) + \lambda_3(x_3, y_3)\end{aligned}\quad [5.4]$$

Cette équation décrit une coordonnée par rapport à trois sommets. Si les sommets ne forment pas un triangle dégénéré, les λ_i définissent d'une façon unique la position (x, y) . Par conséquent, les λ_i sont des fonctions de (x, y) .

$$\lambda_i = \lambda_i(x, y)$$

Pour un point (x, y) donné, on calcule la position relative en résolvant un système algébrique de dimensions $[3 \times 3]$ qui suit:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ y_1 & y_2 & y_3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} x \\ y \\ 1 \end{Bmatrix}\quad [5.5]$$

Ce faisant, on satisfait toujours l'égalité suivante qui constitue la première équation du système [5.5]:

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 1$$

De plus, si le point (x, y) se trouve à l'intérieur du triangle délimité par les sommets S_1 , S_2 et S_3 , on a:

$$0 \leq \lambda_i \leq 1; \quad i = 1, 2, 3 \quad [5.6]$$

En fait, les λ_i sont des coefficients d'interpolation linéaire de Lagrange. Ils dépendent de la position (x, y) et représentent le poids relatif de chaque sommet de l'élément pour cette position.

Ainsi, si l'on connaît la position relative λ_i , $i = 1, 2, 3$ d'un point (x, y) dans un élément, et que cet élément porte sur ses sommets une information nodale, par exemple le champ de vitesse $V = (u, v)$, on peut interpoler linéairement ce champ de vitesse au point (x, y) en posant:

$$V(x, y) = \lambda_1 V(x_1, y_1) + \lambda_2 V(x_2, y_2) + \lambda_3 V(x_3, y_3)$$

Ou encore,

$$u(x, y) = \lambda_1 u_1 + \lambda_2 u_2 + \lambda_3 u_3$$

$$v(x, y) = \lambda_1 v_1 + \lambda_2 v_2 + \lambda_3 v_3$$

De même pour les autres variables nodales du modèle ($H, D, h, h', \text{etc.}$).

5.2.2 Déplacement du maillage

Le calcul du déplacement du maillage est effectué en considérant chaque sommet de la grille d'éléments **T3** comme une particule. On transporte ces noeuds dans le champ de vitesse durant le pas de temps Δt à l'aide d'un des schémas décrits à la section 5.1 (Algorithmes de calcul du pas convectif).

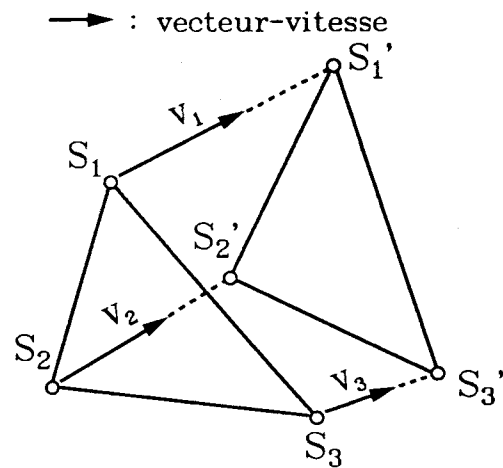


Figure 5.5.

Déplacement du maillage pour le calcul du pas convectif

Après ce pas de temps, chaque sommet d'un élément a une nouvelle position:

$$S' = (x', y')$$

Notre but est de reconstituer un second maillage à partir de ces sommets déplacés. Tous les sommets d'un élément sont déplacés si le champ de vitesse local est non-nul. Le regroupement des éléments à leur position d'arrivée constitue le *maillage déplacé*.



5.2.3 Interpolation des variables sur le maillage déplacé

Pour utiliser le maillage déplacé, il faut interpoler les données du modèle hydrodynamique à la position d'arrivée du maillage, plus exactement, de chacun de ses sommets. Quelques situations peuvent se produire; le sommet retombe soit:

- à l'intérieur du domaine mouillé et du maillage de départ;
- dans le domaine mouillé mais hors du maillage;
- ou encore, dans le domaine découvert et à l'intérieur du maillage.

Bien sûr, la position d'arrivée des noeuds doit être repérée dans le maillage de départ ce qui signifie que l'on doit déterminer à quel élément de la grille de départ le noeud appartient à son arrivée. Ce problème qui a été introduit au chapitre 3 sera traité en détail à la section suivante car il implique également la prise en compte du pas dispersif.

Sommet à l'intérieur du domaine mouillé et du maillage de départ. Considérons le cas où le sommet retombe dans un élément donné du maillage de référence (maillage au départ). Cet élément est déterminé par une opération de repérage (section 5.3.1: Repérage des noeuds et des particules). Avec sa position (x', y') et les coordonnées $(x_i, y_i; i = 1, 2, 3)$ des sommets de cet élément, on résout le système [5.5] pour obtenir les coefficients d'interpolation de Lagrange λ_i du point. Connaissant ces coefficients, il devient simple d'interpoler en (x', y') tous les attributs désirés.

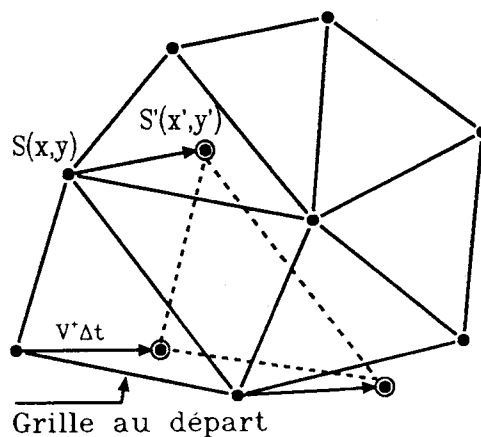


Figure 5.6.

Interpolation des attributs du modèle hydrodynamique pour le maillage déplacé

- Grille à l'arrivée
- Noeuds au départ
- ⊙ Noeuds à l'arrivée



Sommet dans le domaine mouillé mais hors du maillage. Considérons maintenant la situation où le sommet retombe dans l'eau, mais à l'extérieur du maillage. Ce cas arrive lorsque l'on est en bordure aval (frontière ouverte) du maillage.

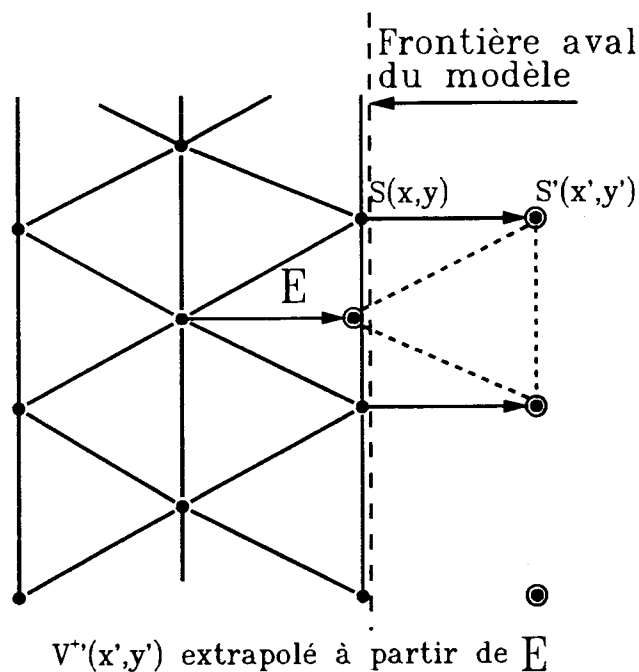


Figure 5.7.

Cas du sommet sortant du domaine de simulation à une frontière ouverte

Il est possible d'extrapoler les caractéristiques hydrodynamiques, exactement de la même façon qu'on les interpole lorsque le sommet se retrouve dans un élément. La seule différence est que la relation [5.6] n'est pas vérifiée. En effet, un ou deux des coefficients λ_i peuvent se retrouver avec une valeur négative ou supérieure à 1. Le total reste cependant égal à 1. Il s'agit dans ce cas d'une opération d'extrapolation.

Il faut cependant choisir l'élément à partir duquel cette extrapolation s'effectue. On prendra simplement l'élément le plus rapproché en moyenne, ceci afin de minimiser l'imprécision du calcul. En effet, l'erreur croît en fonction de la distance aux points de référence.

Il est bon de noter ici que si des particules se retrouvent dans cette région du maillage lors de la simulation, il est plus que probable qu'elles en sortent assez rapidement. Il ne sera donc pas nécessaire de rechercher une très grande précision dans l'extrapolation des caractéristiques hydrodynamiques. On exigera seulement d'elles que lors du déplacement convectif, on ne retrouve pas d'aberration qui fasse qu'une particule remonte le courant.



Sommet hors du domaine mouillé mais dans le maillage. Si au départ le sommet n'est pas recouvert d'eau, il n'y a pas de problème. Il n'est simplement pas déplacé et il retrouve ses attributs initiaux, théoriquement tous nuls.

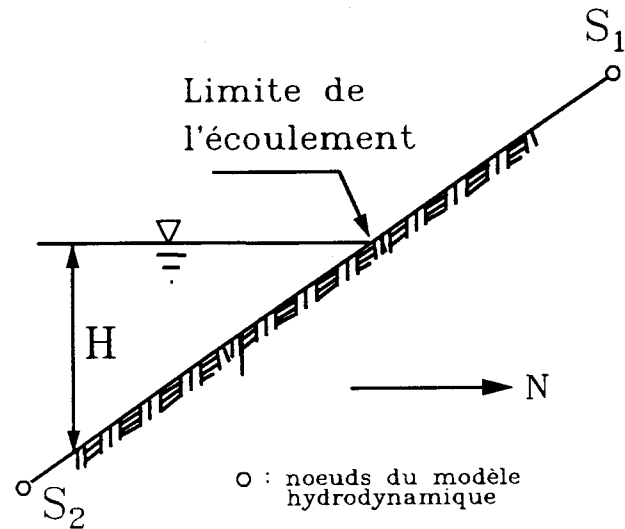
Si le sommet est près de la berge, peut-il se retrouver hors du domaine mouillé? Théoriquement, non. Pour répondre à cette question de manière détaillée, on doit revenir à ce qui conditionne le transport convectif, le champ de vitesse apparent (u^+, v^+) . Considérons le déplacement en N (direction normale à la frontière).

$$\Delta x_N = u_N^+ \Delta t \equiv \left(u_N + \frac{D}{H} \frac{\partial H}{\partial N} + \frac{\partial D}{\partial N} \right) \Delta t \quad [5.7]$$

La figure 5.8 montre une coupe transversale de la berge. Un déplacement trop prononcé des noeuds dans la direction N ferait sortir le sommet S_2 .

Figure 5.8.

Déplacement des sommets à la limite du domaine mouillé



Pour que le noeud demeure à l'intérieur du domaine mouillé, il faut que la somme des termes de la relation [5.7] soit nulle, ce qui est obtenu par définition si chacun des termes est négatif ou encore, que un ou deux termes soient négatifs si les autres sont nuls. Prenons une par une les parties de l'équation.



La vitesse u_N est soit nulle, soit négative, sinon il y aurait une perte de masse, et l'équation de continuité ne serait pas vérifiée au niveau de l'élément. De plus, dans le modèle hydrodynamique, les vitesses près des frontières latérales tendent toujours à adopter la direction tangentielle à la berge justement pour respecter la continuité.

De même, le second terme est négatif. Par convention, la profondeur H est toujours positive et D l'est aussi par définition. $\partial H / \partial N$ est dans ce cas négatif car la profondeur diminue en N . Il est possible de montrer que le dernier terme est lui aussi soit nul, soit négatif, en le développant à partir des équations du coefficient de dispersion [2.51] et [2.53].

Le déplacement convectif résultant en N sera donc soit nul, soit négatif, ce qui éloignera le noeud de la berge. L'interpolation du champ de vitesse devrait donc s'effectuer normalement comme dans le cas où le noeud retombe dans le maillage.

5.2.4 Utilisation du maillage déplacé dans le déplacement des particules (pas convectif)

Au temps t de la simulation, une particule se retrouve dans un élément déterminé par le repérage. La coordonnée (x_p, y_p) de la particule est une combinaison linéaire de la position des trois sommets de cet élément.

$$(x_p, y_p) = \lambda_1 S_1 + \lambda_2 S_2 + \lambda_3 S_3 \quad [5.8]$$

Cette particule est maintenant transportée par le champ de vitesse apparent sur un pas de temps Δt . Supposons que le schéma de transport utilisé est du type Euler, la position (x_p', y_p') est :

$$x_p' = x_p + u^+(x_p, y_p) \Delta t,$$

$$y_p' = y_p + v^+(x_p, y_p) \Delta t$$

Comme nous ne connaissons pas le champ de vitesse en (x_p, y_p) , il faut l'interpoler à partir des sommets S_i , on a donc :

$$x_p' = x_p + [\lambda_1 u^+(x_1, y_1) + \lambda_2 u^+(x_2, y_2) + \lambda_3 u^+(x_3, y_3)] \Delta t, \quad [5.9a]$$

$$y_p' = y_p + [\lambda_1 v^+(x_1, y_1) + \lambda_2 v^+(x_2, y_2) + \lambda_3 v^+(x_3, y_3)] \Delta t. \quad [5.9b]$$



Ce déplacement revient cependant exactement au même si on interpole directement la position finale des sommets déplacés S_i' . Le calcul du mouvement convectif étant dans ce cas effectué avec schéma d'Euler, la position des sommets déplacés est:

$$S_i' = (x_i + u_i^+ \Delta t, y_i + v_i^+ \Delta t) \quad i = 1, 2, 3.$$

Si on interpole (x_p', y_p') à l'aide des λ_i de l'équation [5.8], on trouve:

$$(x_p', y_p') = \lambda_1 S_1' + \lambda_2 S_2' + \lambda_3 S_3' \quad [5.10]$$

En développant pour x , on a:

$$\begin{aligned} x_p' &= \lambda_1(x_1 + u_1^+ \Delta t) + \lambda_2(x_2 + u_2^+ \Delta t) + \lambda_3(x_3 + u_3^+ \Delta t) \\ &= \lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2 + \lambda_3 x_3 + \lambda_1 u_1^+ \Delta t + \lambda_2 u_2^+ \Delta t + \lambda_3 u_3^+ \Delta t \\ &= x_p + (\lambda_1 u_1^+ + \lambda_2 u_2^+ + \lambda_3 u_3^+) \Delta t \end{aligned}$$

Et on retombe sur l'équation [5.9a]. Ce qui vient d'être démontré pour le schéma d'Euler est aussi vrai pour tous les schémas introduits à la section 5.1. Ceci vient du fait qu'une particule située dans un élément est directement reliée à ses sommets par les coefficients de Lagrange.

Le calcul du transport de chaque particule suit les étapes suivantes :

- 1- Connaissant (x_p, y_p) et (x_i, y_i) résoudre le système [5.5];
- 2- Poser $(x_p', y_p') = \lambda_1 S_1' + \lambda_2 S_2' + \lambda_3 S_3'$.

Le calcul du déplacement de la particule se fait uniquement par rapport aux sommets S_i et S_i' de l'élément où elle se situe. L'effort lors de la simulation est donc indépendant du schéma utilisé pour la déformation du maillage. C'est pour cette raison que nous avons introduit différents algorithmes. Ceux-ci calculent avec plus de précision le déplacement advectif, sans augmenter l'effort de calcul lors de la simulation.

Optimisation du calcul. Il est encore possible de gagner du temps lors de la simulation. A l'étape 1, il faut résoudre le système [5.5]; on peut accélérer cette résolution en factorisant la matrice des coefficients en 2 matrices triangulaires :



$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ y_1 & y_2 & y_3 \end{bmatrix} \quad [5.11]$$

ou encore,

$$[L][U] \equiv [X_n] \quad [5.12]$$

Cette factorisation peut se faire avant la simulation, puisque les coefficients de la matrice ne dépendent que de la position des sommets du maillage de référence.

Voyons comment on utilise les matrices factorisées. En posant d'abord:

$$\{\lambda\} \equiv \begin{Bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \end{Bmatrix} \quad \text{et} \quad \{X\} \equiv \begin{Bmatrix} 1 \\ x \\ y \end{Bmatrix} \quad [5.13]$$

on a:

$$[L][U]\{\lambda\} = \{X\} \quad [5.14]$$

qu'on transforme ainsi:

$$[L]^{-1}[L][U]\{\lambda\} = [L]^{-1}\{X\} \quad [5.15]$$

qui devient:

$$[U]\{\lambda\} \equiv [U]\{\lambda\} = [L]^{-1}\{X\} \equiv \{T\} \quad [5.16]$$

où,

$\{T\}$: un vecteur-tampon.

Le vecteur-tampon $\{T\}$ est obtenu facilement en résolvant le membre de droite puis, il est introduit comme second membre du système qui reste pour donner le vecteur $\{\lambda\}$ recherché:

$$[U]\{\lambda\} = \{T\} \quad \text{et} \quad \{\lambda\} = [U]^{-1}\{T\} \quad [5.17]$$



La résolution du système [5.5] se limitera alors à une descente et une remontée triangulaires. Ces opérations exigent moins de calculs que la résolution proprement dite. On aura alors sauvé du temps, surtout si plusieurs particules passent par les mêmes éléments, la factorisation ayant été faite une fois pour toutes.

5.3 Couplage de la convection et de la dispersion

Les algorithmes de déplacement convectif d'une particule, on l'a vu, sont appliqués dans un premier temps au déplacement de la grille d'éléments finis. Une fois la *grille déplacée* obtenue, on peut procéder au calcul du mouvement des particules. Il est clair que c'est la mouvement moyen qui est décrit par ce procédé.

L'ajout du mouvement dispersif est effectué à la toute fin du pas convectif. Le couplage du pas convectif et du pas dispersif donne la position finale des particules. Ce processus est basé sur le principe d'additivité des deux mouvements.

Deux aspects complémentaires au couplage paraissent importants: le repérage des particules et l'évaluation du coefficient de dispersion sur le chemin de la particule. Le repérage du point d'arrivée d'une particule sur la grille de départ permet de connaître la nouvelle position initiale de la particule et, par conséquent, les conditions hydrodynamiques qui s'y trouvent pour le calcul du pas suivant (figure 3.1). Le repérage du point d'arrivée d'un noeud est, de son côté, essentiel pour l'application des algorithmes de nature implicite que l'on a vus dans ce chapitre. Le repérage des particules et la localisation des noeuds de la grille en déplacement posent exactement le même problème. Nous avons choisi de traiter cet aspect ici mais nous aurions aussi bien pu l'introduire dans la section précédente 5.2 (Convection par déplacement d'un maillage d'éléments finis).

5.3.1 Repérage des noeuds et des particules

Lorsqu'une grille d'éléments finis est utilisée, le principal problème posé par le calcul du déplacement est celui du repérage (noeuds du modèle et particules elles-mêmes). Un repérage direct sur ce type de grille est un procédé laborieux qui risque de compromettre les gains obtenus sur les autres aspects de l'approche. Il est nettement plus avantageux de localiser un point à partir d'une grille orthogonale et régulière. Il a été choisi d'utiliser un procédé mixte mettant à profit les avantages des deux méthodes.



Le repérage des noeuds de la grille s'effectue à chaque itération du processus itératif de calcul si l'algorithme comporte un aspect implicite. Plusieurs repérages peuvent donc être nécessaires lors du calcul du déplacement de la grille.

De son côté, le mouvement des particules ne requiert aucun processus itératif. Le calcul est accompli en deux étapes: le pas convectif, puis le pas dispersif. Le pas dispersif introduit une déviation aléatoire par rapport à une ligne de courant. Suite à ce calcul, le repérage des particules est nécessaire pour déterminer à quel élément du modèle hydrodynamique elles appartiennent maintenant et continuer ainsi la simulation au pas suivant. Le repérage est nécessaire à chaque pas de temps.

Trois aspects seront abordés ici: la restriction des calculs à un sous-domaine d'intérêt, l'algorithme de repérage utilisé et le cas particulier où une particule sortirait du domaine mouillé suite au pas dispersif.

Zone de simulation. La zone de simulation de la propagation d'un soluté est nécessairement englobée par le domaine de simulation hydrodynamique. En effet, la disponibilité de données hydrodynamiques est nécessaire au calcul du mouvement des particules mais pas l'inverse. Par ailleurs, plusieurs zones d'intérêt n'ont qu'une portée locale (typiquement, de une à quelques dizaines de kilomètres en aval des effluents) et ne requièrent pas la mobilisation de toute la base de données hydrodynamiques pour la réalisation des simulations de concentrations. Il est donc judicieux de circonscrire aussi étroitement que possible la zone de simulation et d'y restreindre les calculs. Seules les données comprises à l'intérieur de ce sous-domaine sont conservées pour le calcul lagrangien (figure 5.9).

Le repérage n'est donc effectué qu'à l'intérieur de la zone de simulation. Toute particule qui en sort est considérée (en régime permanent) comme sortie du domaine d'intérêt et est ignorée pour la suite des calculs.

De plus, la zone de simulation est définie par un rectangle orienté principalement dans le sens du courant afin de minimiser la quantité de données qui seront retenues pour les calculs.

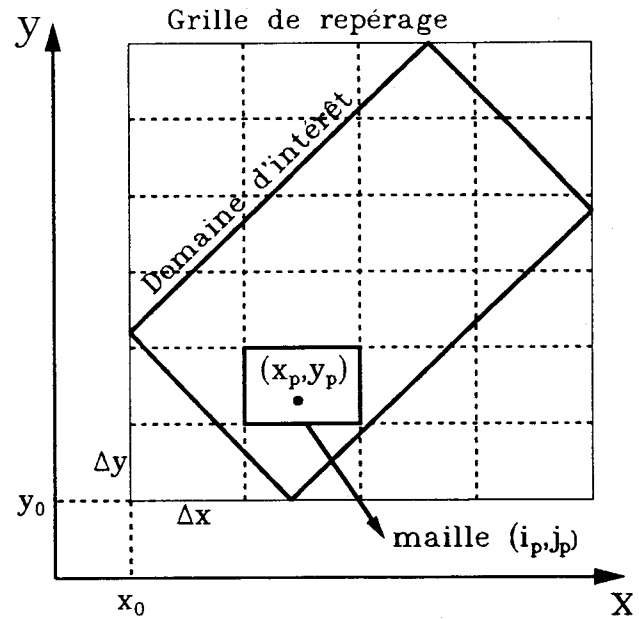


Figure 5.9.
Définition de la zone de simulation
et de la grille de repérage

Grille de repérage. Une grille de repérage est appliquée par-dessus la zone de simulation et l'englobe complètement (figure 5.9). Cette grille est parallèle au système de coordonnées globales. Chaque maille est identifiée par deux indices entiers définis comme suit:

$$i = \left[\frac{x_{est} - x_0}{\Delta x} \right] + 1$$

$$j = \left[\frac{y_{sud} - y_0}{\Delta y} \right] + 1$$

où:

- []: la partie entière du nombre;
- (x_0, y_0) : les coordonnées de l'origine de la grille de repérage;
- x_{est} : l'abscisse du coin est de la maille de repérage;
- y_{sud} : l'ordonnée du coin sud de la grille de repérage;
- $(\Delta x, \Delta y)$: les incréments en x et y de la maille.

Le repérage d'une particule dans la grille est effectué facilement en appliquant la même relation à sa position (x_p, y_p) . Ainsi:



$$\begin{aligned} i_p &= \left[\frac{x_p - x_0}{\Delta x} \right] + 1 \\ j_p &= \left[\frac{y_p - y_0}{\Delta y} \right] + 1 \end{aligned} \quad [5.18]$$

où:

(i_p, j_p) : la maille à laquelle appartient la particule.

La localisation d'un noeud de la grille d'éléments finis s'accomplit strictement de la même façon.

Une fois ce premier repérage effectué, il reste à déterminer à quels éléments de la grille triangulaire le point appartient. Quelle que soit sa taille, la maille de repérage peut théoriquement recouper plus d'un élément triangulaire. Elle peut même en recouper plusieurs si elle comprend un noeud-sommet (figure 5.10).

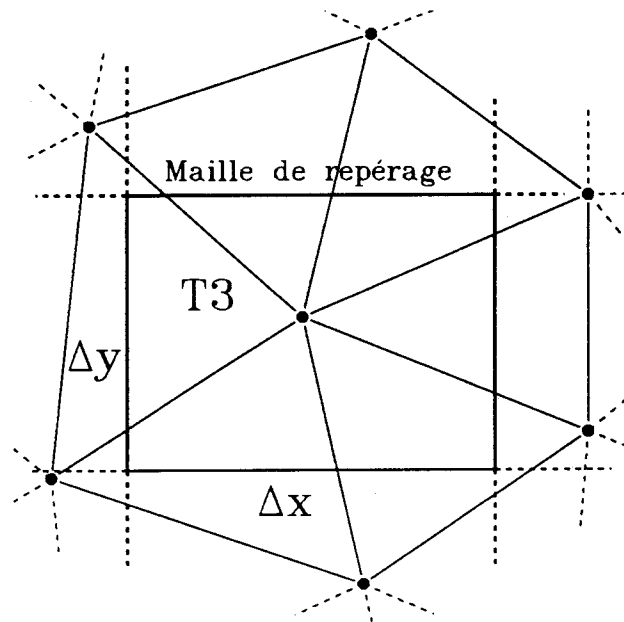


Figure 5.10.

Recoupement de plusieurs éléments T3 par une maille de repérage

Si à chaque maille est associée une liste pré-établie des éléments recoupés, il est assez simple de déterminer à quel élément un point appartient. En effet, on parcourt cette liste et on trouve pour chaque élément les coefficients de Lagrange correspondant à la position (x_p, y_p) . Lorsque les coefficients sont tous compris entre 0 et 1, l'élément est trouvé. L'établissement de la liste s'effectue



en parcourant les noeuds de la grille d'éléments finis et en procédant à leur repérage. Puisqu'on connaît les éléments auxquels les noeuds participent, la liste est aisément constituée. Mentionnons que celle-ci peut être sauvegardée et servir à des simulations ultérieures.

Le choix de la taille des pas de maille de repérage ($\Delta x, \Delta y$) doit assurer qu'elles ne recoupent pas trop d'éléments. On cherche donc à utiliser la maille la plus petite possible. Il n'est cependant pas souhaitable de d'augmenter indéfiniment la finesse de la grille car, ce faisant, on encombre l'espace mémoire de l'ordinateur.

Particule sortant du domaine mouillé. Suite au pas dispersif, il est possible qu'une particule sorte du domaine mouillé. Dans ce cas, la particule fait l'objet d'un nouveau tirage aléatoire jusqu'à ce qu'elle retombe à l'intérieur de l'écoulement. Cette approche a été préférée à celle, plus classique, consistant à réfléchir la particule sur la frontière. Cette dernière méthode est plus difficile à implanter dans un modèle couvrant-découvrant en plus de ne pas garantir de meilleurs résultats.

Le diagnostic pour déterminer si la particule est sortie du domaine mouillé est semblable à celui utilisé pour déterminer l'état d'un noeud dans le modèle hydrodynamique, c'est-à-dire, une comparaison du niveau d'eau sur l'élément et de la cote bathymétrique du noeud. Lorsque le niveau d'eau est inférieur à cette cote, le noeud est exondé. Dans le cas d'une particule, le diagnostic est le suivant: lorsque le niveau d'eau sur l'élément est inférieur à la cote bathymétrique au point d'arrivée de la particule (x_p, y_p) , i.e.:

$$\text{Si } \bar{h}(\text{noeuds mouillés}) \leq h'(x_p, y_p) \text{ alors } \rightarrow \text{ particule exondée}$$

Et un nouveau tirage aléatoire est effectué.

5.3.2 Evaluation des coefficients de dispersion sur une ligne de courant

S'il est logique et plus précis de tenir compte du parcours pour le calcul de la convection, il est conséquent d'estimer le coefficient de dispersion en tenant compte de son évolution sur le chemin parcouru. Ainsi, dans le pas dispersif, au lieu d'une valeur du coefficient D estimée au point de départ (x_0, y_0) seulement, une valeur pondérée par la méthode d'Euler semi-implicite est utilisée.

$$\bar{D}_\alpha = (1 - \alpha)D(x_0, y_0) + \alpha D(x', y') \quad [5.19]$$



Cette façon de procéder permet de mieux intégrer l'information fournie par la simulation hydrodynamique. De plus, la durée de la portion dispersive de la simulation n'est pas affectée, mais sa précision s'en trouve améliorée.

La précision du calcul du coefficient de dispersion peut encore être améliorée en utilisant un algorithme à pas divisé. Il suffit de suivre le principe introduit précédemment et d'établir la moyenne du coefficient de dispersion sur le chemin suivi par la particule.

$$\overline{D}_m = \frac{(D_0 + D_1 + \dots + D_m)}{m + 1} \quad [5.20]$$

Cette moyenne est plus représentative de la turbulence rencontrée en chemin.



6 CALCUL DE LA CONCENTRATION

La méthode de marche au hasard, contrairement aux approches eulériennes, ne produit pas directement des résultats de concentration. Elle génère plutôt une distribution de particules à partir de laquelle on doit calculer la concentration. Après avoir examiné la méthode classique de calcul des concentrations à partir d'une grille régulière et en avoir identifié les faiblesses, la technique retenue, variable dans l'espace, évolutive et centrée sur la particule sera exposée.

6.1 Méthode de calcul classique avec une grille régulière

Le calcul classique de la concentration s'effectue selon le principe d'usage suivant. On divise la quantité de contaminant qui se trouve dans un certain volume par ce même volume. Dans notre cas par exemple, il s'agirait de dénombrer les particules dans une portion du domaine de simulation en tenant compte de la profondeur.

Traditionnellement, en modélisation bidimensionnelle, le domaine de simulation est découpé en mailles carrées de taille régulière. La concentration est évaluée à chacune des mailles en dénombrant les particules qui s'y trouvent. La somme est divisée par le volume de liquide que cette surface recouvre et par le nombre total de particules de la simulation. Le résultat est multiplié par la totalité de la masse injectée. Ici, la division de la masse totale injectée par le nombre de particules de la simulation donne la masse de contaminant véhiculée par chacune des particules. Le volume est estimé à partir de la profondeur moyenne sous la maille (figure 6.1).

$$C_i = \frac{M n_i}{N V_i}$$

$$\text{avec } V_i = \bar{H}_i \Delta x \Delta y$$

où:

- C_i : la concentration de soluté sur la maille i ;
- $\bar{H}_i$: la profondeur moyenne de la maille;
- M : la masse totale de contaminant (charge) injectée durant la simulation;
- n_i : le nombre de particules dans la maille considérée;
- N : le nombre total de particules injectées.

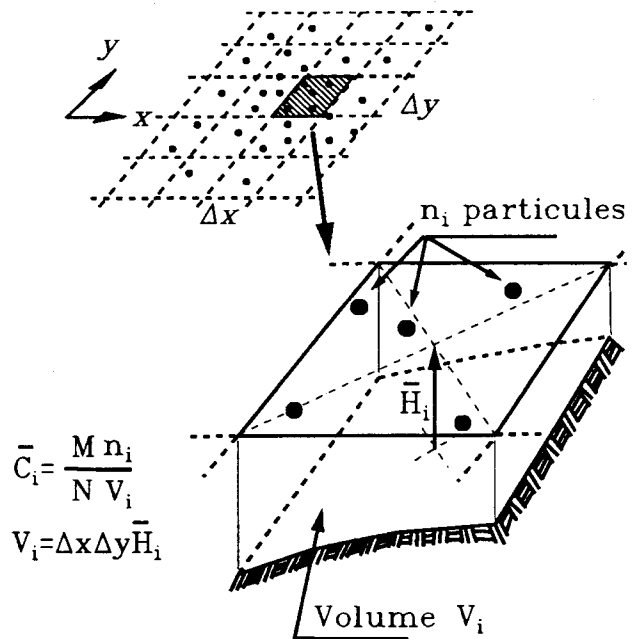


Figure 6.1.
Calcul de la concentration sur une grille régulière

Implicitement, les particules sont donc considérées comme distribuées uniformément dans le volume que surplombe une maille et la concentration calculée est constante pour la maille entière. Le résultat est donc discontinu à la frontière des mailles. L'application d'une technique de lissage ou de contourage peut cependant redonner un résultat continu dans l'espace. Le principal avantage de la méthode est la facilité de repérage et de décompte des particules dans la grille de calcul.

6.1.1 Problèmes de la grille régulière

Tel que mentionné au chapitre 3, la procédure de la grille régulière est simple mais comporte une grande faiblesse; en effet, la concentration calculée dépend de la grandeur des mailles. Le découpage du domaine en petites surfaces est sensé délimiter uniquement des zones de calcul. Cependant la dimension de ces zones influence significativement les résultats.

En effet, lorsqu'une particule se retrouve dans le volume délimité par une maille (cellule), elle n'agit plus qu'à l'intérieur de cette cellule. Lorsque celle-ci est grande ou petite, la masse de contaminant représentée par la particule est diluée respectivement dans un grand ou un petit volume. La concentration, on le voit, dépend de la façon dont le calcul s'effectue. D'autres inconvénients reliés à la continuité du champ de concentration surviennent en fonction de la densité du nuage de particules.



Voici deux situations caractéristiques où le choix du pas de grille intervient de manière indésirable dans le relief des concentrations.

Maille trop petite, oscillations dans la distribution de la concentration. Un pas de grille trop petit augmente la discontinuité du champ de concentration. Par exemple, supposons que la grille est constituée de carrés de 10 mètres par 10 mètres, qu'une de ces cellules contienne 19 particules et que la profondeur y soit constante. La concentration dans cette maille est :

$$\frac{M}{N} = \frac{19}{100H}$$

En choisissant un pas de 1 mètre, on subdivise cette maille en 100 sous-domaines. Dans la majorité de ces sous-maillles, la concentration est nulle car il y a au plus 19 carrés contenant une particule. Là où avant on trouvait une concentration constante donnée par l'équation précédente, se côtoient maintenant des concentrations nulles et des valeurs d'au moins :

$$\frac{M}{N} = \frac{1}{H}$$

Les valeurs non-nulles sont, on le voit, au moins 5 fois supérieures à celle obtenue dans l'autre cas. Evidemment, plus le pas diminue, plus la différence s'accroît car le volume dans lequel se dilue la particule se rétrécit lui aussi, et ce, quadratiquement. Le caractère discontinu du champ est amplifié par la petite taille des mailles. Ce comportement est illustré à la figure 6.2.

Maille trop grande, dispersion artificielle. D'un autre côté, dans une maille trop large, le poids d'une particule risque de devenir insignifiant. Par exemple, dans une zone de front de concentration, l'agrandissement du pas de calcul revient à écraser les nuances à la limite de ce front. En effet, à cet endroit, on *mélange* les particules à l'intérieur de l'emprise du panache avec un volume d'eau extérieur ne contenant pas de contaminant. On retrouve donc le problème qu'on cherchait à éviter en choisissant une approche lagrangienne, c'est-à-dire de la dispersion artificielle. Ce comportement est illustré à la figure 6.3.

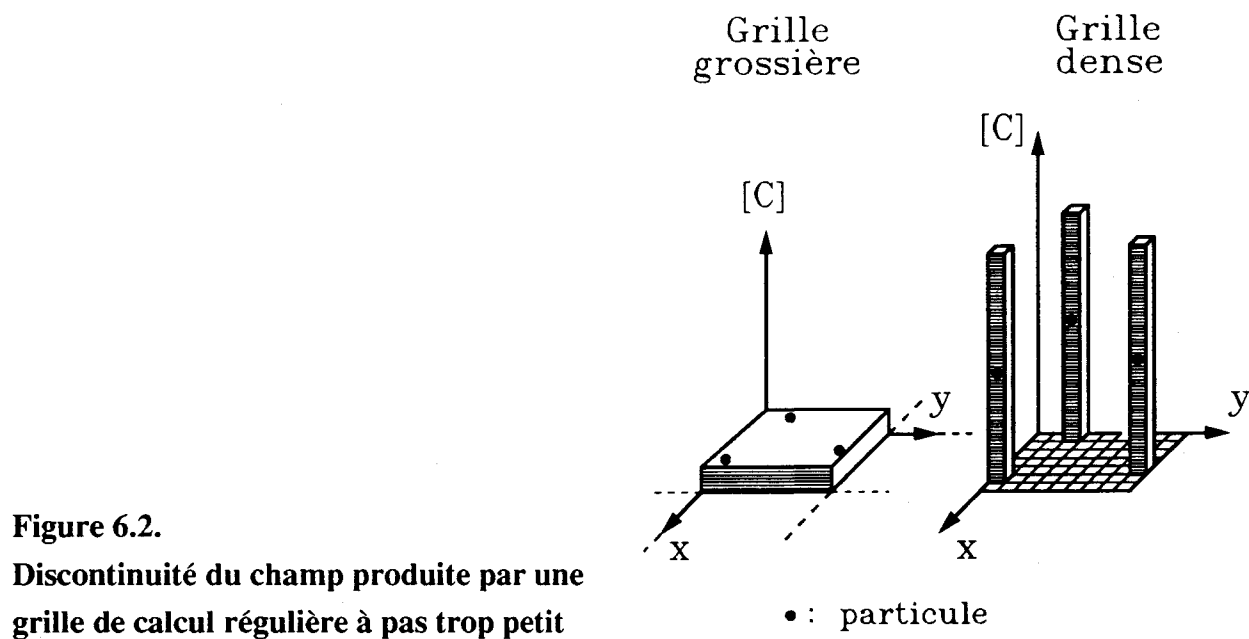


Figure 6.2.

Discontinuité du champ produite par une grille de calcul régulière à pas trop petit

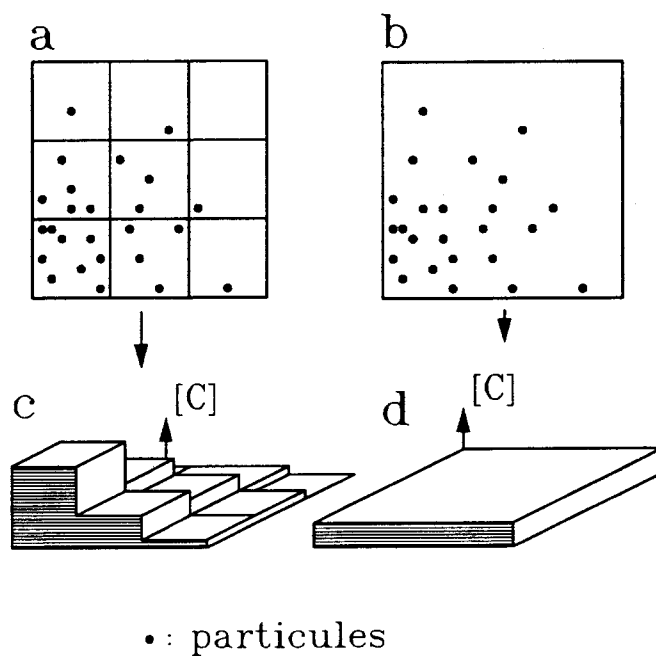


Figure 6.3.

Dispersion artificielle produite par une grille de calcul régulière à pas trop grand

6.2.1 Principe de la méthode

Considérons maintenant la position de la particule comme le centre de sa propre distribution de masse. En fonction de son âge (temps de parcours depuis l'injection), la distribution s'étale plus ou moins loin, en fonction de la zone d'influence de celle-ci, laquelle croît avec le temps. Il est dès lors possible de décrire l'influence d'une particule par une fonction analytique choisie en vue de mieux représenter le champ des concentrations (figure 6.4). Pour la présente étude, une distribution gaussienne a été retenue en raison de la similitude de cette fonction avec le processus diffusif lui-même.

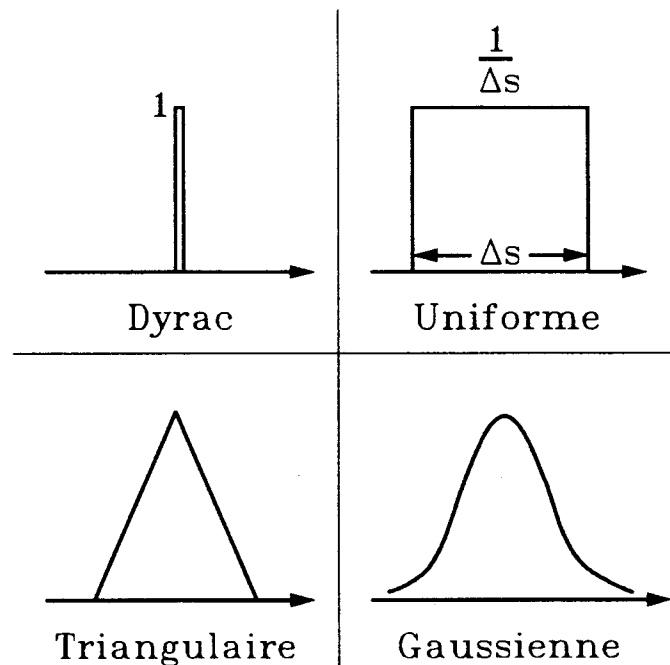


Figure 6.4.
Diverses fonctions de distribution unidimensionnelle de l'influence (ou emprise) d'une particule

Le calcul de la concentration en un point donné (x,y) s'effectue en sommant les effets des particules ayant une influence appréciable en ce point. L'effet de la particule dépend dorénavant de la distance qui la sépare du point considéré. Si l'on affecte un poids unitaire à la particule, le calcul de son influence locale en un point (x,y) de profondeur unitaire ($H = 1$) s'effectue comme suit:

$$I_p(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2} \exp \left(-\frac{1}{2} \left[\frac{(x_p - x)^2}{\sigma_1^2} + \frac{(y_p - y)^2}{\sigma_2^2} \right] \right) \quad [6.1]$$

où

$I_p(x,y)$: l'influence locale adimensionnelle de la particule;



6.1.2 Conséquences méthodologiques

On voit donc se dessiner les exigences suivantes concernant la grille de calcul des concentrations. Dans les régions où les particules se retrouvent en faible densité, il faut utiliser des mailles assez grandes pour éviter les discontinuités du champ de concentration.

Dans la zone de front et à la limite de l'emprise du panache, il faut recourir à une grille suffisamment fine pour capter ces limites. Il est cependant nécessaire d'agir avec minutie sinon, une trop grande finesse entraînerait une *fractalisation* de la concentration en raison du phénomène de discontinuité.

On voit que l'utilisation d'une grille régulière donne des résultats insatisfaisants à bien des égards. Une telle approche pourrait être modifiée en ayant recours à un pas variable dans l'espace, dépendant de l'endroit où le calcul s'effectue. Ce qui revient à dire que l'utilisation d'un maillage adaptatif serait plus appropriée. Mais cette solution, quoique possible techniquement, n'est pas réaliste.

Premièrement, en supposant que le pas de grille puisse être spécifié interactivement et graphiquement, le choix du pas de grille reste l'option personnelle de l'utilisateur, ce qui introduit un aspect arbitraire dans le calcul des concentrations.

De plus, le nuage de particules pouvant varier en fonction de chaque simulation, une grille spécifiquement ajustée à chaque cas devrait être produite et archivée afin d'assurer la consistance des résultats de simulations successives. La reproductibilité des résultats ne pourrait cependant être garantie d'un usager à l'autre.

Nous en sommes donc venus à considérer une technique faisant usage d'une zone d'influence centrée sur l'âge et la position de la particule plutôt que sur une grille de calcul déterminant arbitrairement les cellules de dilution. La section suivante expose les bases de cette technique.

6.2 Méthode de la zone d'influence des particules

Les problèmes que nous venons de démontrer sont associés à la relation artificielle, inhérente à la méthode de la grille régulière, entre les particules et le maillage de calcul des concentrations. Cela vient du fait que la zone d'influence d'une particule est directement définie par la taille de la cellule de calcul. Reconsidérons donc le problème sous l'angle de la zone d'influence ou de l'emprise de la particule.



σ_1 et σ_2 les écarts-types de la courbe de distribution selon les axes de coordonnées;

(x_p, y_p) la position de la particule.

La fonction de distribution a la propriété suivante:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} I_p(x, y) dx dy = 1$$

L'influence en concentration dépend de la masse de contaminant représentée par la particule et de la profondeur d'eau. En supposant que toutes les particules ont un poids équivalent (le cas d'un régime permanent d'injection), la masse de contaminant portée par une particule p est:

$$m_p = \frac{M}{N}$$

En considérant les courbes de distribution comme isotropes, i.e.,

$$\sigma = \sigma_1 = \sigma_2$$

et en tenant compte de la profondeur, l'équation 6.1 peut être transformée en concentration produite par une particule individuelle:

$$C_p(x, y) = m_p I_p(x, y) \times \frac{M}{N} \frac{1}{2\pi H \sigma^2} \exp\left(-\frac{1}{2} \left[\frac{(x_p - x)^2 + (y_p - y)^2}{\sigma^2} \right]\right) \quad [6.2]$$

La concentration totale de contaminant en un point est la somme des influences individuelles de toutes les particules du domaine de simulation:

$$C(x, y) = \sum_{p=1}^N m_p I_p(x, y)$$

Théoriquement, avec la distribution gaussienne, l'effet d'une particule se fait sentir à l'infini; cependant, l'influence devient numériquement négligeable à une distance d'environ trois à quatre σ considérée comme hors de l'emprise de la particule. En pratique, seules les particules à cette proximité du point de calcul sont considérées.



Avec le concept de zone d'influence, la grille de concentration est ramenée au seul rôle qu'on attend d'elle, c'est-à-dire, l'échantillonnage des concentrations sur un domaine. Pour une simulation donnée, le calcul de la concentration en un point (x,y) sera toujours consistant, même si le pas de la grille varie. Cependant, plus la grille sera fine, plus le nombre de points de calcul sera élevé, ce nombre augmentant quadratiquement avec le raffinement de la grille.

La diffusion numérique artificielle n'est pas éliminée par cette méthode, mais elle est dorénavant régie *explicitement* par la fonction de distribution des particules et leur zone d'emprise. On a donc eu un transport de ce problème, de la grille, à la particule. Le choix d'un rayon d'emprise trop grand risque de disperser plus qu'il ne faut la masse, tandis qu'une zone d'influence trop limitée rend les particules imperceptibles aux points de calcul.

On demeure donc avec le problème de décider quelle influence accorder aux particules. Une simulation de plusieurs heures dans un cours d'eau où la vitesse est de l'ordre du mètre par seconde, produit une emprise de panache de plusieurs kilomètres. A l'inverse, une injection de polluant dans une région de faibles vitesses peut mener, pour un même laps de temps, à une emprise limitée à quelques centaines de mètres. Des règles reliées au rapport entre le niveau de dispersion naturelle du milieu et la diffusion artificielle supplémentaire induite par la méthode peuvent être édictées comme on le verra au chapitre 7 (Tests).

6.2.2 Considérations temporelles

Pour aborder la question de l'emprise affectée à une particule, on peut faire intervenir l'âge de celle-ci (son temps de parcours). Cette considération sera également utile pour faire varier le débit massique de contaminant à l'émissaire de même que pour attribuer une cinétique non-conservative au contaminant porté par une particule.

Pour ce faire, l'âge doit être conservé comme attribut lors de la simulation tout comme la position de la particule. Dans un champ de vitesse permanent, cet attribut n'est pas nécessaire pour estimer l'évolution du champ de vitesse en un point quelconque. Il le deviendrait cependant dans un champ transitoire (exemple: les courants de marée).

Quand les particules sont injectées en un débit continu, le moment initial d'injection de chaque particule est un attribut important pour déterminer son âge au fil de la simulation:



$$t_p = t - t_{p0}$$

où

- t : le temps de la simulation;
 t_p : l'âge de la particule;
 t_{p0} : le moment initial d'injection.

Quand toutes les particules sont injectées au même moment (le cas de certains types de simulations), alors, il suffit de prendre:

$$t_p = t - t_0 \quad \text{avec} \quad t_0 = 0$$

6.2.3 Détermination de la zone d'influence ou emprise des particules

Comment faire intervenir l'âge t_p dans la fonction de distribution de masse des particules. Considérons chaque particule comme une micro-injection de contaminant; plus la particule est vieille, plus cette injection a eu le temps de s'étaler, tout comme le panache à l'échelle macroscopique. Ainsi, une même particule aura une emprise croissante en fonction de son âge. Dans une certaine mesure, on peut considérer qu'une proportion de la dispersion à grande échelle se produit à une échelle intermédiaire, typiquement d'un ordre de grandeur inférieure.

Numériquement parlant, une jeune particule aura une petite zone d'influence, tandis qu'une vieille occupera un plus grand volume. L'effet total demeure constant, c'est la distribution spatiale de l'influence qui varie. Dans le cas d'une fonction gaussienne, l'écart-type de l'emprise σ_p affectée devient une fonction croissant avec l'âge de la particule.

$$I_p(x, y, t) = \frac{1}{2\pi\bar{H}\sigma_p(t_p)^2} \exp\left(-\frac{1}{2}\left[\frac{(x_p - x)^2 + (y_p - y)^2}{\sigma_p(t_p)^2}\right]\right) \quad [6.3]$$

On note ici que l'impact total de la particule donné par:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi\bar{H}\sigma_p(t_p)^2} \exp\left(-\frac{1}{2}\left[\frac{(x_p - x)^2 + (y_p - y)^2}{\sigma_p(t_p)^2}\right]\right) dx dy = \frac{1}{\bar{H}}$$

ne dépend pas du poids qui lui a été initialement affecté dans la simulation, non plus que de son âge.



Concernant la valeur à donner au paramètre σ_p , on prend typiquement une valeur d'un ordre de grandeur inférieur à l'emprise locale du panache. L'influence de ce choix fera l'objet de tests au chapitre suivant.

6.3 Evolution des charges de contaminant

Comme pour l'influence variable affectée aux particules, la masse de contaminant portée par celles-ci peut également être considérée comme transitoire reflétant ainsi un débit d'injection variable dans le temps¹. La masse de contaminant portée par une particule au moment de son injection dans le milieu dépend à la fois du débit massique de contaminant et du débit particulaire.

$$m_p(t_{p0}) = \frac{Q_M(t_{p0})}{Q_p(t_{p0})} \equiv \frac{Q_M(t - t_p)}{Q_p(t - t_p)}$$

où

$Q_M(t_{p0})$: le débit massique de contaminant lors de l'injection de la particule;

$Q_p(t_{p0})$: la débit particulaire au même moment.

L'influence contaminante de chaque particule devient donc dépendante du débit variable de contaminant i et du débit de particules et ce, au moment de sa propre injection (t_{p0}) dans le milieu. Formellement, on a donc:

$$C_{pi}(x, y, t) = \frac{Q_{Mi}(t_{p0})}{Q_p(t_{p0})} I_p(x, y, t)$$

La concentration en un point et en un temps donnés d'un contaminant i est strictement la somme des influences des particules:

$$C_i(x, y, t) = \sum_{p=1}^N C_{pi}(x, y, t)$$

Comme mentionné précédemment, on ne retient en pratique que l'influence des particules à proximité.

¹ Fonctionnalité qui n'a pas été implantée dans la logiciel *PANACHE*, les données industrielles n'étant disponibles que sur une base journalière.



6.4 Panache unitaire

Si le débit de contaminant est constant, on retrouve une masse de contaminant uniforme par particule (le cas particulier implanté dans *PANACHE*), i.e.:

$$m_p = \frac{(M = Q_M T)}{(N = Q_p T)} = \frac{M}{N}$$

Dans un tel cas, il n'est pas nécessaire dans un premier temps d'attribuer un débit massique ou une étiquette au contaminant. Un contaminant quelconque peut être traité sans égard à sa nature et même à la masse totale injectée durant la simulation. En utilisant un débit massique de 1 kg/d¹, on obtient un panache dit *unitaire*. Alors, la concentration calculée est considérée comme unitaire elle-aussi. La masse correspondante de contaminant portée par une particule est égale à:

$$m_p' = \frac{1}{N} \times \frac{T}{1 \text{ jour}}$$

où

m_p' : la masse unitaire de la particule [kg];

T : la période de simulation en jours [d].

On a donc une influence unitaire de la particule calculée par:

$$C_p'(x, y, t) = I_p(x, y, t) \times \frac{T}{N}$$

où:

La concentration unitaire du panache est simplement la somme des influences unitaires des particules:

$$C'(x, y, t) = \sum_{p=1}^N C_p'(x, y, t) = \sum_{p=1}^N I_p(x, y, t) \frac{T}{N}$$

¹En pratique, il a été convenu d'utiliser un débit massique unitaire égal à 1 kilogramme par jour (1 kg/d). Ce choix est conforme aux unités utilisées pour caractériser les effluents industriels en Amérique du nord.



La concentration réelle d'un contaminant donné (désigné par l'indice i) injecté en régime permanent dans le milieu devient donc:

$$C_i(x, y, t) = Q_{Mi} \sum_{p=1}^N I_{pi}(x, y, t) \frac{T}{N} \quad [6.4]$$

où:

$C_i(x, y, t)$: la concentration réelle d'un contaminant i au point (x, y) au temps t ;

Q_{Mi} : le débit massique journalier du contaminant i [kg/d].

Ainsi, une seule simulation suffit pour le calcul de la concentration de plusieurs contaminants, si on connaît leur débit massique spécifique. Le panache simulé représente l'étalement de toute masse de contaminant injecté, quel qu'il soit, à condition que le processus soit stationnaire. Il suffira donc en pratique de simuler un panache en concentration unitaire dans un premier temps et de la transformer en concentration réelle dans un second temps, le résultat final étant linéairement dépendant du débit massique. L'économie de calcul est particulièrement intéressante dans ce cas.

6.5 Dynamique non-conservative d'un contaminant

Si le contaminant se comporte de manière non-conservative dans le milieu soit par dégradation biochimique ou microbiologique, par l'action d'une cinétique chimique ou autrement, la masse portée par une particule donnée varie en fonction du temps. On peut alors tenir compte de cette influence dans le modèle.

6.5.1 Fonction évolutive adimensionnelle

Si l'on décrit l'évolution de la masse de contaminant par la fonction suivante:

$$m_p(t_p) = m_p(t_{p0}) \Phi(\alpha_{ij}, t_p) = m_{p0} \Phi(\alpha_{ij}, t_p) \quad [6.5]$$

où:

$\Phi(\alpha_{ij}, t_p)$: une fonction évolutive adimensionnelle;

α_{ij} : les paramètres j de la fonction pour un contaminant i .

La fonction évolutive est égale à 1 au moment de l'injection (t_{p0}) de la particule. Les paramètres qui la décrivent peuvent être constants ou fonction du temps de parcours de la particule elle-même:



$$\alpha_{ij} = \alpha_{ij}(t_p)$$

Si le paramètre varie dans le temps, il faut incorporer l'influence cinétique sur le contaminant durant la simulation. Si les paramètres sont constants durant la simulation, l'influence cinétique sera simplement introduite à la fin de la simulation ce qui est beaucoup plus simple à faire. La prise en compte est alors simplement analytique tout comme l'influence spatiale de la particule. Seule la valeur analytique de la fonction évolutive à la fin de la simulation est requise. On aura donc dans le cas le plus général d'un débit massique variable de contaminant i soumis à une cinétique quelconque la concentration suivante au point (x,y) au temps t .

$$C_i(x, y, t) = \sum_{p=1}^N \frac{Q_{Mi}(t_{p0})}{Q_p(t_{p0})} \Phi_i(t_p) I_p(x, y, t) \quad [6.6]$$

Ici encore, si le débit de contaminant est constant (ainsi que le débit de particules), on peut utiliser la forme unitaire:

$$C'_i(x, y, t) = \sum_{p=1}^N \Phi_i(t_p) I_p(x, y, t) \frac{T}{N} \quad [6.7]$$

Ici, le panache unitaire dépend du contaminant traité en raison de la cinétique particulière de celui-ci. Dans le cas où la fonction et les paramètres de la cinétique sont les mêmes pour divers contaminants, i.e.:

$$\Phi \equiv \Phi_i \quad \text{et} \quad C' \equiv C'_i$$

le panache unitaire peut être utilisé et la concentration résultante est obtenue en introduisant le débit massique Q_{Mi} du contaminant dans [6.7].

$$C_i(x, y, t) = Q_{Mi} C'_i(x, y, t) = Q_{Mi} \sum_{p=1}^N \Phi_i(t_p) I_p(x, y, t) \frac{T}{N} \quad [6.8]$$

6.5.2 Forme dégradée

S'il est utile de garder la trace du contaminant dans sa forme dégradée, il suffit d'appliquer le complément de la fonction d'évolution retenue au calcul des concentrations. Le complément est obtenu par une simple loi de conservation.



$$\text{Complément} \rightarrow m_{p0}[1 - \Phi_i(t_p)] \quad [6.9]$$

La concentration du résidu dégradé est donc obtenue ainsi en utilisant le panache unitaire:

$$C_i^-(x, y, t) = Q_{Mi} \sum_{p=1}^N [1 - \Phi_i(t_p)] I_p(x, y, t) \frac{T}{N} \quad [6.10]$$

où:

C_i^- : la concentration du contaminant dans sa forme dégradée.

Si le débit de contaminant varie dans le temps, on peut appliquer la même démarche mais en transformant plutôt la relation [6.6].

$$C_i^-(x, y, t) = \sum_{p=1}^N \frac{Q_{Mi}(t_{p0})}{Q_p(t_{p0})} [1 - \Phi_i(t_p)] I_p(x, y, t) \quad [6.11]$$

6.5.3 Types de dégradation

La forme la plus usuelle de dégradation rencontrée dans la nature est une cinétique du premier ordre où la quantité de contaminant résiduelle au temps t est égale à une constante fois la quantité disponible au temps $t - \Delta t$:

$$m_p(t) = k m_p(t - \Delta t)$$

k : une constante numérique.

Cette forme discontinue (discrète) est équivalente à la forme analytique suivante (forme exponentielle décroissante):

$$m_p(t_p) = m_p(t_{p0}) \exp(-\alpha t_p) = m_{p0} \exp(-\alpha t_p) \quad [6.12]$$

où:

α : une constante de dégradation.

La fonction de dégradation adimensionnelle d'un contaminant i est donc dans ce cas:



$$\Phi_i(t_p) = \exp(-\alpha_i t_p) \quad [6.13]$$

Le coefficient α_i peut correspondre à une constante de demi-vie comme suit:

$$\alpha_i = \frac{\ln 2}{T_{\frac{1}{2}}^{vie}}$$

6.6 Modes d'injection

On a vu en 6.3 (Evolution des charges de contaminant) qu'il y avait moyen de prendre en considération une variation temporelle du débit massique du contaminant au point d'injection. La présente section vise à démontrer comment sont décrites les différentes formes d'injection de contaminant dans *PANACHE*. Les différents cas possibles sont:

- le simple tuyau d'émissaire (*injection ponctuelle*);
- le diffuseur linéaire uniforme (*injection uniforme*);
- l'injection forcée productrice de turbulence dès l'entrée du débit d'effluent dans le milieu (diffuseur ponctuel), ou la prise en charge d'un panache à une certaine distance en aval de l'émissaire (*injection répartie gaussienne*);
- un tributaire ou un couloir de débit de concentration constante (*injection proportionnelle au courant*).

6.6.1 Injection ponctuelle

Ce cas est le plus simple et le plus fréquent qui puisse se produire lors d'une simulation. L'injection ponctuelle permet de décrire les effluents concentrés de la taille d'un tuyau et dont le débit liquide devient vite négligeable vis-à-vis du volume contaminé. Elle permet également de réaliser des essais théoriques comme la validation analytique du modèle (voir les cas tests au chapitre 7).

La description de ce mode d'injection ne requiert pas de formalisme particulier et on peut l'associer à une fonction Dirac (figure 6.1).

6.6.2 Injection répartie uniforme

Ce mode d'injection permet de simuler un diffuseur rectiligne placé en travers de l'écoulement et distribuant uniformément le débit massique de contaminant sur toute sa longueur.



Formellement, ce processus est défini par:

$$U_p(0,L)$$

L : la longueur du système d'injection;

$U_p(0,L)$: une distribution uniforme de particules entre 0 et L .

La distribution uniforme de particules peut être obtenue par la production de nombres aléatoires en 0 et 1 tel que démontré à la section 4.3 (Générateur de nombres aléatoires) ou encore plus simplement, en distribuant également les particules dans un certain nombre d'intervalles égaux entre 0 et L .

L'injection de particules est effectuée avec un intervalle de temps relativement court pour préserver la continuité du débit d'injection le long du diffuseur.

6.6.3 Injection répartie gaussienne

Cette forme d'injection peut être occasionnée par un surplus de turbulence qui ne dépend pas de l'écoulement général mais plutôt de conditions locales au point d'injection. Elle permet de prendre en charge un panache dont l'origine se situe en amont de la limite du domaine de simulation hydrodynamique. Elle peut également être utile dans un programme informatique pour suppléer localement au comportement tridimensionnel d'un panache. Les paramètres de cette distribution sont ajustés par calibration. Formellement, cette forme d'injection est représentée ainsi:

$$U(0,1) \rightarrow N_p \equiv N(\bar{x}_p, \bar{y}_p, \sigma_p)$$

où:

$U_i(0,1)$: une distribution uniforme de nombres entre 0 et 1;

N_p : une distribution normale de moyenne $(\bar{x}_p, \bar{y}_p)$ et d'écart-type σ_p .

L'injection est effectuée sur une "rampe" perpendiculaire à l'écoulement. On peut aussi concevoir un système d'injection où la distribution serait non pas seulement symétrique sur l'axe d'une rampe rectiligne mais étendue à deux dimensions avec le centre en $(\bar{x}_p, \bar{y}_p)$ ¹. Alors:

$$U_i(0,1) \rightarrow N_p = N(\bar{x}_p, \bar{y}_p, \sigma_{pN}, \sigma_{pT})$$

¹ Fonctionnalité qui n'a pas été implantée dans le logiciel *PANACHE*.



N, T : les directions normale et tangentielle à l'écoulement.

6.6.4 Injection répartie proportionnelle au débit spécifique

Le cas est susceptible de se produire à l'entrée d'un tributaire afin de représenter adéquatement celui-ci. Ce mode d'injection peut également servir à "induire" une concentration de contaminant dans un couloir de débit particulier d'un cours d'eau (une masse d'eau). Pour ce faire, la prise en compte du débit spécifique en travers de la section considérée est essentielle pour obtenir la distribution de concentration de contaminant souhaitée. Dans le cas le plus simple où l'on désire une concentration uniforme de soluté en travers de la section, les particules sont injectées proportionnellement au débit spécifique de la section.

Le débit spécifique tient compte des profondeurs et vitesses locales. Imaginons une rampe d'injection tendue entre deux rives d'un tributaire. Une coordonnée locale curviligne " s " dont l'origine se situe en rive gauche et la fin en rive droite permet de décrire la géométrie de la rampe. Cette coordonnée emprunte une trajectoire perpendiculaire aux lignes de courant. Sur cette coordonnée, le débit spécifique est donc égal à:

$$q(s) = |V(s)| H(s)$$

$q(s)$: le débit spécifique en s ;

$|V(s)|$: le module de la vitesse normale à s (conventionnellement, le signe est positif avec un débit sortant);

$H(s)$: la profondeur locale.

La notion de *débit spécifique* correspond intégralement à celle du couloir de débit qui est traitée dans le volume #1 du rapport #1 de la présente série (*Simulation hydrodynamique des écoulements en eau libre du tronçon Tracy - Lac Saint-Pierre*). Rappelons ici que la fonction courant est une variable continue dans l'espace et qu'elle exprime la différence de débit spécifique cumulé entre deux points quelconques du milieu. Formellement, la fonction courant Ψ est représentée ainsi:

$$\Psi(s) = \int_0^s q(s) ds$$

Par exemple, si l'on intègre le débit spécifique d'une rive à l'autre d'un tributaire, on accomplit un genre de "jaugeage numérique" qui donne le débit total de la section (Q):



$$Q = \Psi_{total} = \int_{s_g}^{s_d} q(s) ds$$

(s_g, s_d) : respectivement les coordonnées locales des rives gauche et droite.

Dans le cas où la concentration désirée est constante en travers de la section d'écoulement, le débit particulaire est donc réparti proportionnellement au débit spécifique du tributaire. Ainsi, on a:

$$q_p(s) = Q_p \left(\frac{q(s)}{Q} \right)$$

$q_p(s)$: le débit particulaire spécifique.

Lorsqu'on intègre le débit particulaire spécifique d'une rive à l'autre, on obtient le débit particulaire total:

$$Q_p = \int_{s_g}^{s_d} q_p(s) ds$$

Algébriquement, cette forme d'injection est obtenue en discrétisant la section d'écoulement visée et en interprétant la valeur locale de la fonction courant fournie par la modélisation hydrodynamique. Cette variable, qui forme un champ continu, est donnée aux noeuds du modèle et il suffit d'en interpoler la valeur aux points désirés pour obtenir un débit spécifique par intervalles discrets. Le débit de particules ΔQ_p dans l'intervalle Δs_i est ensuite injecté proportionnellement à cette distribution discrète. Ainsi:

$$\Delta Q_p(s_i) = q_p(s_i) \Delta s = Q_p \frac{\overline{q(s_i)} \Delta s}{Q}$$



7 TESTS

✓ L'implantation de la méthode de la marche au hasard dans le logiciel *PANACHE* a été vérifiée de différentes façons pour être considérée comme représentative d'un processus de convection-diffusion. Dans un premier temps, il a été nécessaire d'effectuer des tests de nature académique de manière à vérifier d'une part, la programmation, et d'autre part, la représentation de cas simples, dont la solution est déjà connue analytiquement (une forme algébrique générale). Le but de ces tests est également de mettre en évidence les limites du logiciel et les meilleures valeurs de paramètres à utiliser. La validation sur le terrain est également une étape majeure à franchir avant de procéder à l'implantation d'un tel outil dans la pratique¹. Seuls les tests analytiques essentiels sont présentés ci-après. Ils portent sur la convection, la dispersion et le calcul des concentrations.

7.1 Tests sur l'étape convective

✓ Dans cette section, nous présentons les résultats de tests portant sur les différentes méthodes utilisées dans le calcul du déplacement du maillage d'éléments finis et par conséquent, du mouvement des particules. Dans un premier temps, nous comparons l'effort de calcul associé à l'implantation de chacun de ces schémas. Ensuite, nous portons notre attention sur leur précision. Il faut insister sur le fait que l'effort de calcul n'est pas un critère de sélection primordial d'un algorithme. Mais le gain de temps-machine lors d'une phase particulière de calcul peut être investi dans une simulation plus précise. C'est ainsi que le critère du temps de calcul est lié au critère de la précision.

7.1.1 Algorithmes considérés

Certaines des méthodes comparées ici sont décrites à la section 5.1 (Algorithmes de calcul du pas convectif). Il s'agit des algorithmes 5.1 (Euler explicite: EE), 5.2 (Runge-Kutta: RK) 5.3 (Euler semi-implicite: ESI), 5.4 (Euler explicite à pas de temps divisé: EEPD) et 5.5 (Euler semi-implicite à pas de temps divisé: ESIPD).

¹ Voir le rapport #1 - volume 2: *Caractérisation de la diffusivité des écoulements du tronçon Tracy - Lac Saint-Pierre par tests de rhodamine et télédétection aéroportée* ; et volume 3: *Analyse numérique de la contamination du tronçon Tracy - Lac Saint-Pierre par les effluents industriels et les tributaires*



Nous proposons ici trois autres algorithmes qui sont les pendants des algorithmes 5.3, 5.4 et 5.5 mais avec un schéma de Runge-Kutta à la place de celui d'Euler. La notation utilisée à la section 5.1 a été conservée.

Le premier algorithme porte sur l'implantation d'un schéma de Runge-Kutta semi-implicite:

Algorithme 7.1 Calcul du pas convectif avec un schéma Runge-Kutta itératif d'ordre 4 (RKI)

Début

Calculer $(x_{(1)}, y_{(1)})$ par l'algorithme 5.2

Poser $k = 1$

Poser $Distance = 2 * \epsilon$

Tant que $Distance \geq \epsilon$

Début

$$K_1 = u^+(x_{(k)}, y_{(k)})\Delta t$$

$$L_1 = v^+(x_{(k)}, y_{(k)})\Delta t$$

$$K_2 = u^+\left(x_{(k)} + \frac{K_1}{2}, y_{(k)} + \frac{L_1}{2}\right)\Delta t$$

$$L_2 = v^+\left(x_{(k)} + \frac{K_1}{2}, y_{(k)} + \frac{L_1}{2}\right)\Delta t$$

$$K_3 = u^+\left(x_{(k)} + \frac{K_2}{2}, y_{(k)} + \frac{L_2}{2}\right)\Delta t$$

$$L_3 = v^+\left(x_{(k)} + \frac{K_2}{2}, y_{(k)} + \frac{L_2}{2}\right)\Delta t$$

$$K_4 = u^+\left(x_{(k)} + \frac{K_3}{2}, y_{(k)} + \frac{L_3}{2}\right)\Delta t$$

$$L_4 = v^+\left(x_{(k)} + \frac{K_3}{2}, y_{(k)} + \frac{L_3}{2}\right)\Delta t$$



$$x_{(k+1)} = x_{(k)} + \frac{(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)}{6}$$

$$y_{(k+1)} = y_{(k)} + \frac{(L_1 + 2L_2 + 2L_3 + L_4)}{6}$$

$$Distance = \sqrt{(x_{(k+1)} - x_{(k)})^2 + (y_{(k+1)} - y_{(k)})^2}$$

$$k = k + 1$$

Fin

$$x' = x_k \text{ et } y' = y_k$$

Fin

L'algorithme 7.2 calcule le déplacement en découpant par m le pas de temps, et en utilisant un schéma de Runge-Kutta d'ordre 4.

Algorithme 7.2 **Calcul du pas convectif avec schéma de Runge-Kutta d'ordre 4, et pas de temps divisé par m (RKPD)**

Début

Pour $l = 0, \dots, m - 1$

Début

$$K_1 = u^+(x_l, y_l) \frac{\Delta t}{m}.$$

$$L_1 = v^+(x_l, y_l) \frac{\Delta t}{m}.$$

$$K_2 = u^+\left(x_l + \frac{K_1}{2}, y_l + \frac{L_1}{2}\right) \Delta t.$$

$$L_2 = v^+\left(x_l + \frac{K_1}{2}, y_l + \frac{L_1}{2}\right) \Delta t.$$

$$K_3 = u^+\left(x_l + \frac{K_2}{2}, y_l + \frac{L_2}{2}\right) \Delta t.$$



$$L_3 = v^+ \left(x_l + \frac{K_2}{2}, y_l + \frac{L_2}{2} \right) \Delta t.$$

$$K_4 = u^+ \left(x_l + \frac{K_3}{2}, y_l + \frac{L_3}{2} \right) \Delta t.$$

$$L_4 = v^+ \left(x_l + \frac{K_3}{2}, y_l + \frac{L_3}{2} \right) \Delta t.$$

$$x_{l+1} = x_l + \frac{(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)}{6}.$$

$$y_{l+1} = y_l + \frac{(L_1 + 2L_2 + 2L_3 + L_4)}{6}.$$

Fin

$$x' = x_m \text{ et } y' = y_m$$

Fin

Enfin, l'algorithme 7.3 est le résultat du couplage des algorithmes 7.1 et 7.2, à savoir le schéma de Runge-Kutta utilisé itérativement sur un pas de temps divisé.

Algorithme 7.3 **Calcul du pas convectif avec schéma itératif de Runge-Kutta d'ordre 4 et pas de temps divisé par m (RKIPD)**

Début

Pour $l = 0, \dots, m - 1$

Début

Calculer $(x_{(l+1)}, y_{(l+1)})$ avec un pas de temps divisé par m , en utilisant l'algorithme 5.2.

Poser $k = 1$

Poser $Distance = 2 * \epsilon$

Tant que $Distance \geq \epsilon$

Début



$$K_1 = u^+(x_{l+1(k)}, y_{l+1(k)}) \frac{\Delta t}{m}$$

$$L_1 = v^+(x_{l+1(k)}, y_{l+1(k)}) \frac{\Delta t}{m}$$

$$K_2 = u^+\left(x_{l+1(k)} + \frac{K_1}{2}, y_{l+1(k)} + \frac{L_1}{2}\right) \Delta t$$

$$L_2 = v^+\left(x_{l+1(k)} + \frac{K_1}{2}, y_{l+1(k)} + \frac{L_1}{2}\right) \Delta t$$

$$K_3 = u^+\left(x_{l+1(k)} + \frac{K_2}{2}, y_{l+1(k)} + \frac{L_2}{2}\right) \Delta t$$

$$L_3 = v^+\left(x_{l+1(k)} + \frac{K_2}{2}, y_{l+1(k)} + \frac{L_2}{2}\right) \Delta t$$

$$K_4 = u^+\left(x_{l+1(k)} + \frac{K_3}{2}, y_{l+1(k)} + \frac{L_3}{2}\right) \Delta t$$

$$L_4 = v^+\left(x_{l+1(k)} + \frac{K_3}{2}, y_{l+1(k)} + \frac{L_3}{2}\right) \Delta t$$

$$x_{l+1(k+1)} = x_l + \frac{(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)}{6}$$

$$y_{l+1(k+1)} = y_l + \frac{(L_1 + 2L_2 + 2L_3 + L_4)}{6}$$

$$Distance = \sqrt{(x_{l+1(k+1)} - x_{l+1(k)})^2 + (y_{l+1(k+1)} - y_{l+1(k)})^2}$$

$$k = k + 1$$

Fin

Fin

$$x' = x_m \text{ et } y' = y_m$$

Fin

7.1.2 Tests sur le déplacement du maillage

Ce premier test a pour but d'évaluer l'efficacité en temps de calcul des algorithmes proposés dans le calcul de la convection. Pour ce faire, ceux-ci ont été appliqués au déplacement d'un maillage qui est, rappelons-le, l'étape préliminaire à la simulation du mouvement des particules.

Le test effectue la rotation complète en une seconde (360° ou 2π) d'un maillage de 20 m x 20 m comportant 4802 éléments de type *T3* et 2500 sommets. Le champ de vitesses est circulaire et la vitesse locale est proportionnelle au rayon du point. Elle est spécifiée aux noeuds de la grille dans

la forme cartésienne, i.e.:

$$u(x, y) = -\frac{2\pi}{T}y, \quad v(x, y) = +\frac{2\pi}{T}x \quad \text{avec } T = 1 \text{ sec.} \quad [7.1]$$

La profondeur est unitaire et le coefficient de diffusion nul. Le champ de vitesses réel est donc égal au champ de vitesse apparent, i.e. ($u = u^+$ et $v = v^+$). La figure 7.1 montre une esquisse du maillage (le maillage démontré comporte trente-six sommets seulement mais sa topologie et sa géométrie sont semblables à la grille utilisée pour le test).

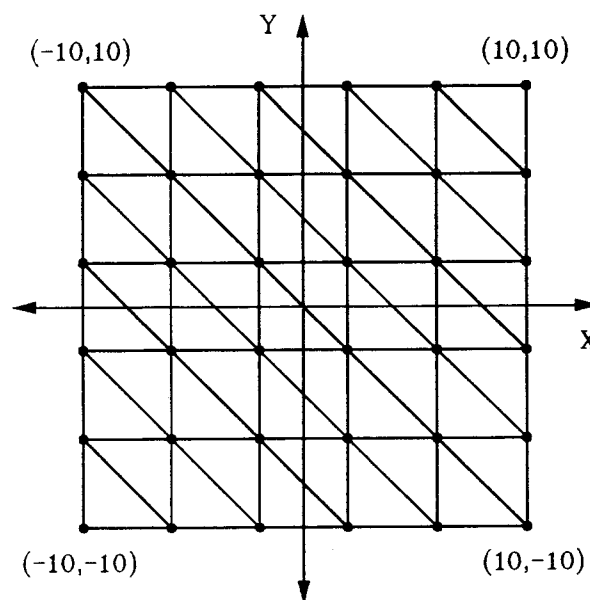


Figure 7.1.

Esquisse du maillage utilisé pour le test de déplacement d'une grille

Les calculs ont été réalisés sur un ordinateur de type *Compaq Deskpro 386/25e* avec une horloge de fréquence 25 MHz. L'ordinateur est équipé d'un co-processeur mathématique de type *Intel 387*. Les paramètres de calcul sont les suivants. Le pas de temps est de 0.05 seconde. Pour les algorithmes



itératifs, à savoir 5.3, 5.5, 7.2 et 7.3, on a posé $\alpha = 0.5$, et la précision ϵ exigée pour la convergence était de $1/1\,000\,000$. Pour ce qui est des algorithmes à pas de temps divisé, le paramètre m est égal à 10.

Tableau 7.1 Temps de calcul pour le déplacement circulaire d'un maillage de 2500 noeuds

ALGORITHMES	DUREE DU CALCUL
5.1 Euler explicite	1 seconde
5.3 Euler semi-implicite	47 secondes
5.4 Euler explicite à pas divisé	50 secondes
5.5 Euler semi-implicite à pas divisé	4 minutes 8 secondes
5.2 Runge-Kutta	17 secondes
7.1 Runge-Kutta semi-implicite	2 minutes
7.2 Runge-Kutta à pas divisé	3 minutes 45 secondes
7.3 Runge-Kutta semi-implicite à pas divisé	14 minutes 11 secondes

On se rend compte que le couplage itératif-pas divisé accroît considérablement le temps de calcul. C'est la méthode d'Euler explicite qui est évidemment la plus rapide. La deuxième méthode la plus efficace est le schéma semi-implicite d'Euler.

7.1.3 Tests sur la précision du calcul convectif

Le deuxième groupe de tests porte sur la précision relative des calculs effectués avec les divers algorithmes proposés. Pour ce faire, il est nécessaire de mouvoir une particule dans un champ de vitesse présentant de fortes variations directionnelles. Le champ de vitesse précédant (section 6.1.2) convient particulièrement bien pour ces tests.

Description du cas testé. Une particule est donc lâchée au point $(1,0)$ du champ de vitesse $(-2\pi y, 2\pi x)$. Les caractéristiques de ce dernier font en sorte que la particule revienne à son point de départ après une période d'une seconde. Plus la position finale de la particule est éloignée de $(1,0)$, plus le schéma utilisé pour ce calcul est imprécis. Les paramètres des différentes méthodes sont les mêmes que ceux donnés pour les tests sur l'effort de calcul.



Les tableaux 7.2 à 7.4 portent sur les résultats obtenus en considérant l'influence de divers paramètres algorithmiques. La deuxième colonne donne la position d'arrivée calculée de la particule après une seconde; la troisième, la distance euclidienne entre la position d'arrivée calculée et la position qu'elle devrait théoriquement occuper après la même période. Plus cette distance est courte, meilleur est le résultat. La quatrième colonne donne la longueur du chemin parcouru par la particule. Celui-ci doit s'approcher de $2\pi \times 1m$, c'est-à-dire, environ 6,28318 m. La dernière colonne fournit le rapport entre la distance et la longueur du chemin parcouru. Ce rapport est, en fait, le pourcentage de l'erreur commise par une méthode pour chaque unité de distance parcourue. Par exemple, un rapport de 0,07 signifie qu'à chaque mètre de transport convectif, le schéma commet une erreur de 0,07 m.

Comparaison de la précision des divers algorithmes. Le tableau 7.2 compare la précision des calculs par les différents algorithmes pour une simulation durant une seconde avec un pas de temps: $\Delta t = 0,05s$.

Tableau 7.2 Précision du déplacement circulaire d'une particule avec $\Delta t = 0,05 s$

ALGORITHME	POSITION D'ARRIVEE	DISTANCE A (1,0)	LONGUEUR DU CHEMIN	DISTANCE / CHEMIN
5.1 EE	x = 2,514 y = -0,497	1,594	10,191	0,156
5.3 ESI	x = 0,999 y = -0,051	0,051	6,207	0,008
5.4 EPPD	x = 1,103 y = -0,00228	0,104	6,575	0,015
5.5 ESIPD	x = 1,000 y = -0,0005	0,0005	6,257	0,00008
5.2 RK	x = 1,173 y = -0,0297	0,175	6,760	0,026
7.1 RKI	x = 0,446 y = -0,056	0,557	4,260	0,131
8.2 RKPD	x = 1,017 y = -0,00026	0,017	6,309	0,003
8.3 RKIPD	x = 0,921 y = -0,0012	0,079	6,006	0,013



Les résultats concernant les différentes implantations du schéma d'Euler sont cohérents. Le fait de découper le pas de temps améliore sensiblement les résultats d'un facteur 10 entre 5.4 et 5.1, et d'un facteur 100 entre 5.5 et 5.3. La méthode itérative améliore encore plus la précision. L'algorithme 5.3 commet une erreur 20 fois moins grande que sa version non-itérative. Entre 5.5 et 5.4, c'est une erreur diminuée par 200 que l'on retrouve. Les différences relatives entre les diverses implantations du schéma d'Euler sont très significatives.

Du point de vue comportemental, on note que les schémas explicites poussent systématiquement la particule vers l'extérieur de la trajectoire théorique. Ceci s'explique par le fait que la vitesse n'est prise en compte qu'à la position initiale de la particule.

Du côté du schéma de Runge-Kutta, les résultats ne sont pas aussi probants qu'espéré compte tenu du degré élaboré de l'algorithme. Si on ne compare que les schémas explicites (5.1: EE et 5.2: RK), la solution Runge-Kutta est plus précise que celle obtenue par le schéma d'Euler.

Cependant, cela se complique lorsqu'on étudie les résultats des différentes implantations. Premièrement, le fait d'itérer avec ce schéma n'améliore rien. Pire, la procédure augmente l'erreur commise et la particule est attirée vers le centre du domaine. Ainsi, tenir compte du champ de vitesses au point d'arrivée avec ce schéma revient à surévaluer son importance en fin de course sur un pas de temps. Les figures 7.2 à 7.9 sont très révélatrices à ce sujet.

Discussion. Les résultats montrent que le choix d'un champ de vitesses circulaire comme cas-test est judicieux. Premièrement, si une particule est lâchée en un point quelconque du plan XY , elle doit se retrouver au même point à la fin de la simulation. De plus, le fait que la particule tourne toujours à gauche durant son déplacement permet de cumuler l'erreur. Un biais systématique est donc obligatoirement mis en évidence par ce test.

Du point de vue de la précision, on se rend compte que les meilleurs résultats parmi ceux présentés sont obtenus avec le schéma d'Euler semi-implicite avec pas divisés. C'est d'ailleurs ce schéma qui a été retenu pour supporter le calcul convectif du logiciel *PANACHE*.

Figure 7.2.
Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma d'Euler explicite

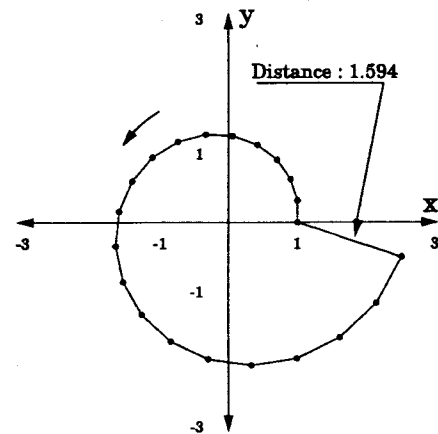


Figure 7.3.
Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma d'Euler semi-implicite

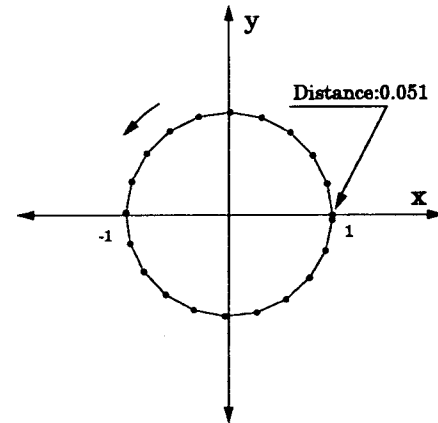
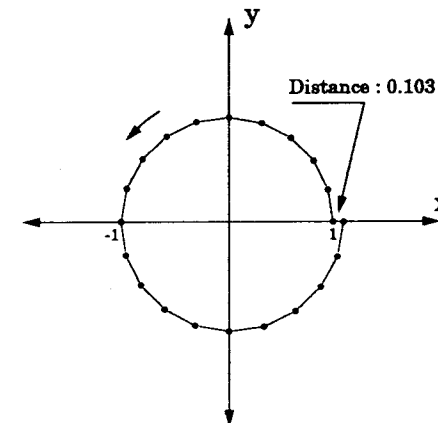


Figure 7.4.
Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma d'Euler explicite avec pas divisé



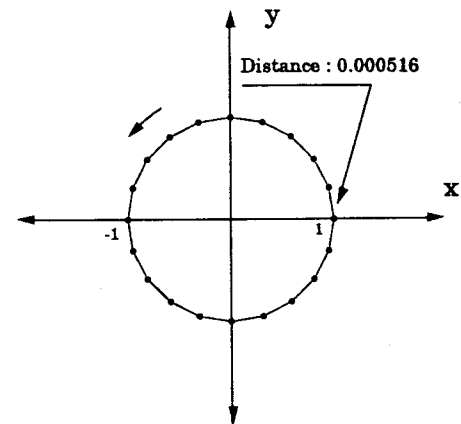


Figure 7.5.

Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma d'Euler semi-implicite avec pas divisé

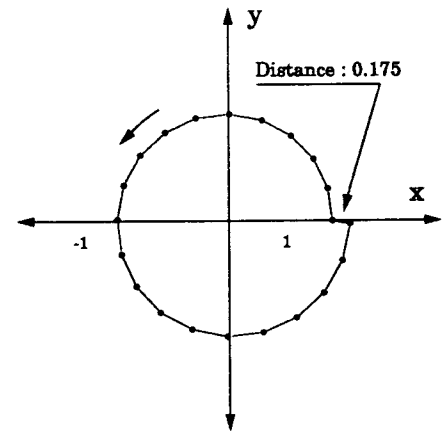


Figure 7.6.

Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma Runge-Kutta

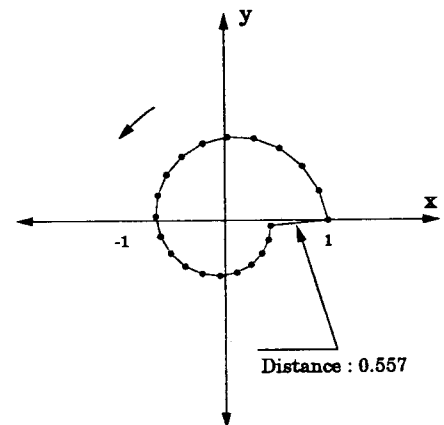


Figure 7.7.

Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma itératif de Runge-Kutta

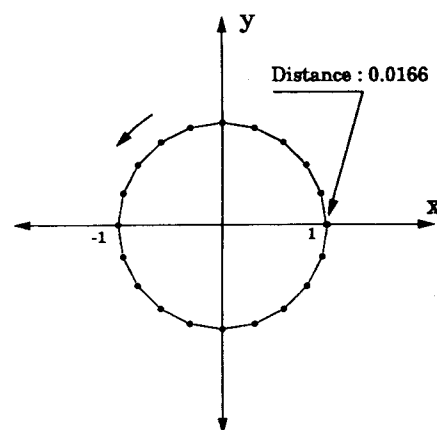


Figure 7.8.
Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma de Runge-Kutta à pas divisé

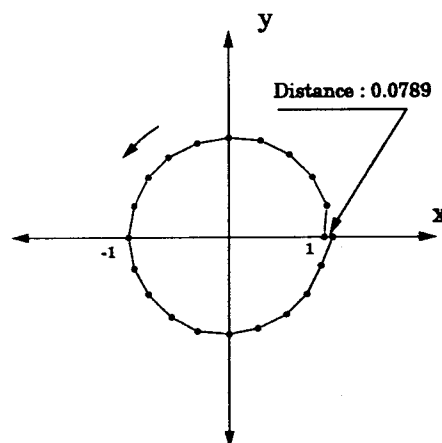


Figure 7.9.
Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma de Runge-Kutta à pas divisé explicite

Influence du choix du pas de temps. Il est intéressant de mettre en évidence le comportement des algorithmes en relation avec le choix du pas de temps. On peut s'attendre ici à ce que, en diminuant le pas de temps de la simulation, les résultats s'en trouvent améliorés. Le tableau 7.3 reprend le cas-test précédant, mais avec un pas de temps divisé par 10: $\Delta t = 0,005s$.

On voit que le comportement relatif des schémas est conservé, seule l'erreur commise a diminué. Ces résultats ne seront pas commentés en détail car ils sont une réplique des précédents. Ils montrent en fait que la variation du pas de temps affecte uniquement la précision des méthodes mais pas leur comportement relatif.



Tableau 7.3 Précision du déplacement circulaire d'une particule avec $\Delta t = 0,005$ s

ALGORITHME	POSITION D'ARRIVEE	DISTANCE A (1,0)	LONGUEUR DU CHEMIN	DISTANCE / CHEMIN
5.1 EE	x = 1,218 y = -0,010	0,218	6,938	0,022
5.3 ESI	x = 1,000 y = -0,0020	0,002	6,280	0,0003
5.4 EPPD	x = 1,020 y = -0,00008	0,020	6,345	0,003
5.5 ESIPD	x = 1,000 y = -0,00002	0,00002	6,282	0,000003
5.2 RK	x = 1,033 y = -0,001	0,033	6,386	0,005
7.1 RKI	x = 0,848 y = -0,004	0,152	5,790	0,026
7.2 RKPD	x = 1,003 y = -0,00001	0,003	6,292	0,00047
7.3 RKIPD	x = 0,984 y = -0,00005	0,016	6,231	0,003

Influence du degré implicite des méthodes (choix du paramètre α). Analysons maintenant comment réagissent les schémas itératifs en fonction de α . Etant donné que les algorithmes à pas divisés sont linéairement reliés avec les schémas originaux, seuls les résultats des schémas 5.3 et 7.1 sont présentés.

Le tableau 7.4 compare la précision des résultats concernant le schéma d'Euler semi-implicite lorsque l'on fait varier α . Le pas de temps est: $\Delta t = 0.05s$ et la simulation s'étend sur une seconde. Comme pour les autres tests, la particule doit revenir le plus près possible de sa position de départ qui est (1,0).

Globalement, le fait d'augmenter α revient à accroître le poids relatif de la vitesse à la fin du pas de temps dans le calcul du déplacement.

Tableau 7.4 Influence du choix du paramètre α sur le déplacement circulaire d'une particule avec le schéma d'Euler semi-implicite

VALEUR DE α	POSITION D'ARRIVEE	DISTANCE A (1,0)	LONGUEUR DU CHEMIN	DISTANCE / CHEMIN
0,1	x = 2,114 y = -0,307	1,156	9,224	0,125
0,3	x = 1,464 y = -0,109	0,477	7,553	0,063
0,5	x = 0,999 y = -0,051	0,051	6,207	0,008
0,7	x = 0,679 y = -0,051	0,325	5,145	0,063
0,9	x = 0,463 y = -0,067	0,541	4,317	0,125

Avec α plus petit que 0,5, la particule a tendance à s'éloigner de la trajectoire théorique, vers l'extérieur. Entre 0,5 et 1, c'est vers l'intérieur qu'elle se dirige. Les figures 7.10 à 7.12 illustrent très bien ce comportement.

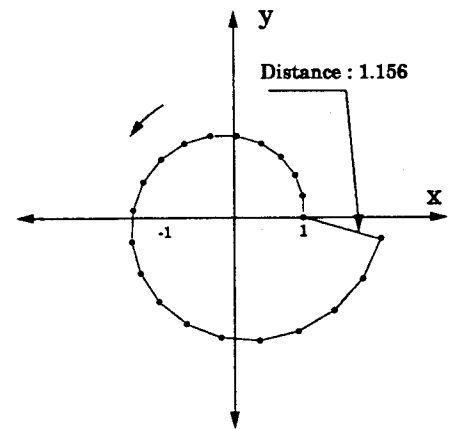


Figure 7.10.
Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma d'Euler semi-implicite et $\alpha = 0,1$

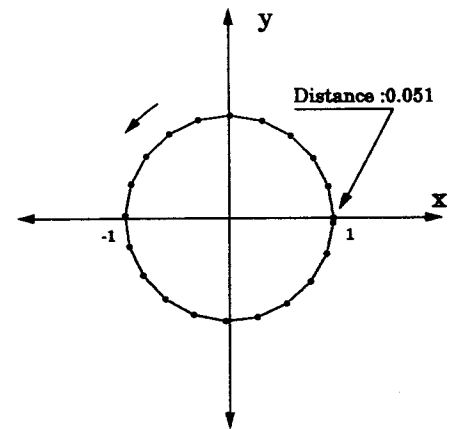


Figure 7.11.
Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma d'Euler semi-implicite et $\alpha = 0,5$

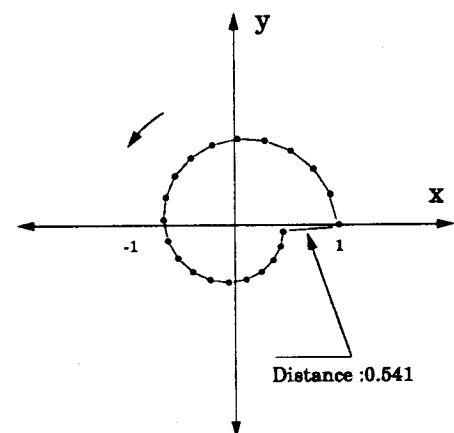


Figure 7.12.
Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma d'Euler semi-implicite et $\alpha = 0,9$



Le tableau 7.5 compare la précision des résultats concernant le schéma de Runge-Kutta semi-implicite lorsque l'on fait varier α . Le pas de temps $\Delta t = 0.05s$ et la simulation s'étend sur une seconde.

Tableau 7.5 Influence du choix du paramètre α sur le déplacement circulaire d'une particule avec le schéma de Runge-Kutta

VALEUR DE α	POSITION D'ARRIVEE	DISTANCE A (1,0)	LONGUEUR DU CHEMIN	DISTANCE / CHEMIN
0.1	x = 0.966 y = -0.021	0.04	6.13	0.006
0.3	x = 0.655 y = -0.032	0.346	5.077	0.068
0.5	x = 0.446 y = -0.056	0.557	4.260	0.131
0.7	x = 0.304 y = -0.075	0.700	3.627	0.193
0.9	x = 0.206 y = -0.087	0.798	3.138	0.254

Ces résultats tendent à démontrer que l'utilisation d'un schéma semi-implicite avec la méthode de Runge-Kutta ne fait que détériorer les résultats. Le fait d'accorder encore plus d'importance au champ de vitesse au point d'arrivée, par le biais du coefficient α , déséquilibre le schéma original. On l'a vu, Runge-Kutta va déjà chercher de l'information en aval du champ de vitesses. Y superposer le schéma semi-implicite accorde trop d'importance à la valeur du champ de vitesses situé vers la fin du parcours. On retrouve donc le même comportement qu'avec le schéma d'Euler lorsque α est plus grand que 0.5.

Les figures 7.13 à 7.15 montrent de façon éloquentte cette dégradation.

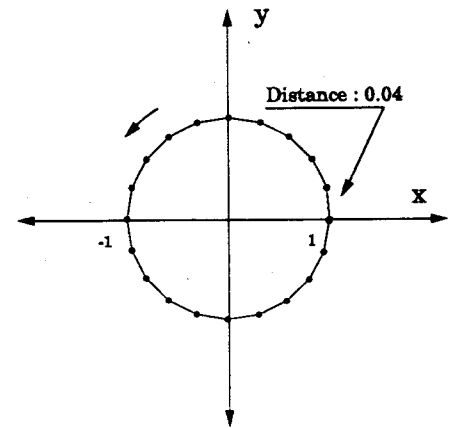


Figure 7.13.

Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma itératif de Runge-Kutta et $\alpha = 0,1$

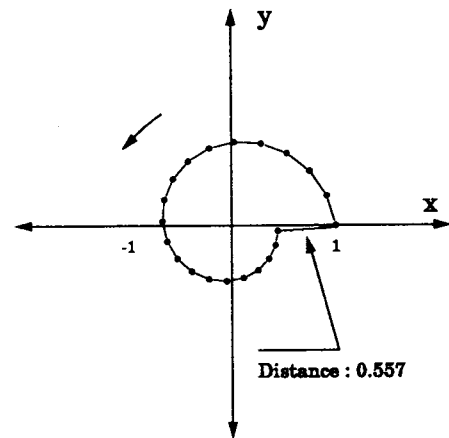


Figure 7.14.

Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma itératif de Runge-Kutta et $\alpha = 0,5$

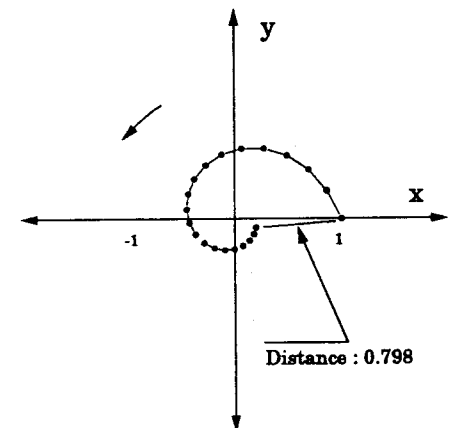


Figure 7.15.

Trajectoire circulaire d'une particule calculée avec le schéma itératif de Runge-Kutta et $\alpha = 0,9$



7.2 Tests sur l'étape diffusive aléatoire

Dans cette section, on teste le schéma utilisé pour simuler la dispersion d'un contaminant. La dispersion des particules s'effectue sans mouvement convectif. Le mouvement dispersif, comme on l'a vu (chapitre 4: Traitement de la dispersion), est décomposé en deux pas distincts orientés selon les axes de coordonnées, x et y . Ces mouvements sont aléatoires mais conditionnés par un coefficient de dispersion D relié à l'écoulement.

$$\Delta x = Z_1 \sqrt{2D \Delta t}, \quad \Delta y = Z_2 \sqrt{2D \Delta t} \quad [7.2]$$

où

Z_1 et Z_2 : des variables aléatoires de distribution normale ayant une moyenne nulle et une variance égale à 1.

Dans le but de pouvoir comparer nos résultats à des distributions connues analytiquement, des cas simples sont ici étudiés. Par exemple, on simule une injection ponctuelle et instantanée d'un groupe de particules en (0,0) au temps 0. Après un certain temps, on examine la position moyenne des particules ainsi que leur distribution autour du point d'injection. Mentionnons qu'il ne s'agit pas encore ici de tester la concentration résultante d'une masse de soluté. Les tests à cet égard font l'objet de la prochaine section.

Le calcul de la position moyenne du nuage de particules s'effectue comme suit :

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_j, \quad \bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_j \quad [7.3]$$

où,

N : le nombre total de particules injectées;

(x_j, y_j) : les coordonnées de celles-ci.

Le calcul des écarts par rapport au centre de la distribution s'effectue ainsi:

$$s_x^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^N (x_j - \bar{x})^2, \quad s_y^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^N (y_j - \bar{y})^2$$

$$s_x = \sqrt{s_x^2}, \quad s_y = \sqrt{s_y^2} \quad [7.4]$$

On notera E_x et E_y les espérances en x et y de la distribution, et σ_x et σ_y les écarts-types théoriques.



7.2.1 Dispersion gaussienne d'un nuage de particules

Le premier test consiste à injecter 50 000 particules au point (0,0) au temps $t = 0$ et de les laisser se diffuser sur 10 secondes avec un pas de 10 secondes. Le champ de vitesses est nul, on retrouve donc un processus de dispersion pur. Le coefficient de diffusion est isotrope et égal à : $0.025 \text{ m}^2/\text{s}$. Dans ce cas, $E_x = E_y = 0$, c'est-à-dire que le nuage de particules doit théoriquement se retrouver centré en (0,0). On calcule les écarts-types théoriques de la façon suivante:

$$\begin{aligned}\sigma_x = \sigma_y &= \sqrt{2DT} \\ &= \sqrt{2 \times 0.025 \times 10} \\ &= 0.7071\end{aligned}$$

La simulation a donné comme résultat :

$$\begin{aligned}\bar{x} &= 0.0043, \quad \bar{y} = 0.0037. \\ s_x &= 0.7071, \quad s_y = 0.7086.\end{aligned}$$

Pour les écarts, on a trouvé des erreurs relatives de:

$$\begin{aligned}\text{en } x: \quad & \frac{|0.7071 - 0.7071|}{0.7071} \times 100 = 0\% \\ \text{en } y: \quad & \frac{|0.7071 - 0.7086|}{0.7071} \times 100 = 0.21\%\end{aligned}$$

Ce test consistait en fait à faire bouger une fois 50 000 particules à partir de (0,0), et à vérifier si la distribution obtenue se rapprochait de celle d'une fonction de densité gaussienne. Le calcul de l'écart-type est la méthode retenue pour ce faire.

Le second test cherche à vérifier la même chose, mais pour 1000 particules déplacées sur 100 pas de temps de 0,1 seconde. Les résultats sont les suivants:

$$\begin{aligned}\bar{x} &= 0.0044, \quad \bar{y} = -0.0040 \\ s_x &= 0.7105, \quad s_y = 0.6924\end{aligned}$$

Les erreurs relatives sont donc de 0,5% sur s_x et de 2,0% sur s_y .



Il semble que le modèle utilisé pour représenter la dispersion soit bon. En fait, l'ordre de grandeur des écarts relatifs aux valeurs théoriques est très inférieur à la précision inhérente au calcul des coefficients de dispersion dans le milieu naturel.

7.2.2 Tests sur le pas de temps et le nombre de particules

Il est important de vérifier de quelle façon jouent deux des paramètres de base de toute simulation, le pas de temps Δt et le nombre de particules. En principe, la variation du pas de temps ne doit pas influencer les résultats puisque le champ de vitesses est nul et que le coefficient de diffusion est constant. Cependant, le nombre de particules est sensé jouer dans la précision des résultats. En effet, plus la quantité de particules est grande, plus les résultats des simulations doivent s'approcher de la solution théorique, exactement comme lorsqu'on tire à pile ou face. Plus on tire souvent, plus le rapport (nombre de piles)/(nombre de faces) doit tendre vers 1.

Le tableau 7.6 compare les résultats obtenus en fonction du nombre de particules avec des pas de temps de 0,25, 0,5, 1 et 2 secondes. La durée de la simulation était de 20 secondes dans les mêmes conditions que précédemment.

Ainsi, il ne semble pas qu'une variation du pas de temps affecte significativement la représentativité des résultats. Les résultats concernant le nombre de particules confirment de manière générale l'énoncé que plus il y en a qui participent au calcul, plus la solution est approchée.

7.2.3 Test avec un champ de vitesse non-nul

Effectuons maintenant une simulation dans un champ de vitesse non-nul. Commençons par un champ de vitesse uniforme: $u = v = 1$ m/s. En conservant un coefficient de diffusion égal à $0,025 \text{ m}^2/\text{s}$, on injecte 1000 particules en (0,0) et la simulation dure 10 secondes. Après ce temps, on doit retrouver les particules distribuées autour du point (10,10) avec un écart-type de 0,7071. On trouve les résultats suivants:

$$\bar{x} = 10,0057, \quad \bar{y} = 9,9587$$

$$s_x = 0,7119, \quad s_y = 0,7117$$



Tableau 7.6. Sensibilité de la dispersion par rapport nombre de particules et au pas de temps Δt

Paramètres	125 particules	250 particules	500 particules	4000 particules
Pas de temps $\Delta t = 0,25$ seconde				
Erreur p/r E_x	0,055	0,007	0,007	0,0012
Erreur p/r E_y	0,023	0,020	0,005	0,0027
Erreur p/r σ_x	4,8%	1,8%	1,7%	1,06%
Erreur p/r σ_y	5,8%	0,9%	2,0%	0,9%
Pas de temps $\Delta t = 0,5$ seconde				
Erreur p/r E_x	0,052	0,014	0,001	0,0007
Erreur p/r E_y	0,007	0,050	0,011	0,0002
Erreur p/r σ_x	1,9%	1,2%	0,3%	0,9%
Erreur p/r σ_y	3,8%	0,4%	1,4%	1,9%
Pas de temps $\Delta t = 1$ seconde				
Erreur p/r E_x	0,028	0,053	0,028	0,0015
Erreur p/r E_y	0,072	0,051	0,038	0,0063
Erreur p/r σ_x	2,8%	0,5%	3,0%	0,42%
Erreur p/r σ_y	1,6%	0,2%	0,8%	0,16%
Pas de temps $\Delta t = 2$ secondes				
Erreur p/r E_x	0,012	0,001	0,012	0,0013
Erreur p/r E_y	0,055	0,051	0,007	0,0027
Erreur p/r σ_x	2,6%	0,8%	0,2%	1,06%
Erreur p/r σ_y	10,8%	2,0%	4,6%	0,90%



Le couplage avec le schéma convectif semble donner les résultats désirés, du moins pour ce cas. Afin de s'en assurer de manière plus générale, complétons cette section en déplaçant le nuage de particules dans un champ de vitesse circulaire comme celui de la section 7.1 (Tests sur l'étape convective), c'est-à-dire:

$$u = -\frac{2\pi}{T}y, \quad v = +\frac{2\pi}{T}x \quad \text{avec } T = 1 \text{ seconde}$$

A la fin, le nuage doit se retrouver centré à son point d'injection avec un écart-type de 0,2236. Le test ne dure qu'une seconde, divisée en 20 pas de temps. Le schéma utilisé pour la partie convective est celui ayant fourni les meilleurs résultats, c'est-à-dire, celui d'Euler semi-implicite à pas divisé. Le pas de temps est donc divisé en dix sous-pas lors du déplacement du maillage. Le point d'injection est situé en (5,0). On injecte 1000 particules. Les résultats obtenus sont les suivants:

$$\bar{x} = 5,000, \quad \bar{y} = -0,016$$

$$s_x = 0,226, \quad s_y = 0,224$$

Ces derniers résultats confirment donc les précédents. On peut conclure que la méthode utilisée pour représenter la diffusion des particules donne les résultats désirés avec une précision acceptable même lorsque le nuage voyage dans un champ de vitesse circulaire.

L'étape suivante consiste à tester le calcul des concentrations.

7.3 Tests sur le calcul des concentrations

La présente section présente les tests qui ont été réalisés pour mettre en évidence le rôle joué par le paramètre de "lissage diffusif contrôlé". Comme on l'a vu au chapitre 6 (Calcul de la concentration), la particule se voit affectée d'une zone d'influence de type gaussienne définie analytiquement. Cette région est en quelque sorte l'*emprise de la particule*. L'écart-type de cette fonction appelé dans la suite "*rayon d'influence*" doit être choisi judicieusement pour produire le lissage désiré tout en évitant de d'accroître significativement l'emprise du panache dans son ensemble. Spécifions ici que ces tests ont été effectués en considérant que le soluté ne se dégrade pas.



Dans un premier temps, nous allons étudier la sensibilité des calculs de concentration par rapport au rayon d'influence alloué aux particules pour une dispersion pure sans transport. Par la suite, des tests portant sur un panache comportant à la fois de la dispersion et du transport seront présentés, le but étant de vérifier le comportement du modèle dans une situation se rapprochant un peu plus de conditions réelles. Puis, les résultats de certains tests concernant l'influence du débit particulaire seront montrés.

7.3.1 Conventions de calcul

Dans un milieu non-soumis au transport, le rayon d'influence est défini par le paramètre adimensionnel ρ qui est le rapport entre l'écart-type (σ_p) de l'emprise individuelle des particules et celui (σ_M) de l'emprise du panache.

$$\rho = \frac{\sigma_p}{\sigma_M} \quad [7.5]$$

Dans le cas d'un panache intégrant l'influence du transport, le rapport ρ tient compte de l'âge des particules et de l'écart-type transversal de la distribution de masse du panache et:

$$\sigma_p(t) = \rho \sigma_{MT}(t) \quad [7.6]$$

où,

$\sigma_p(t)$, $\sigma_{MT}(t)$: respectivement l'écart-type de l'emprise particulaire (p) et celui de l'emprise transversale (T) du panache (M) au voisinage de la particule au temps t .

Les calculs de concentration se font sur une grille orthogonale ce qui produit une matrice de résultats. A chaque entrée de cette matrice, correspondent une position et une concentration. La position coïncide avec le centre d'une sous-maille de superficie $\Delta x * \Delta y$. On considère que la concentration calculée en ce point est représentative donc, constante pour toute cette surface. On notera C_{ij} , la concentration pour cette surface. La coordonnée de son centre est notée: (x_i, y_j) .

7.3.2 Tests sur un panache non-convectif

Le premier test consiste à lâcher 5000 particules au temps $t = 0$ en $(x,y) = (0,0)$ et de les laisser se disperser sur un domaine où le coefficient de dispersion est constant à $0.025 \text{ m}^2/\text{s}$ et le champ de vitesses nul. La grille de calcul de la concentration est un carré de 10 m de côté (coins à $(-5,-5)$,



(5,-5), (5,5) et (-5,5)). Cette grille est formée de 50x50 (2500) mailles de superficie individuelle 0.2m x 0.2m. La grille produit donc une matrice de résultats de dimensions 50 par 50. La durée de la simulation est de 40 s. Les paramètres d'évaluation sont calculés à la fin de la simulation.

Pour les calculs de concentration, la même distribution de particules a toujours été utilisée afin de préserver la consistance des résultats. Seul le rayon d'influence a varié au cours de ces tests. Des valeurs comprises entre 0,1 et 1,0 fois l'écart-type analytique de l'ensemble du nuage ont été utilisées (ρ). Pour tester l'effet du lissage, il était important d'utiliser une distribution de particules imparfaite.

En injectant une masse totale de 1, la solution analytique du problème donnerait:

$$E_x = E_y = 0,0$$

$$\sigma_x = \sigma_y = \sqrt{2DT} = 1.4142$$

Le nuage de particules obtenu par la simulation avait les caractéristiques suivantes:

$$\bar{x} = -0.0088, \quad \bar{y} = -0.0157$$

$$s_x = 1.4061, \quad s_y = 1.4275$$

La déformation de la distribution aléatoire des particules par rapport au profil théorique explique la forme elliptique de la distribution de masse calculée plus loin. Pour tester la validité des résultats, on utilise les indicateurs suivants: la masse totale après simulation, le centre de masse de la distribution et l'éparpillement de la masse. La masse après simulation devrait en principe égaler celle à l'injection. Cependant, si le rayon d'influence donné à chaque particule est trop grand, la masse risque de se perdre à l'extérieur de la grille de concentration. De même, si le rayon est trop faible, la masse est perdue entre les points de calculs. L'estimation de la masse avec la grille de concentration s'effectue comme suit:

$$M = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^O C_{ij} \Delta x \Delta y \quad [7.7]$$

où,

N, O : le nombre d'intervalles en x et y de la matrice de calcul.

Le centre de masse ($\bar{x}_M, \bar{y}_M$) correspond au centre de la distribution de la concentration. Pour une profondeur unitaire (=1), on l'estimera ainsi:



$$\begin{aligned}\bar{x}_M &= \frac{\Delta x \Delta y}{M} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^O C_{ij} x_i \\ \bar{y}_M &= \frac{\Delta x \Delta y}{M} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^O C_{ij} y_j\end{aligned}\quad [7.8]$$

L'éparpillement sera estimé par les écarts-types de la distribution. Les calculs s'effectuent ainsi :

$$\begin{aligned}s_x^2 &= \frac{\Delta x \Delta y}{M} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^O C_{ij} (x_i - \bar{x}_M)^2, \quad s_x = \sqrt{s_{x_M}^2} \\ s_y^2 &= \frac{\Delta x \Delta y}{M} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^O C_{ij} (y_j - \bar{y}_M)^2, \quad s_y = \sqrt{s_{y_M}^2}\end{aligned}\quad [7.9]$$

Le tableau 7.7 donne les indicateurs calculés en fonction du rayon d'influence donné aux particules.

Tableau 7.7 Rôle du rayon d'influence des particules sur la distribution de masse après la calcul de la concentration

Rayon d'influence: ρ	Masse	Centre de masse	Ecart-type en x	Ecart-type en y
0,1	1,000	(-0,009,-0,016)	1,4061	1,4313
0,2	1,000	(-0,009,-0,016)	1,4159	1,4407
0,3	1,000	(-0,010,-0,016)	1,4325	1,4570
0,4	0,999	(-0,010,-0,016)	1,4554	1,4795
0,5	0,999	(-0,010,-0,016)	1,4839	1,5076
0,7	0,997	(-0,011,-0,015)	1,5542	1,5767
0,9	0,992	(-0,012,-0,015)	1,6369	1,6576
1,0	0,989	(-0,012,-0,015)	1,6808	1,7004

On se rend facilement compte que l'augmentation du rayon d'influence a pour effet numérique d'ajouter de la dispersion par rapport au processus aléatoire de référence. En effet, les écarts-types en x et y augmentent avec ρ . De plus, le calcul de la masse induit une perte par les côtés de la zone de calcul à mesure que croît la zone d'influence individuelle des particules. Cet effet pourrait être corrigé en agrandissant la grille de calcul de la concentration. D'un autre côté, l'accroissement du rayon produit l'effet désiré, c'est-à-dire, le lissage des résultats.

Les figures 7.16 à 7.23 représentent l'évolution de ce lissage avec le rayon. Seuls les résultats de la grille de concentration sur le segment de droite $[0,0], [5,0]$ sont représentés graphiquement. La valeur théorique est donnée en abscisse et la valeur simulée en ordonnée. L'erreur commise est l'écart vertical relatif entre les points et la droite à 45° divisant les graphiques en deux.

Les plus fortes valeurs de concentration se situent au centre de la distribution. En augmentant le rayon d'influence, ces valeurs sont écrasées, tandis que les concentrations calculées aux extrémités de la distribution sont amplifiées. Ce comportement traduit la dispersion supplémentaire ajoutée par le lissage. Cependant, cette dispersion a l'avantage d'être contrôlable contrairement aux approches eulériennes comme il a été mentionné plus tôt dans ce rapport.

Les graphiques montrent également de quelle façon est influencée la continuité (lissage) de l'étalement de la distribution de masse des particules. Plus cet étalement est grand, moins on retrouve d'oscillations dans les résultats et la concentration calculée devient de plus en plus uniforme.

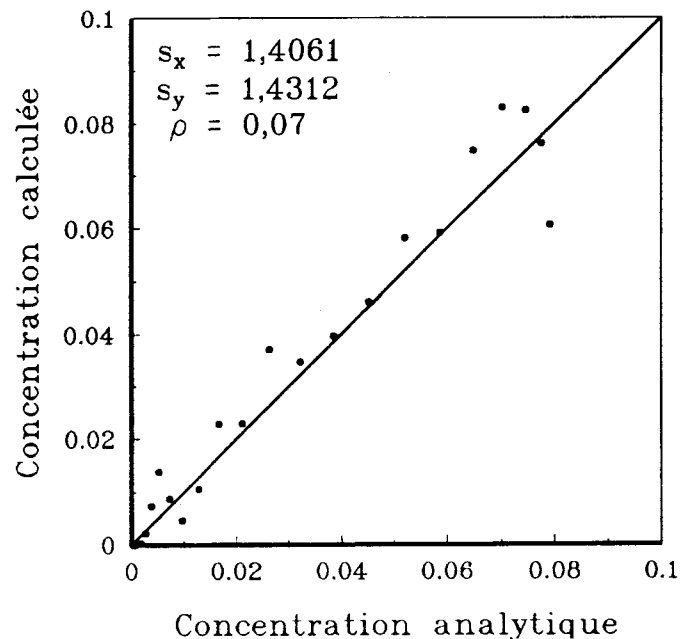


Figure 7.16.
Panache non-convectif -
Effet de lissage avec $\rho = 0,1$

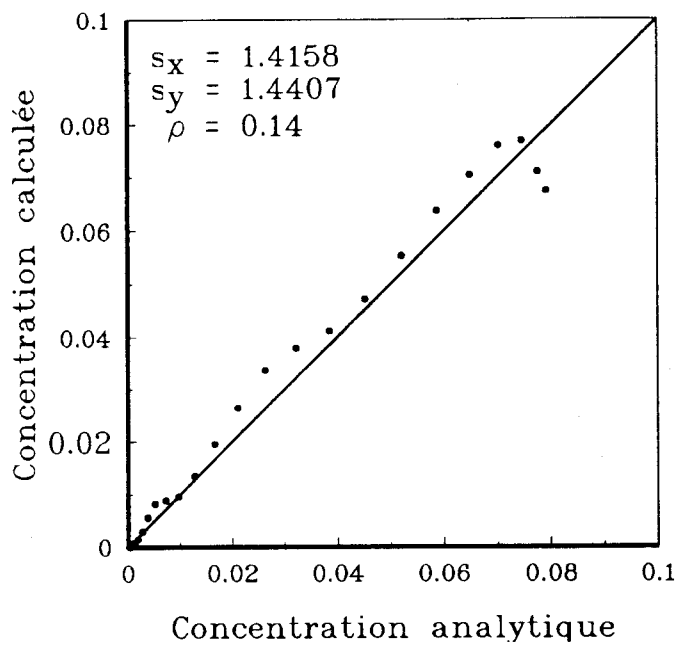


Figure 7.17.

Panache non-convectif -

Effet de lissage avec $\rho = 0,2$

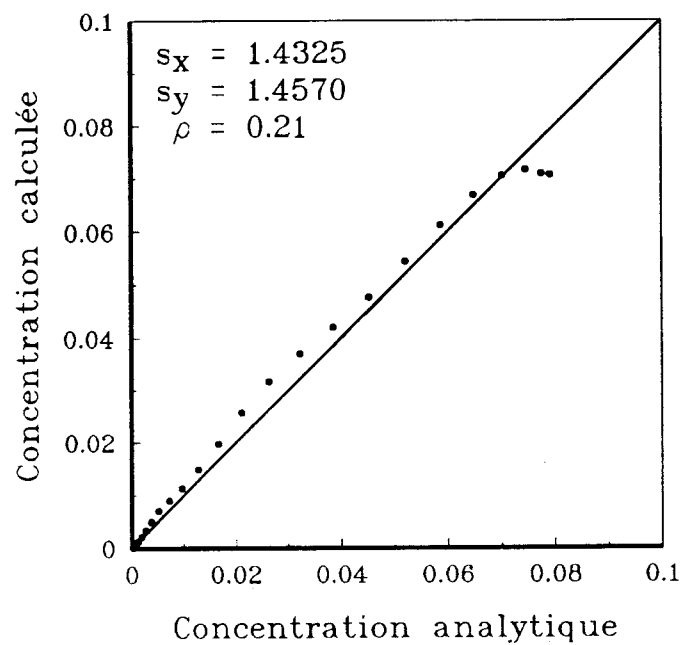


Figure 7.18.

Panache non-convectif -

Effet de lissage avec $\rho = 0,3$

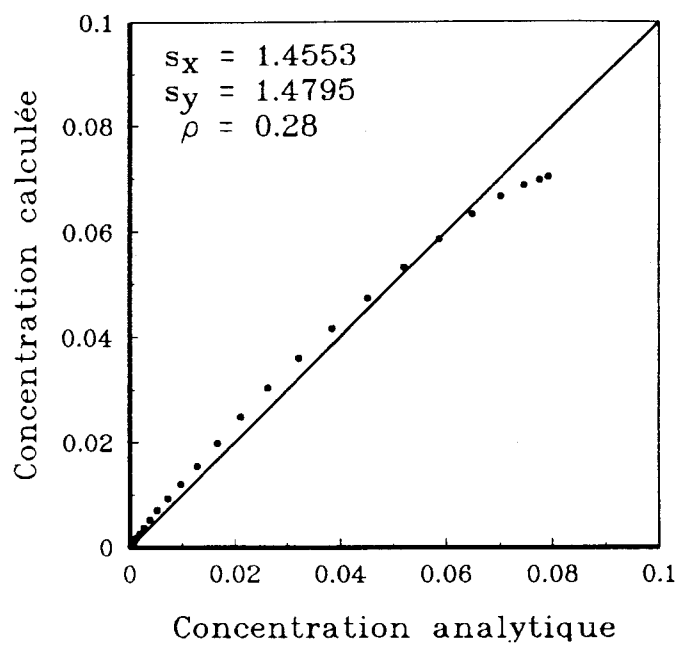


Figure 7.19.
Panache non-convectif -
Effet de lissage avec $\rho = 0,4$

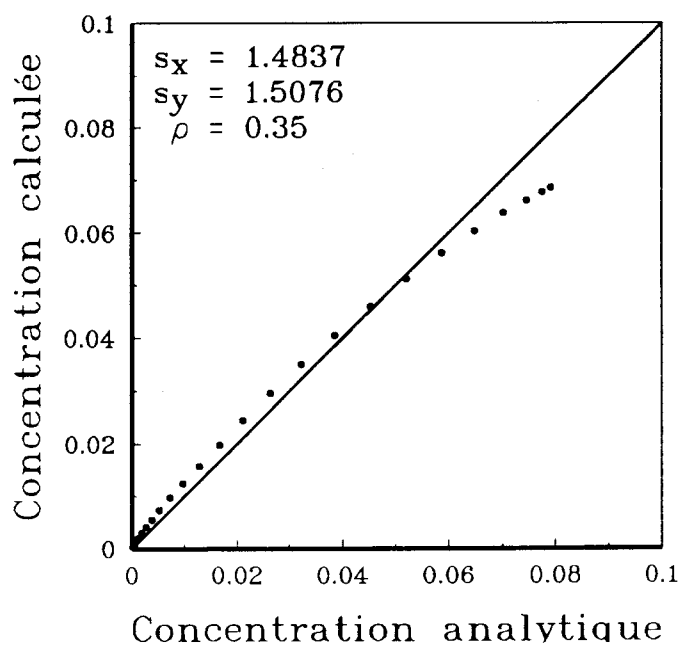


Figure 7.20.
Panache non-convectif -
Effet de lissage avec $\rho = 0,5$

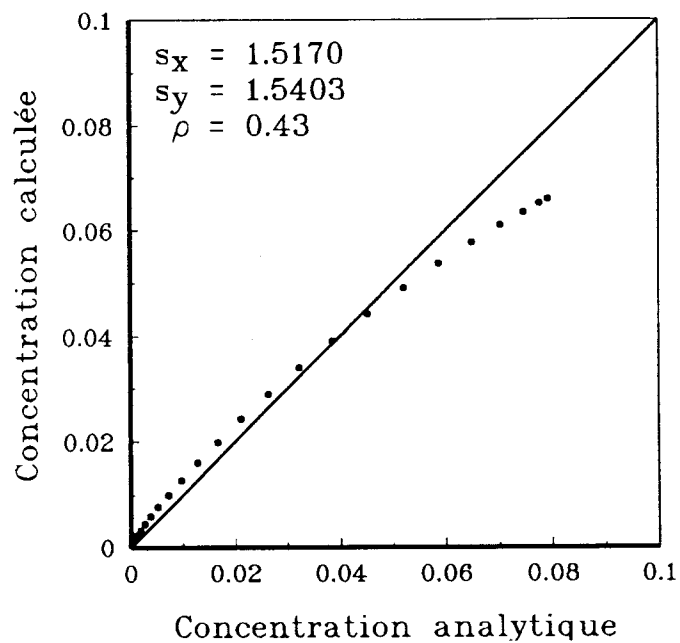


Figure 7.21.
Panache non-convectif -
Effet de lissage avec $\rho = 0,6$

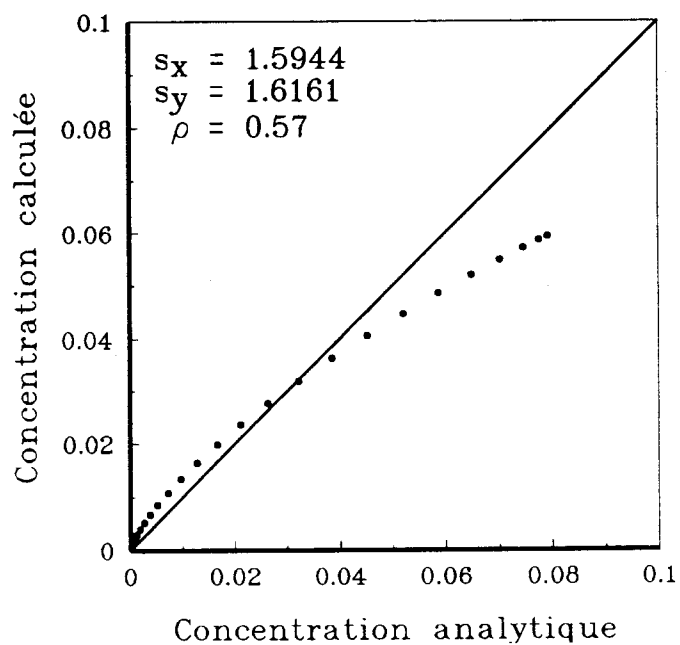


Figure 7.22.
Panache non-convectif -
Effet de lissage avec $\rho = 0,8$

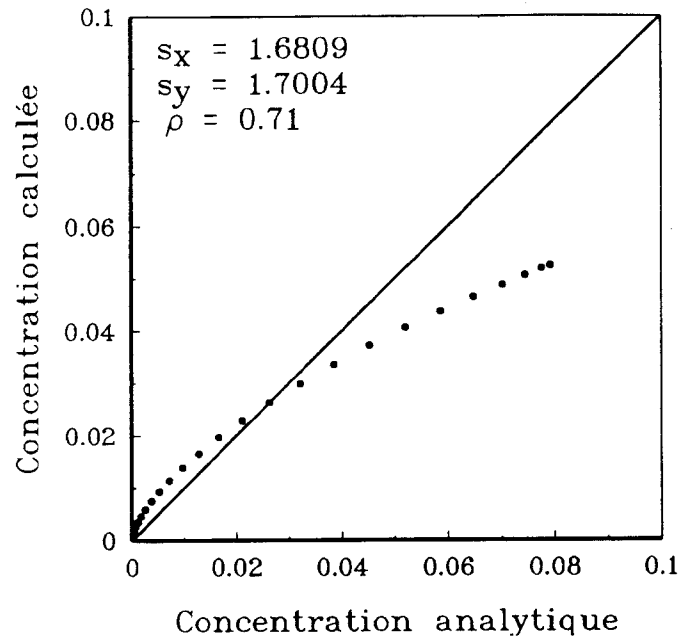


Figure 7.23.

**Panache non-convectif -
Effet de lissage avec $\rho = 1,0$**

7.3.3 Tests sur un panache convectif

Des tests ont également été effectués sur un panache se produisant dans un milieu en mouvement. L'âge des particules intervient alors dans le calcul de son rayon d'influence. Le but est d'ajuster le rayon d'influence à l'emprise locale du panache lequel s'élargit en s'éloignant du point d'injection.

La simulation consiste à injecter des particules en continu durant 10 000 secondes dans un canal d'une profondeur constante de 8 mètres. La vitesse du courant est de 1 m/s dirigée selon x .

Avec un coefficient de Manning de 0.04 et une dénivellation de 1 mètre sur 10 km, on trouve selon la formule de Taylor (relation 2.51) un coefficient de dispersion d'environ 0.659 m²/s.

Si l'injection a lieu à l'origine, avec un débit, une vitesse et une profondeur constante, la valeur analytique de la concentration en un point (x, y) et un temps t donnés, est calculée en coordonnées polaires de la façon suivante:

$$C(x, y, t) = \frac{Q_M \exp\left(\frac{\bar{u}}{2D}\right)}{4\pi HD} \int_0^\infty \frac{1}{\theta} \exp\left(-\theta - \frac{\bar{u}^2 r^2}{16D^2 \theta}\right) d\theta \quad [7.10]$$

Avec :



- Q_M : le débit massique à l'injection;
 H : la profondeur;
 $\bar{u}$: la vitesse moyenne de l'écoulement;
 r : le rayon polaire $\sqrt{x^2 + y^2}$;
 γ : l'angle d'ouverture-type du panache qui, pour de faibles valeurs, est obtenu ainsi:

$$\gamma = \frac{r}{4Dt}$$

Etant donné que cette forme algébrique est difficile à estimer analytiquement, l'approximation suivante est considérée comme satisfaisante:

$$\int_{\gamma}^{\infty} \frac{1}{\theta} \exp\left(-\theta - \frac{\bar{u}^2 r^2}{16D^2\theta}\right) d\theta \cong \sqrt{\frac{\pi D}{r\bar{u}}} \exp\left(-\frac{r\bar{u}}{2D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{2\gamma - r\bar{u}/2D}{2\sqrt{\gamma}}\right) \quad [7.11]$$

où,

$\operatorname{erfc}(x)$: la fonction complément-erreur.

Pour ce qui est de la valeur calculée, deux paramètres influent la précision des résultats: le débit particulaire et le rayon d'influence affecté aux particules. Ces deux paramètres ont fait l'objet de tests spécifiques.

L'écart-type de l'emprise des particules est calculé ainsi :

$$\sigma_p = \rho \sqrt{2Dt_p} \quad [7.12]$$

t_p : l'âge de la particule.

Puisque $\sqrt{2Dt_p}$ diffère d'une particule à l'autre, c'est la paramètre ρ qui sert par conséquent à régler le rayon d'influence de celles-ci.

Influence de ρ . Les figures 7.24 à 7.30 représentent une coupe transversale d'un panache, à 5 km du point d'injection pour différentes valeurs de ρ comprises entre 0,1 et 1. Avec une valeur de 1,



rappelons que chaque particule a alors une distribution de masse du même ordre de grandeur que la coupe transversale du panache lui-même dans la région où se trouve la particule. Le débit particulaire est de 3 particules par seconde.

Figure 7.24.
Panache convectif -
Transect à 5 kilomètres
Effet de lissage avec $\rho = 0,1$

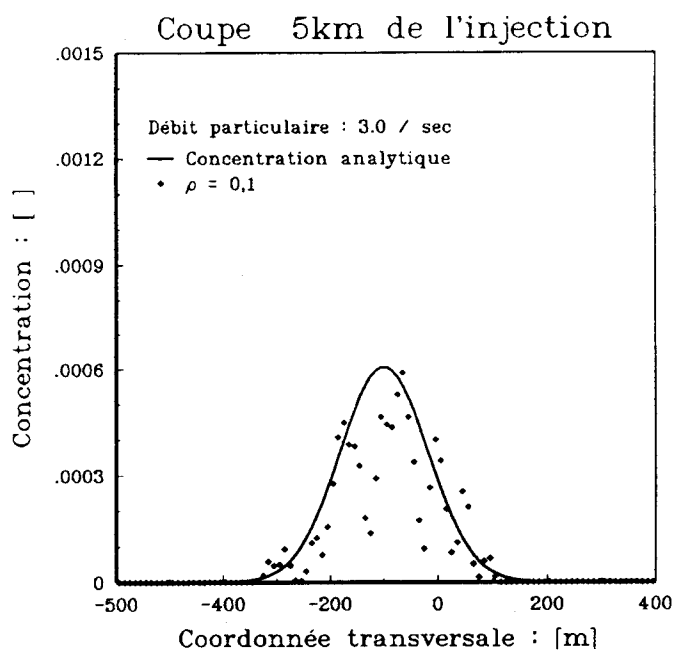


Figure 7.25.
Panache convectif -
Transect à 5 kilomètres -
Effet de lissage avec $\rho = 0,2$

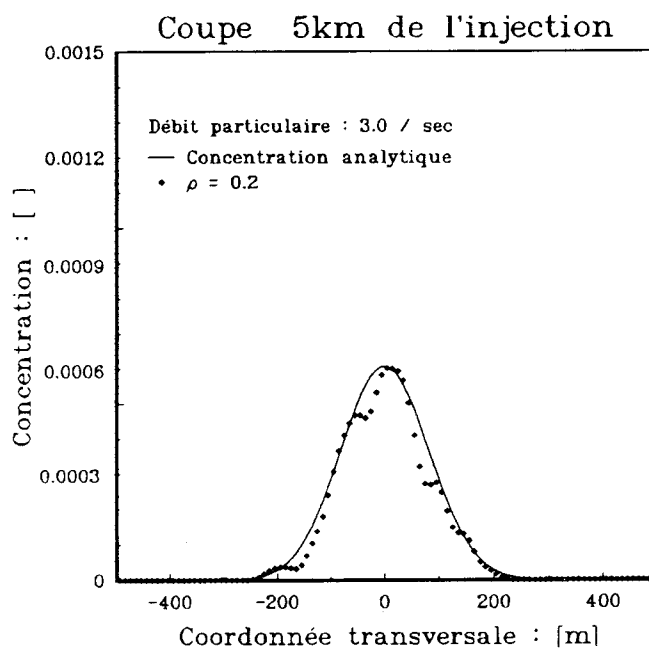




Figure 7.26.
Panache convectif -
Transect à 5 kilomètres -
Effet de lissage avec $\rho = 0,3$

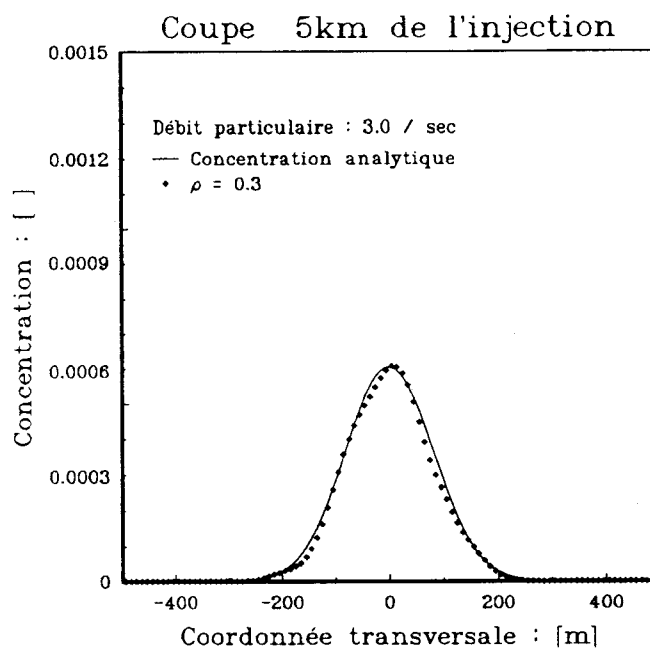


Figure 7.27.
Panache convectif -
Transect à 5 kilomètres -
Effet de lissage avec $\rho = 0,4$

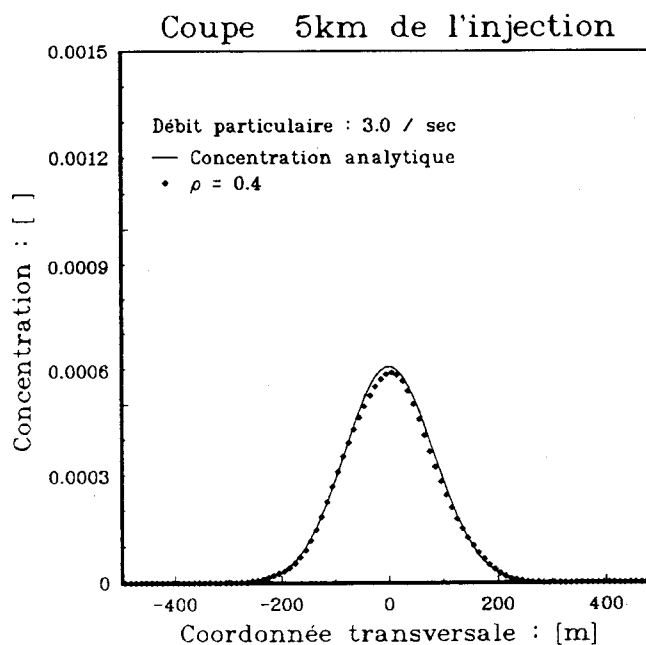


Figure 7.28.
Panache convectif -
Transect à 5 kilomètres -
Effet de lissage avec $\rho = 0,5$

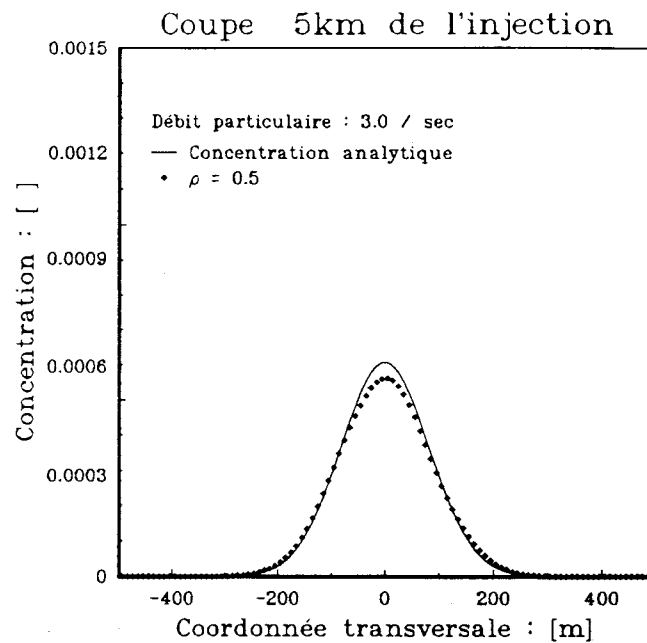


Figure 7.29.
Panache convectif -
Transect à 5 kilomètres -
Effet de lissage avec $\rho = 0,6$

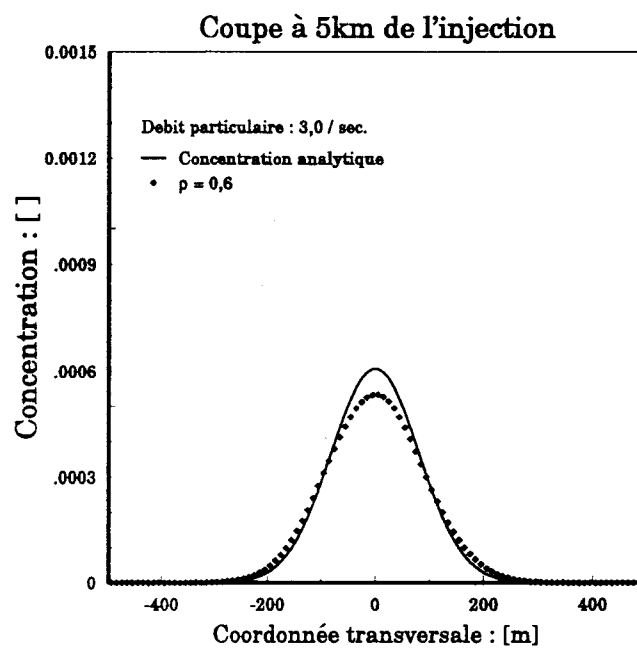




Figure 7.30.
Panache convectif -
Transect à 5 kilomètres -
Effet de lissage avec $\rho = 0,8$

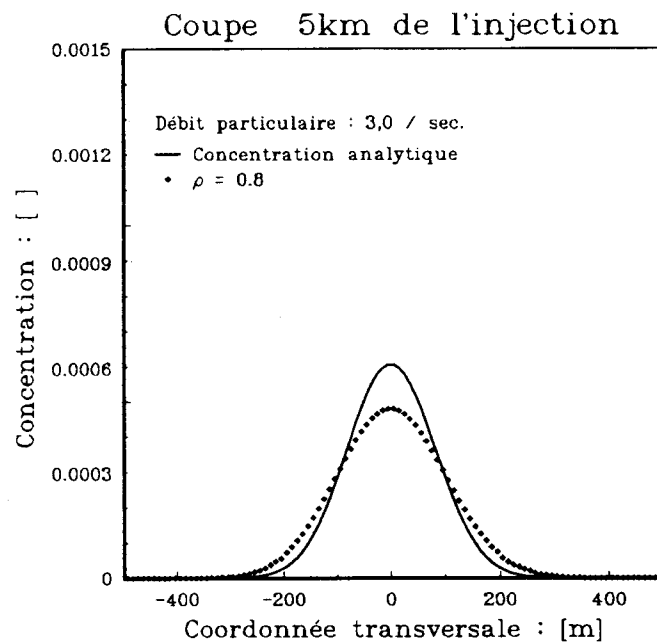
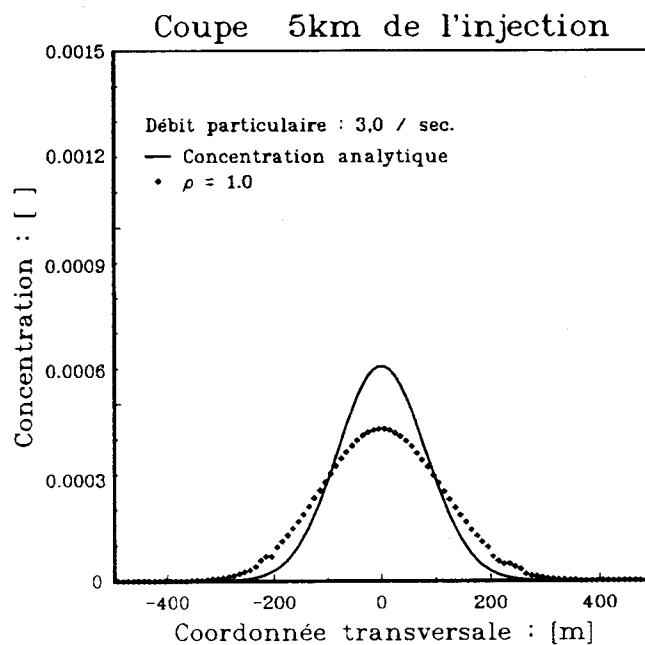


Figure 7.31.
Panache convectif -
Transect à 5 kilomètres -
Effet de lissage avec $\rho = 1,0$





Comme pour le panache non-convectif, l'effet du rayon d'influence sur le calcul des concentrations est manifeste. Il semble qu'un bon compromis entre le lissage et la diffusion artificielle des concentrations est ici atteint pour un p compris entre 0.3 et 0.4. Avec une telle valeur, les variations locales de concentration sont suffisamment atténuées sans que la distribution de masse globale du panache soit indûment affectée.

Effet du débit particulaire. Considérons maintenant l'effet du débit particulaire sur les calculs de concentration. La simulation est réalisée comme la précédente mais seul le débit particulaire injecté varie d'un essai à l'autre. Plusieurs simulations ont donc été réalisées. Seuls seront présentés les essais avec un débit de 0,5, 1,0, 3,0 et 6,0 part/s. Le calcul des concentrations a été effectué avec des valeurs de p égales à 0,3 et 0,4 qui constituent le registre optimal du paramètre. Les figures 7.32 à 7.37 illustrent les résultats obtenus pour des débits de 0,5, 1,0 et 6,0 part/s. Les résultats pour 3,0 part/s ont déjà été donnés aux figures 7.26 et 7.27.

Les figures 7.38 à 7.41 présentent les résultats longitudinaux de ces simulations dans l'axe central des panaches.

On voit ici que le débit particulaire joue également un rôle significatif dans la qualité des résultats obtenus. En effet, la précision s'améliore à mesure que le paramètre augmente en valeur. Cependant, le temps de calcul croît linéairement avec le nombre total de particules de la simulation et le compromis acceptable ne peut dépendre que du temps que l'utilisateur est disposé à investir dans la simulation et de la précision recherchée. Il semble qu'un débit particulaire de 6 part/s soit pour le cas présent une valeur optimale.

Ces conclusions à vérifier. On constate aussi que la précision des résultats se dégrade graduellement à mesure que le champ de particules s'éloigne du point d'injection. Cependant, l'effet du lissage est consistant peu importe où l'on se trouve dans l'axe des panaches et le registre optimal proposé demeure valide.



Figure 7.32.
Panache convectif -
Transect à 5 kilomètres
Effet du débit particulaire $Q_p = 0,5/s$
Effet de lissage avec $\rho = 0,3$

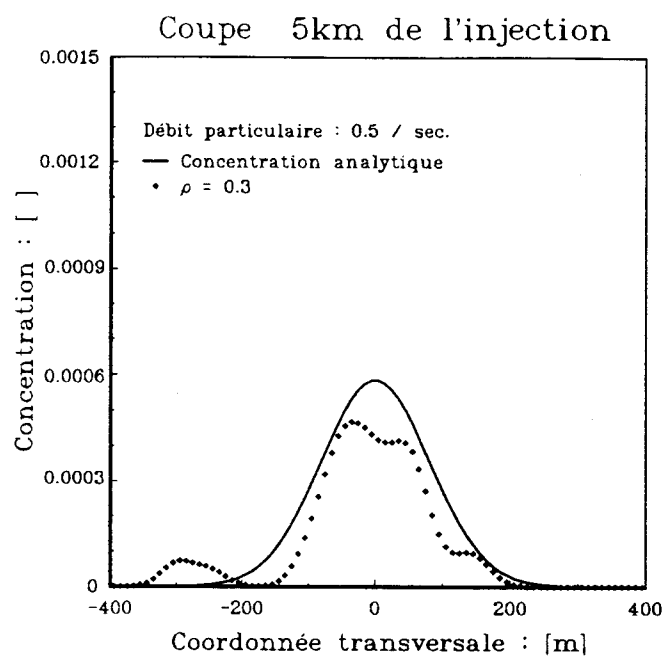


Figure 7.33.
Panache convectif -
Transect à 5 kilomètres -
Effet du débit particulaire $Q_p = 0,5/s$
Effet de lissage avec $\rho = 0,4$

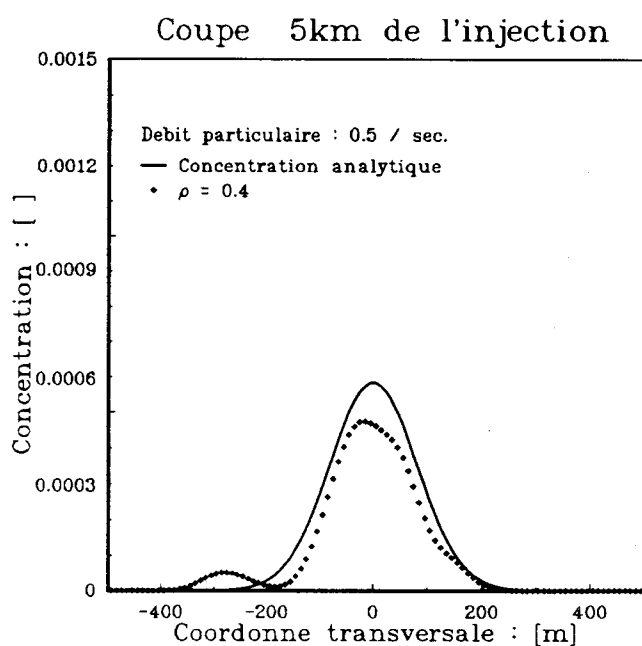


Figure 7.34.
Panache convectif -
Transect à 5 kilomètres -
Effet du débit particulaire $Q_p = 1/s$
Effet de lissage avec $\rho = 0,3$

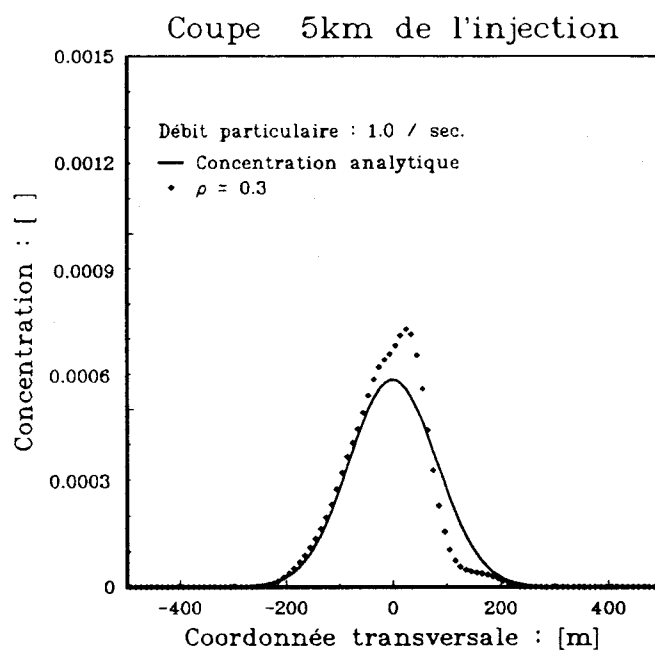


Figure 7.35.
Panache convectif -
Transect à 5 kilomètres -
Effet du débit particulaire $Q_p = 1/s$
Effet de lissage avec $\rho = 0,4$

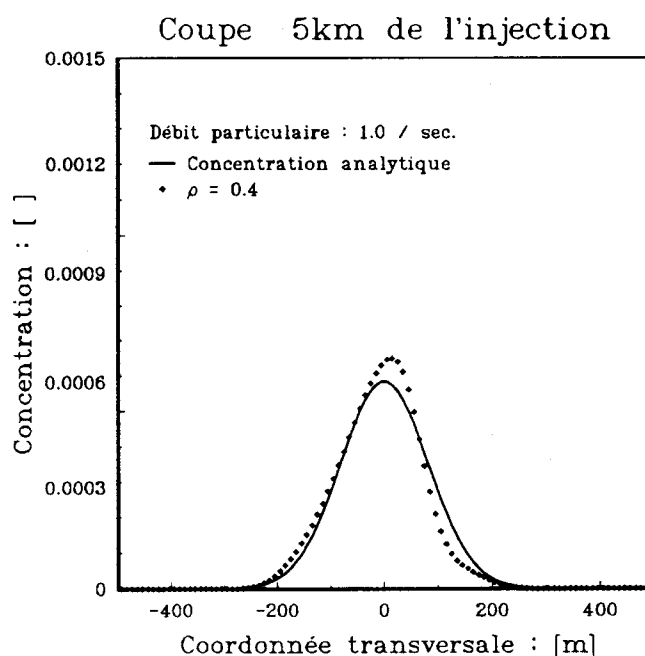




Figure 7.36.
 Panache convectif -
 Transect à 3 kilomètres -
 Effet du débit particulaire $Q_p = 6/s$
 Effet de lissage avec $\rho = 0,3$

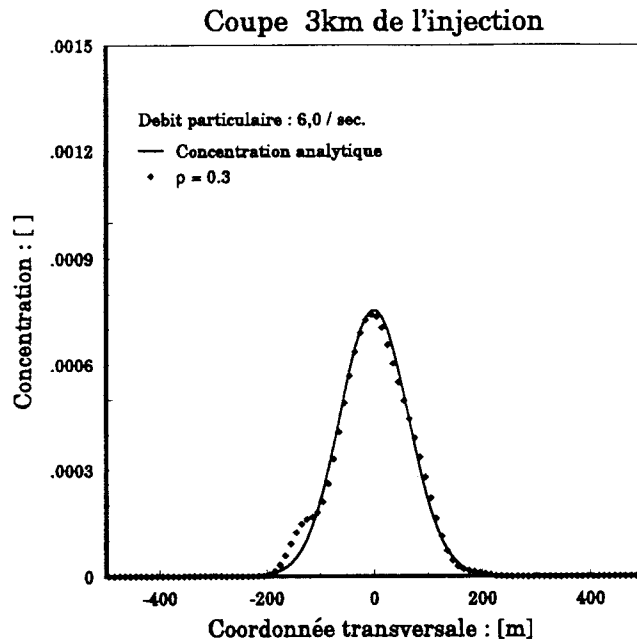


Figure 7.37.
 Panache convectif -
 Transect à 3 kilomètres -
 Effet du débit particulaire $Q_p = 6/s$
 Effet de lissage avec $\rho = 0,4$

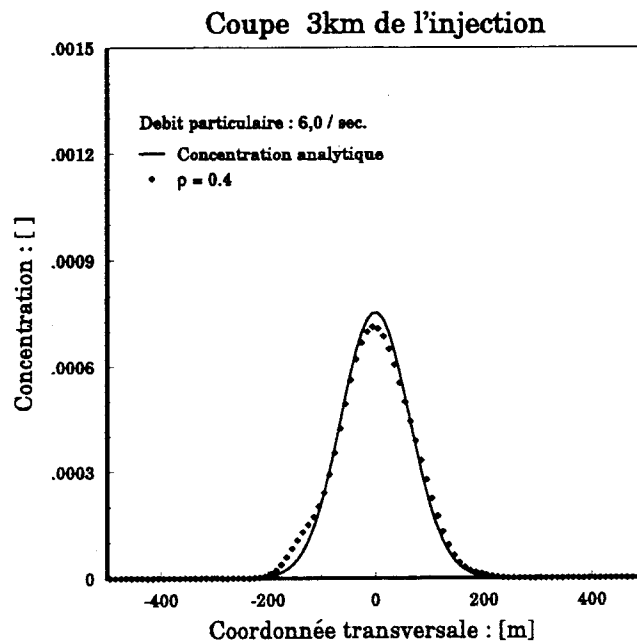


Figure 7.38.
Panache convectif -
Profil longitudinal -
Effet du débit particulaire $Q_p = 0,5$
Effet de lissage avec $\rho = 0,3$ et $0,4$

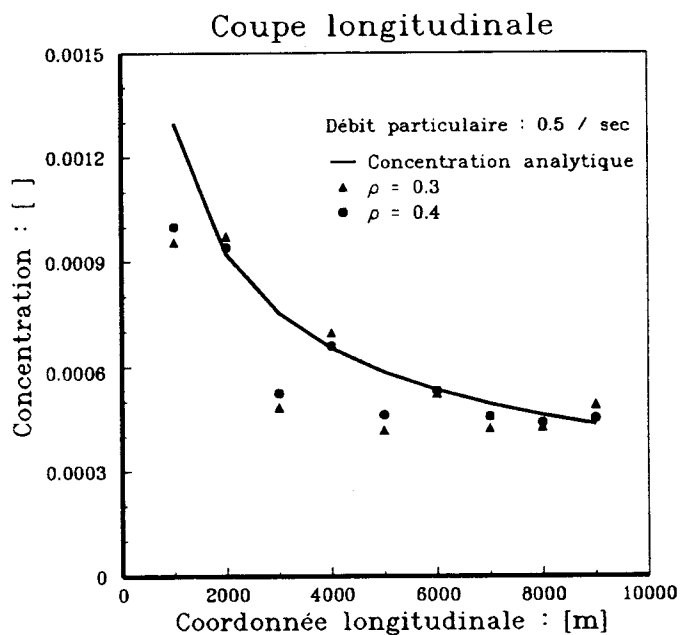


Figure 7.39.
Panache convectif -
Profil longitudinal -
Effet du débit particulaire $Q_p = 1/s$
Effet de lissage avec $\rho = 0,3$ et $0,4$

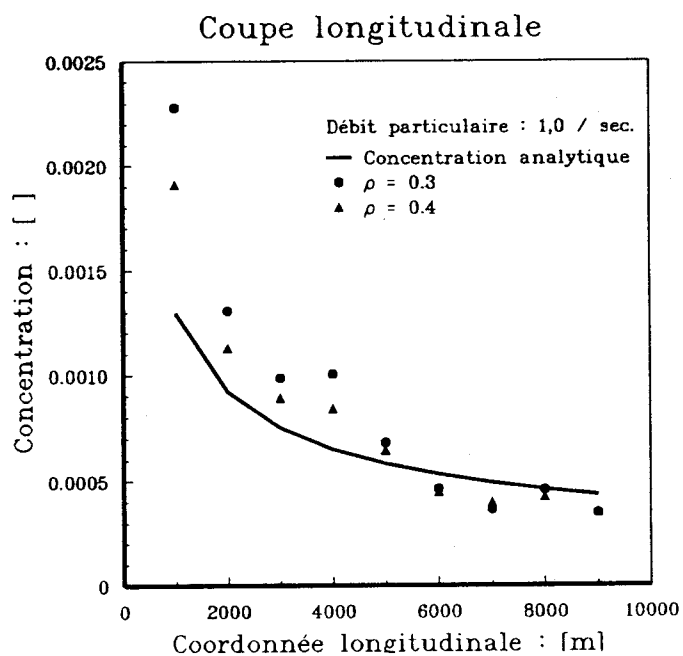




Figure 7.40.
Panache convectif -
Profil longitudinal -
Effet du débit particulaire $Q_p = 3/s$
Effet de lissage avec $\rho = 0,3$ et $0,4$

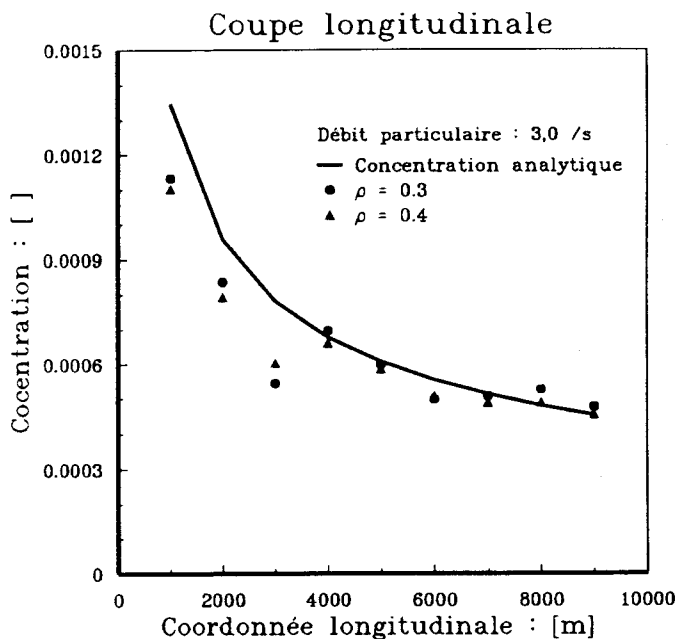
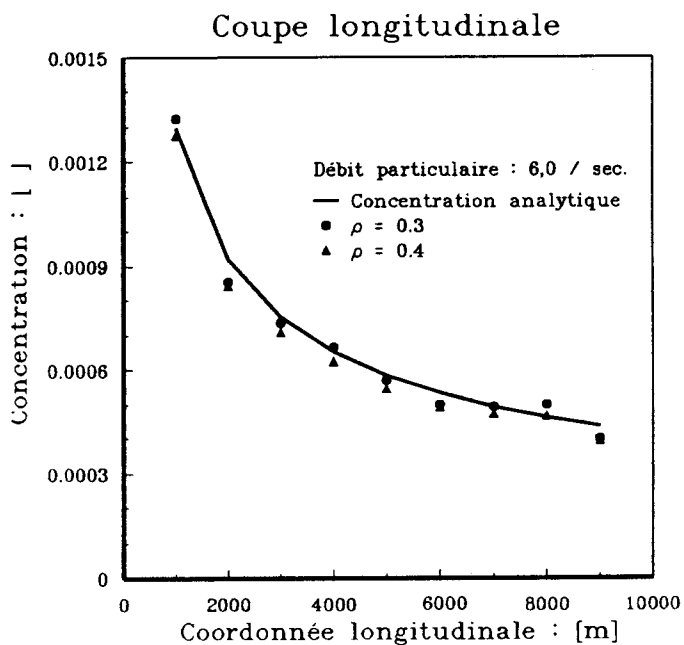


Figure 7.41.
Panache convectif -
Profil longitudinal -
Effet du débit particulaire $Q_p = 6/s$
Effet de lissage avec $\rho = 0,3$ et $0,4$





8 CONCLUSION

8.1 Sur le choix de la méthode lagrangienne

Un modèle de simulation de la propagation de substances en solution dans un milieu fluvial a été développé. Il s'appuie sur une méthode lagrangienne de "*suivi de particules*" désignée aussi par l'expression "*marche au hasard*". Cette méthodologie a été préférée à l'approche eulérienne classique (qui produit directement les concentrations) pour plusieurs raisons, entre autres, les qualités conservatives de l'approche particulaire, l'absence de diffusion parasite, la possibilité de "gérer" les particules comme des modèles individuels (position, âge et autres attributs), la mobilisation rapide (ex: le choix du point d'injection et l'absence de discrétisation du domaine de simulation) et les possibilités naturelles de couplage aux méthodes infographiques.

8.2 Sur les développements théoriques

Les équations de base du modèle mathématique, proposées originalement dans une forme tridimensionnelle, locale et instantanée, ont été transformées d'abord dans une forme pondérée dans le temps et intégrée dans la verticale pour obtenir une formulation bidimensionnelle horizontale compatible au modèle hydrodynamique lequel est représenté par les équations de Saint-Venant à deux dimensions. Les hypothèses sous-jacentes sont celles d'un milieu fluvial pas profond et bien mélangé dans la verticale. Une seconde série de transformations algébriques a permis d'exprimer ce modèle de transport de soluté dans la forme dite de Fokker-Planck, forme qui admet une solution lagrangienne à l'aide des équations de Itô.

La démarche théorique présentée permet de distinguer nettement les véritables processus diffusifs (moléculaires et turbulents) des phénomènes de dispersion qui, à cause de la simplification des dimensions (verticale ou horizontale), doivent être pris en compte mathématiquement comme de la diffusion plutôt que de la convection. Cette distinction est importante pour choisir de manière appropriée la valeur des coefficients de diffusion.



8.3 Sur le choix des paramètres de diffusivité

Une méthode permettant d'estimer la valeur des coefficients de diffusion turbulente et de dispersion a été proposée. Celle-ci est du type "*modèle à zéro équation*" puisqu'elle est basée sur la théorie de la "*longueur de mélange*". Elle tient compte de nombreuses expériences en laboratoire et sur le terrain dont les résultats sont rapportés dans la bibliographie. Comme pour tout modèle paramétrique, la calibration précise des coefficients dépend du contexte d'application et requiert des données sur le terrain. Une telle activité a été menée sur le lac Saint-Pierre au cours du présent projet et les résultats sont rapportés *in extenso* dans des rapports distincts¹.

8.4 Sur les choix algorithmiques et leur vérification

Plusieurs principes algorithmiques visant à la fois la précision des calculs et la rapidité d'exécution ont présidé à l'implantation informatique. Les choix qui ont été effectués visaient aussi à résoudre certaines difficultés inhérentes à l'utilisation des méthodes particulières traditionnelles, comme la dépendance entre la précision des concentrations et la taille du pas de grille de calcul. Les nombreux tests qui ont été réalisés ont permis de vérifier la programmation et de choisir les algorithmes les plus performants pour atteindre ces objectifs. Ce fut le cas plus particulièrement pour le calcul de la convection (Algorithme d'Euler semi-implicite) et des concentrations (Algorithme de lissage diffusif contrôlé: emprise gaussienne des particules), deux aspects primordiaux du modèle.

8.5 Sur l'implantation informatique et la convivialité

Le programme informatique baptisé *PANACHE* a été développé en langage C et l'interface-usager (*GUI*) a été conçue de manière à pourvoir la maximum de convivialité à l'utilisateur. Pour ce faire, c'est la plate-forme *OS2/PM* (Presentation Manager) sur micro-processeurs INTEL-386/486 qui a été privilégiée. L'évolution récente et à court terme du marché informatique confirme la valeur de ce choix. A cause des ressources infographiques qu'offrait cette plate-forme, de nombreuses

¹ Voir le Rapport #1, volume 2: *Caractérisation de la diffusivité des écoulements du tronçon Tracy - lac Saint-Pierre par tests de diffusion et télédétection aéroportée.*

Voir aussi le Rapport #1, volume 3: *Analyse numérique de la contamination du tronçon Tracy - lac Saint-Pierre par les effluents industriels et les tributaires*



fonctionnalités complémentaires ont pu être implantées dans le logiciel, entre autres, pour utiliser facilement diverses formes d'injection de contaminants, pour suivre la progression des particules, ainsi que pour visualiser les données hydrodynamiques et morphométriques.

8.6 Sur les réserves d'application

La capacité du programme informatique de simuler la propagation de plusieurs milliers de particules sur de longues périodes a été démontrée. Cette qualité ouvre la porte à une plus grande recherche de précision, laquelle dépend de l'utilisation d'un grand nombre de particules dans les simulations. Mais la méthode lagrangienne, pas moins que toute autre approche, ne permet pas de suppléer aux imprécisions du champ de vitesse qui sert à transporter les particules. Cette donnée, on l'a vu, est produite au préalable à l'aide d'une démarche eulérienne appelée "*modélisation hydrodynamique*". Les méthodes de calcul courantométrique actuelles conservent la masse liquide en moyenne, mais la viscosité artificielle qui est introduite dans leur formulation diminue la précision locale sur la conservation du débit. L'imprécision des vitesses, en général de l'ordre de 10%, peut atteindre jusqu'à 30% localement, là où une discrétisation insuffisante de la bathymétrie ou de la morphométrie et la rigidité numérique de l'écoulement ne permettent pas au modèle hydrodynamique d'obéir assez vite et souplement aux fluctuations du milieu.

De plus, il est reconnu que les résultats de la modélisation hydrodynamique diminuent en précision à mesure que l'on se rapproche des limites du domaine de simulation (frontières amont et aval et zones littorales). Il est important de s'assurer que la discrétisation (grille du modèle) est élaborée avec un degré suffisant de précision dans les zones de cette nature, et où viennent se jeter les émissions polluantes qu'on désire modéliser. Ainsi, même si la méthode lagrangienne ne requiert pas d'effort de maillage, la production d'un champ de vitesse précis, essentielle pour obtenir des concentrations fiables et représentatives, dépend d'une bonne discrétisation hydrodynamique dans la zone d'analyse.

En conséquence, et malgré toutes les précautions, des fluctuations artificielles des concentrations peuvent résulter des imprécisions du champ de vitesses. Les résultats devraient cependant refléter les niveaux attendus, mais en *valeur moyenne* seulement. Il est bon de noter qu'aucun biais sys-



tématique et cumulatif ne peut entacher les simulations de concentration étant donné les qualités conservatives de l'approche lagrangienne. Une certaine interprétation des résultats demeure donc nécessaire malgré la puissance et la fiabilité des algorithmes lagrangiens.

8.7 Sur une nouvelle méthodologie d'analyse de la contamination

Dans un programme conçu pour analyser la contamination, il est nécessaire de pouvoir vérifier le degré de dépassement de normes de contamination en fonction des rejets polluants. Le lecteur trouvera dans un rapport distinct¹ l'exposé d'une nouvelle méthodologie de calcul des "*Aires pondérées inutilisables*" (API) qui s'inspire de la *méthodologie de modélisation des microhabitats* (Instream Flow Incremental Methodology: IFIM) utilisée de plus en plus dans les sciences halieutiques. La méthode proposée permet d'estimer les aires fluviales affectées par la contamination, en tenant compte du degré de concentration des polluants et des usages qui sont ciblés par l'analyse. Cette approche, implantée dans le logiciel, a été appliquée pour la première fois dans le cadre du présent projet et elle démontre une nouvelle fois le potentiel de la modélisation numérique pour supporter l'analyse des interventions sur le milieu aquatique, pour mettre en évidence les problèmes, ainsi que pour vérifier la valeur des diverses solutions envisagées.

¹ Voir le Rapport #1, volume 3 de la présente série: *Analyse numérique de la contamination du tronçon Tracy - lac Saint-Pierre par les effluents industriels et les tributaires.*



BIBLIOGRAPHIE

- Ahlstrom, S.W. and H.P. Foote (1976).** Transport Modeling in the Environment Using the Discrete-Parcel-Random-Walk Approach. Proc. of the Conf. Env. Modeling Simulation, Ott. W., ed., EPA 60019-76-016., pp.833-837
- Andricevic, R. and E. Foufoula-Georgiou (1990).** A Particle Tracking Method of Kinetically Adsorbing Solute in Heterogeneous Porous Media. In Computational Methods in Subsurface Hydrology. Proceeding of the Eighth International Conference on Computational Methods in Water Resources, Venice, Italy. Editeurs: Gambolati, G.; A. Rinaldo; C.A. Brebbia; W.G. Gray et G.F. Pinder.
- Boudreault, A., J.F. Bellemare, M. Leclerc et G. Shooner (1988).** Projet Sainte-Marguerite. Avant-projet - Phase 1. Etude des répercussions du détournement de la rivière Aux Pékans sur le saumon de la Moisie. Rapport sectoriel II présenté à la Direction Environnement d'Hydro-Québec par Gilles Shooner & Ass., 238 p. et annexes, (mai).
- Boudreault, A., J.F. Bellemare, M. Leclerc et G. Shooner (1989).** Projet Sainte-Marguerite. Etude des répercussions du détournement de la rivière Aux Pékans sur les habitats salmonicoles de la rivière Moisie. Rapport présenté à la Vice-Présidence Environnement d'Hydro-Québec par Gilles Shooner & Ass., 120 p. et 4 annexes, (sept.).
- Brebbia, C.A. and P. Partridge (1976).** Finite element models for circulation studies. In: Brebbia [ed.], Mathematical models for environmental problems, Pentech Press, London.
- Broissia (De), M. (1987).** Modèles mathématiques utilisés pour l'évaluation des incidences environnementales au Canada. Conseil canadien de la recherche sur l'évaluation environnementale, 36 p.
- Cochet, J.F. (1979).** Modélisation d'écoulements stationnaires et non-stationnaires par éléments finis. Thèse de docteur-ingénieur, Université de Compiègne (France).
- Connor, J.J. and J.D. Wang (1974).** Finite element modeling of hydrodynamic circulation. In: Brebbia, C.A. and J.J. Connor [eds.], Numerical methods in fluid dynamics, Pentech Press, London.



-
- Dhatt, G., M. Leclerc, P. Dupuis et A. Soulaïmani (1985).** Modélisation des écoulements lents et rapides à surface libre. Rapport scientifique à la Direction Environnement, Hydro-Québec, INRS-Eau RS#187, TAO-85-02, 146 p.
- Dhatt, G. et G. Touzot (1981).** Une présentation de la méthode des éléments finis. Maloine, Paris, Presses de l'université Laval, Québec.
- Dougherty, D.E., A. Bagtzoglou and a.F.B. Tompson (1989).** Particle Methods for Reactive Transport: Review and Consistant Formulation. *EOS, Trans. of the Amer. Geophys. Un.*, 70:43:1078.
- Dykes, P.P.G. and Robertson, T. (1985).** The simulation of offshore turbulent dispersion using seeded eddies. *Appl. Math. Mod.*, 9:429-433.
- Elder, J.W. (1959).** The dispersion of marked fluid in turbulent shear flow. *J. Fluid Mech.*, 5: 544-560.
- Feller (1968).** Introduction to probability theory and its applications. Vol. 1, 3rd ed. John Wiley, N.Y., 509 p.
- Fischer, H.B., E.J. List, R.C.Y. Koh, J. Imberger and N.H. Brooks (1979).** Mixing in Inland and coastal Waters. Academic Press, Montréal. 483 p.
- Fischer, H.B. (1976b).** Transverse Mixing in a Sand-Bed Channel. U.S. Geological Survey Professional Paper 575-D, D267-D272.
- Grotkop, G. (1973).** Finite element analysis of long period waves. *Comp. Meth. in App. Res. and Eng.*, 2.
- Heemink, A.W. (1990).** Stochastic modelling of dispersion in shallow water. *Stochastic hydrology and hydraulics* 4(1990) pp. 161-174
- Herrling, B. (1982).** Coupling of one and two-dimensional finite elements for the computation of tidal flow in estuaries. *Adv. Wat. Res.*, V5.
- Holley, E.R., and Abraham, G. (1973a).** Laboratory studies on transverse mixing in rivers. *J. Hydraul. Res.*, 11: 219-253.
- Holley, E.R., and Abraham, G. (1973b).** Field tests on tranverse mixing in rivers. *J. Hydraul. Div., Proc. Am. Soc. Civ. Eng.*, 99: 2313-2331.
-



-
- Jackman, A.P., and Yotsukura, N. (1977).** Thermal Loading of Natural Streams. U.S. Geological Survey Professional Paper 991.
- Jazwinski, A.H. (1970).** Stochastic processes and filtering theory. Academic Press. N.Y.
- Kawahara, M. and T. Umetsu (1986).** Finite elements methods for moving boundary problems in river flows. *Int. J. Num. Meth. fluids*, 6(6):365-386.
- Kinzelbach, W. et P. Ackerer (1986).** Modélisation de la propagation d'un contaminant dans un champ d'écoulement transitoire. *Hydrogéologie*, 2:197-206.
- Kinzelbach, W. (1987).** Methods for the Simulation of Pollutant Transport in Ground Water - A Model Comparison. Proceeding of the Solving Ground water Problems with Models, Conference and Exposition, Vol. 1. Denver, Colorado. pp. 656-675.
- Konikow, L.F. et T.D. Bredehoeft (1978).** Computer model of two-dimensional solute transport and dispersion in ground water. Techniques of Water-Resources Investigation of the USGS, Book 7, Chap. C2, US Gov. Print. Off., Wash. 90 p.
- Lau, Y.L., and Krishnappan, B.G. (1977).** Transverse dispersion in rectangular channels. *J. Hydraul. Div. (ASCE)*, 103:1173-1189.
- Leclerc, M., G. Dhatt, J.L. Robert, J.C. Tessier, A. Soulaïmani, P. Dupuis et Y. Matte (1987).** Modélisation des écoulements de l'Archipel de Montréal par éléments finis: aspects divers de l'application. *Rev. Int. Sc. Eau*, 3(2): 41-56.
- Leclerc, M., P. Boudreau et L. Belzile (1990a).** Etude d'impact d'avant-projet, phase 1, projet Ashuapmushuan - Modélisation numérique des habitats à ouananiche d'un tronçon représentatif (km68) de la rivière Ashuapmushuan. Pour le consultant principal Groupe Environnement Shooner Inc. et la Vice-présidence Environnement d'Hydro-Québec. Rapport scientifique INRS-Eau #RS-316. 65 p., 4 annexes, décembre.
- Leclerc, M., J.F. Bellemare et S. Trussard (1990b).** Simulation hydrodynamique de l'estuaire supérieur du fleuve Saint-Laurent (Canada) avec un modèle aux éléments finis couvrant-découvrant. *Rev. Can. Gén. Civ.* 17(5):739-751.
- Leclerc, M., G. Dumas, J.F. Bellemare et G. Dhatt (1990c).** A finite element model of estuarian and river flows with moving boundaries. *Advances in Water Resources*, 4(13):158-168.
-



-
- Lynch, D.R. and W.G. Gray (1978).** Finite element simulation of shallow water problems with moving boundaries. In: Proc. of the Second Int. Conf. on Fin. Ele. in Wat. Res., Pentech Press, London, July.
- Mackay, D. and S. Paterson (1978).** Oil Spill Modelling, Proceedings of a Workshop held in Toronto, Canada, Nov., 7-8, 1978. Published by: Inst. for Env. Stud., Univ. of Toronto, Pub. #EE-12, 199 p.
- Mackay, J.R. (1970).** Lateral mixing of the Liard and Mackenzie Rivers downstream from their confluence. *Can. J. Earth Sci.*, 7: 111-124.
- McDowell, D.M. and B.A. O'Connor (1977).** Hydraulic Behavior of estuaries. The Macmillan Press Ltd., London, 292 p.
- Miller, A.C., and Richardson, E.V. (1974).** Diffusion and dispersion in open channel flow. *J. Hydraul. Div.*, ASCE, 100:159-171.
- Okoye, J.K. (1970).** Characteristics of Transverse Mixing in Open-channel Flows. Rep. KH-R-23, California Institute of Technology, Pasadena, California.
- Ouellet, Y., P. Dupuis et A. Soulaïmani (1986).** Modélisation d'un écoulement tourbillonnaire en régime permanent. *J. Can. Gén. Civ.* (13):310-318
- Prickett, T.A., T.G. Naymik and C.G. Lonnquist (1981).** A Random-Walk Solute Transport Model for Selected Groundwater Quality Evaluations. Illinois State Water Survey, Champaign, Bulletin 65, 101 p.
- Prych, E.A. (1970).** Effects of Density Differences on Lateral Mixing in Open Channel Flows. Rep. No. KH-R-21, California Institute of Technology, Pasadena, California.
- Robert, J.L. (1983).** Modélisation tridimensionnelle des écoulements à surface libre, permanents et non-permanents par la méthode des éléments finis. Thèse PhD, Université Laval, Génie civil, 150 p.
- Rodi, Wolfgang (1980).** Turbulence models and their application in hydraulics - a state of the art review. Ed. AIRH-IAHR, Delft, The Netherlands. 104 p.
-



-
- Sayre, W.W., and Chang, F.M. (1968).** A Laboratory Investigation of the Open Channel Dispersion Process for Dissolved, Suspended, and Floating Dispersants. U.S. Geological Survey Professional Paper 433-E.
- Sayre, W.W., and Yeh, T. (1973).** Transverse Mixing Characteristics of the Missouri River Downstream from the Cooper Nuclear Station. Iowa Institute of Hydraulic Research Rep. No. 145.
- Schlichting H. (1979).** Boundary-Layer Theory. Mc-Graw-Hill, N.Y, Montréal. 817 p.
- Schwartz, F.W. and A. Crowe (1980).** A deterministic-probabilistic model for contaminant transport - User manual, 158 p., *Rep. NUREG/CR-1609*, US Nucl. Reg. Comm., Washington, D.C.
- Smith, L. and F.W. Schwartz (1980).** Mass Transport, 1. A Stochastic Analysis of Macroscopic Dispersion. *Water Res. Res.*, **16**(2), pp. 303-313.
- Sullivan, P.J. (1968).** Dispersion in a Turbulent Shear Flow. Ph.D. thesis, Univ. of Cambridge, Cambridge, England.
- Sydor, M. (1978).** Study of the two-Dimensional model of the Saint-Lawrence River. Rapport Technique #16 soumis au Comité d'étude sur le fleuve Saint-Laurent par: Water Planning and Management Branch, Environment Canada. Présenté dans: Oil Spill Modelling, Proceedings of a Workshop held in Toronto, Canada, Nov., 7-8, 1978. Published by: Inst. for Env. Stud., Univ. of Toronto, Pub. #EE-12, 199 p.
- Taylor, C. and J.M. Davis (1975).** Tidal and long wave propagation: a finite element approach. *Computer and Fluids*, 3.
- Tompson, A.F.B. and D.E. Dougherty (1988).** On the Use of Particle Tracking Methods for Solute Transport in Porous Media. In *Computational Methods in Water Resources*, Vol. 2, Numerical Methods for Transport and Hydrologic Process. Editeurs: Celia, M., L. Ferrand, C. Brebbia, W.G. Gray et G. Pinder, Elsevier, pp. 227-232.
- Tompson, A.F.B. and D.E. Dougherty (1990).** Particle-Grid Methods for Reacting Flows in Porous Media: Application to Fisher's equation. In: *Computational Methods in Subsurface Hydro-*
-



- logy. Proceeding of the Eighth International Conference on Computational Methods in Water Resources, Venice, Italy. Editeurs: Gambolati, G.; A. Rinaldo; C.A. Brebbia; W.G. Gray et G.F. Pinder.
- Tompson, A.F.B. and L.W. Gelhar (1990).** Numerical simulation of Solute Transport in Three-Dimensional, Randomly Heterogeneous Porous Media. *Wat. Res. Res.* **26**(10):2541-2562.
- Uffink, G.J.M. (1983).** A Random Walk Method for the Simulation of Macrodispersion in Stratified Aquifer. Relation of Groungwater Quantity and Quality, Proceeding of the Hamburg Symposium, IAHS. no 146, pp. 103-114.
- Uffink, G.J.M. (1987).** Modeling of Solute Transport with the Random Walk Method. In. Groundwater Flow and Quality Modelling. Proceeding of the NATO Advanced Research Workshop on Advances in Analytical and Numerical Groundwater Flow and Quality Modelling, Lisbon, Portugal. Series C: Mathematical and Physical Sciences, Vol. 224. Editeur: Custodio, E., A. Gurgui et J.P.L. Ferreira (1987). 843p.
- Van Dam, G.C. (1981).** Models of dispersion. In: Pollutant transfer in the sea. Vol.1 Kullenberg, G. (ed.) CRC press, Boca Raton, Florida. pp. 91-160.
- Walters, R.A. and R.T. Cheng (1980).** Accuracy of an estuarine hydrodynamic model using smooth elements. *Wat. Res. Res.* **16**(1):187-195. Feb.
- Walton, W.C. (1989).** Numerical Groundwater Modeling: Flow and Contaminant Migration. Lewis Publishers, Inc., NWWA, 272P.
- Yotsukura, N., and Sayre, W.W. (1976).** Transverse mixing in natural channels. *Water Resour. Res.*, 12: 695-704.
- Yotsukura, N., Fischer, H.B., and Sayre, W.W. (1970).** Measurement of Mixing Characteristics of the Missouri River between Sioux City, Iowa and Plattsmouth, Nebraska. U.S. Geological Survey Water-Supply Paper 1899-G.



LISTE DES SYMBOLES

Chapitre 2

$\langle \rangle$:	convention pour désigner un vecteur-ligne; $\langle \rangle^T \equiv \{ \}$;
$[]$:	convention pour désigner une matrice;
$\{ \}$:	convention pour désigner un vecteur-colonne;
a :	une constante quelconque;
C :	la concentration d'un soluté;
c_1 :	une constante de l'ordre de 1;
c_2 :	une constante du type coefficient de corrélation;
C_w :	le coefficient de traînée du vent;
D_j' :	un coefficient de diffusion turbulente établi empiriquement;
D_f :	diffusivité de fond (formule de Taylor);
D_k :	la valeur nodale de la diffusivité turbulente donnée par l'élément k connecté au noeud;
D_L :	diffusivité longitudinale;
D_N :	diffusivité turbulente transversale (N pour normal à l'écoulement);
D_T :	un coefficient de diffusion turbulente;
D/Dt :	l'opérateur de dérivation totale;
E :	l'espérance mathématique;
f_c :	le facteur de Coriolis;
f_i :	les flux diffusifs de soluté à l'échelle moléculaire;
f_i' :	les flux diffusifs turbulents;
F_x, F_y :	les forces massiques résultantes en x et y;
g :	l'accélération gravitationnelle;
h :	le niveau d'eau par rapport à un référentiel de niveau;
h' :	la cote bathymétrique par rapport à un référentiel de niveau;
H :	la profondeur totale;
$[I]$:	la matrice identité;
K :	une constante empirique entre 0,135 et 0,17;



n :	le coefficient de frottement de Manning;
N :	le nombre d'éléments ayant le noeud considéré dans leurs connectivités;
N, T :	les directions normale et tangentielle à la frontière;
T :	la période du filtre de la turbulence;
u, v :	les composantes de la vitesse selon x et y (moyenne dans la verticale);
$ \bar{u}' $:	la moyenne des valeurs absolues des fluctuations;
u_* :	la vitesse dite "de cisaillement";
$ V $:	le module de la vitesse moyenne du courant;
W_x, W_y :	les composantes de la vitesse du vent;
$\langle \alpha, f \rangle$:	un filtre de la turbulence;
β :	une constante de calibration;
β_k :	l'angle au noeud considéré de l'élément k;
δ :	une distance caractéristique de la turbulence;
κ :	le nombre de Prantl (environ 0,4);
ρ :	la masse spécifique de l'eau;
ρ_a :	la masse spécifique de l'air;
σ_T :	le nombre de Schmidt applicable au transport d'espèces en solution;
τ :	une référence de temps mobile;
$f(\tau)$:	une fonction de pondération.
τ_f :	la contrainte de cisaillement sur le fond;
τ_{ij} :	contraintes de Reynolds (dispersion de la quantité de mouvement).
τ'_{xz} :	une contrainte tangentielle selon x produite par les fluctuations de vitesse selon z;

Chapitre 4

a :	un multiplicateur (générateur de nombres);
b :	le nombre de bits dans un mot machine;
c :	un incrément (générateur de nombres);



E_i :	la $i^{\text{ème}}$ valeur produite d'un générateur de nombres aléatoires;
m :	un modulo (générateur de nombres);
N :	le nombre de dimensions spatiales prises en compte par le problème;
Z_1, Z_2 :	des variables aléatoires de distribution normale de moyenne nulle et de variance 1, i.e., $N(0,1)$;
σ_i^2 :	la variance d'une distribution gaussienne selon les axes considérés.

Chapitre 5

$[]$:	la partie entière d'un nombre;
D_m :	la valeur moyenne du coefficient de diffusion évaluée sur le chemin convectif (m sous-pas);
(i_p, j_p) :	la maille de repérage à laquelle appartient la particule;
$[L]$:	une matrice triangulaire inférieure;
m :	le nombre de subdivisions du pas de temps de simulation;
S_i :	les coordonnées des sommets d'un élément de la grille d'éléments finis;
S_i' :	les coordonnées des sommets d'un élément de la grille d'éléments finis déplacée;
$\{T\}$:	un vecteur-tampon;
(u_i, v_i) :	les vitesses aux noeuds de la grille d'éléments finis;
(u^+, v^+) :	le champ de vitesse apparent;
$[U]$:	une matrice triangulaire supérieure;
x_{est} :	l'abscisse du coin sud-est d'une maille de la grille de repérage;
y_{sud} :	l'ordonnée du coin sud-est d'une maille de la grille de repérage;
(x_o, y_o) :	les coordonnées de l'origine de la grille de repérage;
(x_p, y_p) :	les coordonnées d'une particule;
(x', y') :	la position finale d'un point ou d'une particule transporté dans un champ de vitesse;
α :	un coefficient définissant le degré implicite d'un algorithme de calcul (ex: Euler);
$(\Delta x, \Delta y)$:	les incréments en x et y de la grille de repérage;



λ_i : des fonctions d'interpolation sur une grille d'éléments finis (coefficients de Lagrange).

Chapitre 6

$C_p'(x, y, t)$: l'influence unitaire d'une particule p ;

$C_i(x, y, t)$: la concentration réelle d'un contaminant i au point (x, y) au temps t ;

C_i : la concentration de soluté sur la maille i ;

C_i^- : la concentration d'un contaminant dans sa forme dégradée;

$H(s)$: la profondeur locale selon s ;

$\bar{H}_i$: la profondeur moyenne de la maille i ;

$I_p(x, y)$: l'influence locale adimensionnelle d'une particule;

k : une constante numérique;

L : la longueur d'un système d'injection;

m_p : la masse de contaminant portée par une particule p ;

m_p' : la masse unitaire d'une particule [kg];

n_i : le nombre de particules dans une maille;

M : la masse totale de contaminant (charge) injectée durant la simulation;

M_i : la masse totale du contaminant i injecté durant la simulation;

N : le nombre total de particules injectées durant une simulation;

N, T : les directions normale et tangentielle à l'écoulement;

N_p : une distribution normale de moyenne $(\bar{x}_p, \bar{y}_p)$ et d'écart-type σ_p ;

O : le nombre d'intervalles en y , soit la dimension en y de la matrice de concentrations;

$q(s)$: le débit spécifique en s ;

$q_p(s)$: le débit particulaire spécifique;

Q_M : le débit massique à l'injection;

Q_{Mi} : le débit massique journalier du contaminant i [kg/d];

$Q_M(t_{p0})$: le débit massique de contaminant lors de l'injection d'une particule donnée (temps t_{p0});



$Q_p(t_{p0})$:	la débit particulaire au même moment (temps t_{p0});
s :	une coordonnée curviligne transversale;
(s_g, s_d) :	les coordonnées locales des rives gauche et droite d'une section;
t :	le temps de la simulation;
t_p :	l'âge d'une particule;
t_{p0} :	le temps initial de l'injection d'une particule;
$U_i(0,1)$:	une distribution uniforme de nombres entre 0 et 1;
$U_p(0,L)$:	une distribution uniforme d'injection de particules entre 0 et L;
$ V(s) $:	le module de la vitesse normale à s ;
(x_p, y_p) :	la position d'une particule dans le domaine de simulation;
α :	une constante de dégradation;
α_{ij} :	les paramètres j de la fonction Φ pour un contaminant i ;
$\Phi(\alpha_{ij}, t_p)$:	une fonction évolutive adimensionnelle;
σ_p :	l'écart-type de l'emprise ou zone d'influence allouée à une particule pour le lissage diffusif;
σ_1 et σ_2 :	les écarts-types d'une distribution gaussienne selon les axes de coordonnées.

Chapitre 7

$erfc(x)$:	la fonction complément-erreur;
E_x, E_y :	les espérances mathématiques en x et y d'une distribution;
H :	la profondeur;
N :	le nombre total de particules injectées; ou,
N, O :	le nombre d'intervalles en x et y de la matrice de calcul;
Q_M :	le débit massique à l'injection;
r :	le rayon polaire $\sqrt{x^2 + y^2}$;
$\bar{u}$:	la vitesse moyenne de l'écoulement;



-
- Z_1, Z_2 : des variables aléatoires de distribution normale ayant une moyenne nulle et une variance égale à 1;
- α : degré implicite des méthodes de résolutions temporelles;
- γ : l'angle d'ouverture-type du panache qui, pour de faibles valeurs, est obtenu ainsi:
 $\gamma = r/4Dt$;
- σ_x et σ_y : les écarts-types théoriques d'une distribution;
- ρ : paramètre adimensionnel définissant le rayon d'influence d'une particule;
- σ_p : écart-type de l'emprise individuelle allouée aux particule pour réaliser le lissage diffusif contrôlé;
- σ_M : écart-type local de l'emprise du panache;
- σ_{MT} : écart-type transversal de l'emprise du panache.



GLOSSAIRE

Anisotropie: qualité d'un processus qui se produit avec une intensité variant avec la direction considérée (voir anisotropie).

Coefficient de diffusion: coefficient du modèle de propagation d'un soluté réglant l'intensité du flux diffusif pour un gradient de concentration donné. Il est souvent donné dans les unités suivantes: $[m^2/s]$.

Coefficient de diffusion moléculaire: coefficient de diffusion associé aux processus diffusifs d'échelle moléculaire.

Coefficient de diffusion turbulente: coefficient de diffusion associé aux processus turbulents (variabilité temporelle de l'écoulement à petite échelle de temps).

Coefficient de dispersion: coefficient du même type qu'un coefficient de diffusion (unités: $[m^2/s]$) qu'on utilise pour régler l'intensité d'un flux dispersif pour un gradient de concentration donné. Le flux dispersif est associé à une variation spatiale du champ de vitesse qui n'est pas représentée explicitement dans le modèle.

Coefficient de dispersion horizontale: coefficient du même type qu'un coefficient de diffusion (unités: $[m^2/s]$) qu'on utilise pour régler l'intensité d'un flux dispersif horizontal (transversal et longitudinal) pour un gradient de concentration donné. Le flux dispersif horizontal est associé à une variation du champ de vitesse non-représentée explicitement dans le modèle (ex: le profil vertical de vitesse intégré dans les modèles bidimensionnels horizontaux).

Coefficient de dispersion longitudinale: coefficient du même type qu'un coefficient de diffusion (unités: $[m^2/s]$) qu'on utilise pour régler l'intensité d'un flux dispersif longitudinal pour un gradient de concentration donné. Le flux dispersif longitudinal est associé à une variation du champ de vitesse dans le sens de l'écoulement non-représentée explicitement dans le modèle. Souvent, on réserve ce terme pour les modèles unidimensionnels pour lesquels l'ensemble du profil de vitesse est intégré en une valeur unique par tronçon. Il peut être pris en compte avec un coefficient d'anisotropie.



Coefficient de dispersion transversale: coefficient du même qu'un coefficient de diffusion (unités: $[m^2/s]$) qu'on utilise pour régler l'intensité d'un flux dispersif transversal pour un gradient de concentration donné. Le flux dispersif transversal est associé à une variation latérale du champ de vitesse transversal non-représentée explicitement dans le modèle (ex: les circulations secondaires latérales dans les méandres).

Convection: processus de déplacement des masses d'eau associés au mouvement cohérent net. La vitesse moyenne du courant est la mesure de la convection. Lorsqu'appliqué au transport d'un soluté, le concept est désigné par l'expression "transport".

Diffusion: terme général pour désigner les processus de mélange des eaux; ce terme est souvent employé pour désigner indistinctement les processus de mélange moléculaire, turbulents et dispersifs.

Diffusion moléculaire: processus de mélange des eaux se produisant à une échelle infinitésimale; ce phénomène ne nécessite aucune agitation ou turbulence de l'eau produite par un mouvement.

Diffusion turbulente: processus de mélange des eaux produit par l'agitation aléatoire ou (turbulente) des eaux; on associe la turbulence à la variabilité temporelle aléatoire de la vitesse du courant qui accompagne la formation de cellules de convection (tourbillons).

Diffusivité: terme utilisé dans le texte pour désigner un coefficient de diffusion. Il est parfois utilisé comme équivalent à dispersivité.

Diffusivité de fond: terme utilisé dans le texte pour désigner un coefficient de diffusion turbulente horizontale associé à des processus turbulents provoqués par la rugosité du fond.

Diffusivité horizontale: terme utilisé dans le texte pour désigner un coefficient de diffusion ou dispersion associé à des processus turbulents ou circulations secondaires se produisant dans le plan horizontal (ex: méandres, confluence de cours d'eau).

Diffusivité longitudinale: terme utilisé dans le texte pour désigner un coefficient de diffusion ou dispersion longitudinale. Ce terme permet de traiter la question de l'anisotropie du mélange des eaux.

Diffusivité transversale: terme utilisé dans le texte pour désigner un coefficient de diffusion transversale. Ce terme permet de traiter la question de l'anisotropie du mélange des eaux.



Dispersion: processus de propagation d'un soluté associé au mouvement différentiel des masses d'eau au sein d'un même écoulement; ce mouvement différentiel est représenté par un profil de vitesse variable dans l'espace. Lorsque, dans un modèle numérique, le profil de vitesse est intégré dans une dimension donnée (ex: les modèles bidimensionnels horizontaux sont intégrés dans la verticale), le mouvement relatif (ou dispersion) des masses d'eau dans cette direction n'est plus représenté explicitement; on recourt alors à des formules de type diffusif pour obtenir un effet équivalent. C'est pourquoi les coefficients dits "de dispersion", qui ont la même forme que le coefficient de diffusion, peuvent varier considérablement en valeur selon le type et le degré d'intégration employé pour construire le modèle.

Dispersion longitudinale: processus de propagation d'un soluté associé aux mouvements longitudinaux (par rapport à la direction principale du courant) différentiels des masses d'eau. Ceux-ci sont associés soit au profil transversal d'écoulement soit, au profil vertical.

Dispersion transversale: processus de propagation d'un soluté associé aux mouvements latéraux (par rapport à la direction principale du courant) différentiels des masses d'eau. On associe ces mouvements aux instabilités se produisant à l'interface de masses d'eau voyageant à des vitesses différentes; il en résulte des cellules convectives (tourbillons) de grande échelle qui se déplacent à la vitesse moyenne du courant local. On retrouve également de la dispersion transversale dans les tronçons curvilignes (méandres) lorsque les masses d'eau superficielles sont déportées vers l'extérieur de la courbure alors que les eaux de fond reviennent vers l'intérieur pour assurer la continuité de l'écoulement.

Dispersivité: terme peu utilisé qui désigne un coefficient de dispersion.

Eulérienne (méthode): méthode de calcul qui permet d'obtenir directement la valeur d'une variable d'état dans un modèle. Les méthodes de résolution de l'équation de propagation d'un soluté par éléments finis ou différences finies sont des approches eulériennes. On utilise cette expression par opposition aux méthodes lagrangiennes qui produisent le même résultat mais avec une méthode de calcul indirecte basée sur le mouvement convectif-dispersif de particules par exemple (voir lagrangienne).

Hétérogénéité: qualité d'une caractéristique d'une masse d'eau qui varie dans l'espace (voir homogénéité).



Homogénéité: qualité d'une caractéristique d'une masse d'eau qui ne varie pas dans l'espace. Lorsqu'appliquée à la vitesse, on parle alors d'écoulement uniforme.

Isotropie: qualité d'un processus qui se produit avec la même intensité quelle que soit la direction considérée (voir anisotropie).

Lagrangienne (méthode): méthode de calcul qui permet d'obtenir indirectement la valeur d'une variable d'état dans un modèle en se basant sur le mouvement convectif-dispersif. Les méthodes de résolution particulières par la marche au hasard sont, par opposition aux méthodes d'éléments finis ou de différences finies, des approches lagrangiennes. On utilise cette expression pour se distinguer des méthodes eulériennes qui produisent le même genre de résultat mais avec un calcul direct de la variable d'état (voir eulérienne).

Transport: processus convectif (voir convection) par lequel des masses d'eau de qualités différentes sont propagées distinctement au sein d'un même écoulement. Ce processus est complété par de la diffusion et de la dispersion. Dans la littérature scientifique, on parle souvent conjointement des processus de transport-diffusion.