

UNIVERSITE DE NEUCHÂTEL
FACULTE DES SCIENCES

INSTITUT DE GEOLOGIE
CENTRE D'HYDROGEOLOGIE

**TRANS3 : Modèle numérique d'un
transfert de masse et d'énergie
conductif-advectif par éléments finis
en une, deux et trois dimensions.
(Programme d'ordinateur en Fortran77)**

THESE

Présentée à la Faculté des Sciences de l'Université de Neuchâtel

Pour l'obtention du Grade de
DOCTEUR ÈS SCIENCES

Par

Gérard André Robert SOUMA

Originaire du Sénégal

Ingénieur civil Dipl. Ecole Polytechnique de Thiès (Sénégal)

Hydrogéologue Dipl. Université de Neuchâtel

Soutenue le 17 mai 1989 devant le jury composé de :

Professeur André Burger, Université de Neuchâtel.

Directeur de Thèse

Dr. László Király, Université de Neuchâtel.

Co-Directeur de Thèse

Professeur François Zwahlen, Université de Neuchâtel.

Examineur

Professeur Jacques Rappaz, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne. Examineur

IMPRIMATUR POUR LA THÈSE

TRANS 3: Modèle numérique d'un transfert de
masse et d'énergie conductif-advectif par
éléments finis en une, deux et trois
dimensions.

de Monsieur Gérard Souma.

UNIVERSITÉ DE NEUCHÂTEL

FACULTÉ DES SCIENCES

La Faculté des sciences de l'Université de Neuchâtel
sur le rapport des membres du jury,

Messieurs A. Burger, F. Zwahlen, L. Kiraly
et J. Rappaz (EPF-Lausanne)

autorise l'impression de la présente thèse.

Neuchâtel, le 10 avril 1992

Le doyen:



A. Robert

TRANS3 : Modèle numérique d'un transfert de masse conductif-advectif par éléments finis en une, deux et trois dimensions (Programme d'ordinateur en Fortran 77).¹

TRANS3 : Numerical Model of Mass and Energy Transport by Finite Elements in one, two and three dimensions (Computer Program Using FORTRAN 77).

Par Gérard André Robert SOUMA

Professeur à l'Ecole Polytechnique de Thiès,
BP. 10 THIES, SENEGAL
Tél. 221 511632

RESUME

Ce travail traite le problème de la modélisation du transport de masse ou d'énergie à travers un programme de calcul appelé TRANS3. Il s'agit d'un modèle numérique à éléments finis "quadratiques" qui permet de simuler un écoulement hydrodynamique, ou un transport conductif-advectif chimique ou thermique. Il peut être appliqué sur un domaine bidimensionnel ou tridimensionnel de la zone saturée d'un aquifère en régimes permanent ou transitoire. Trois types d'éléments 1-D, 2-D, 3-D peuvent être utilisés. TRANS3 intègre le programme FEM301 développé à l'Université de Neuchâtel pour la partie simulation 3-D des écoulements en régime permanent (Király, 1985). La vérification et la validation du programme sont abordés à l'aide de quelques exemples hydrogéologiques spécifiques. Par ailleurs, une application concrète a été réalisée dans le cadre du site expérimental thermique de Utzendorf-Aefligen (Canton de Berne).

MOTS-CLES

Simulation numérique 3-D, Ecoulement, Transport (conductif-advectif), Méthode des éléments finis, Régime transitoire, Programme d'ordinateur.

ABSTRACT

This work deals with the problem of mass and energy transport using a computer program named TRANS3. The numerical model uses "quadratical" finite elements and simulates either hydrodynamical flow or advective-conductive transport both chemical and thermal. It may be applied to a two or three dimensional domain of the saturated zone of an aquifer as well for the stationary as the transient state. Three kind of elements 1-D, 2-D, 3-D can be used. TRANS3 includes the code FEM301 developed at Neuchâtel University that's used for the 3-D stationary flow simulation (Király, 1985). Verification and validation of the program are done by means of a couple of typical hydrogeological examples. Further, an actual application was performed in the framework of the experimental site of thermal injection of Utzendorf-Aefligen (Bern Canton).

KEY-WORDS

Numerical simulation 3-D, Hydrodynamic flow, Transport (conductiv-advectiv), Finite Element Method, Transient State, Computer Program.

¹Thèse de Doctorat présentée à la Faculté des Sciences de l'Université de Neuchâtel (Suisse) le 17 Mai 1989.

*A mes parents,
à ma femme, et
à mes enfants,
je dédie cet
ouvrage.*

Remerciements

Je n'aurais jamais pu mener mes travaux à terme en toute sérénité, sans :

- d'une part, l'appui financier de la Commission Fédérale des Bourses pour étrangers, et ma mise à disposition par le Ministère de la Recherche Scientifique et Technique, pour lequel je travaille, depuis Août 1981, en qualité d'ingénieur à la Direction de l'Innovation et du Progrès Technologique. Ma famille et moi avons bénéficié, pendant cinq années, de bourses et d'allocations diverses. Je tiens à remercier personnellement Mr. EHRLER, de ladite commission, Prof. MARTINOLI et Prof. STUTZ, successivement représentants de l'Université de Neuchâtel auprès de cette commission;
- d'autre part, la confiance sans limite et la responsabilisation que m'ont témoignées, dès le début, mes Directeur et co-Directeur de thèse, Prof. André BURGER et Dr. Lazlo KIRALY, respectivement. Cette confiance, je l'ai retrouvée auprès du Prof. François ZWAHLEN, qui a remplacé le Prof. A. BURGER à la direction du Centre d'Hydrogéologie de Neuchâtel (CHYN), avec un dynamisme et une efficacité qui ont amélioré les conditions de travail en un temps record.

Je leur en suis redevable. Qu'ils voient, dans cet ouvrage, l'expression de ma gratitude la plus profonde.

Je remercie tous ceux qui ont assuré le support scientifique par des entretiens parfois brefs, mais efficaces, et plus particulièrement :

- Dr. L. KIRALY, dont le programme d'éléments finis FEM301 a servi de base à TRANS3;
- Prof. BANDERET, professeur d'analyse numérique au département de mathématique de l'Université de Neuchâtel;
- Prof. Jacques RAPPAZ, professeur d'analyse numérique au département de mathématique de l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), à qui l'Université de Neuchâtel doit la connection établie sur le CRAY de l'EPFL;
- Prof. G. de MARSILY, professeur d'hydrogéologie à l'Ecole des Mines de Paris, Fontainebleau;
- Monsieur OBERHOLTZER, Ingénieur au Bureau Werner de Berthoud, qui nous a fourni toutes les données nécessaires à l'application de TRANS3;
- Dr. R.V. BLAU, du service Wasser-und Energiewirtschaftsamt des Kantons Bern (WEA), pour avoir autorisé le bureau Werner à nous communiquer les données;
- Dr. Imre MÜLLER, chef de travaux au CHYN, qui m'a initié aux techniques de détermination in-situ de certains paramètres hydrodynamiques à l'aide de campagnes géophysiques en résistivité et électromagnétisme (VLF, Bipôle);
- toute l'équipe du CHYN, et plus spécialement, Dr. M. BOUZELBOUDJEN, et MM. P. PERROCHET, F. PIOCINI, L. TACHER, et C. WACKER, grâce auxquels TRANS3 a connu des aménagements importants;
- toute l'équipe du centre de calcul de Neuchâtel sous la direction du Prof. R. CORFU, personnage particulier mais qui m'a facilité bien des contacts, notamment l'obtention d'un compte sur le CRAY de l'EPFL. Je tiens à citer MM. F. BURRI, R. CHOFFAT, J.P. MARADAN et V. ORLANDO, qui ont été d'une grande disponibilité malgré la forte sollicitation dont ils sont l'objet;
- Mr E. ZUUR du groupe Prosper, pour l'appui apporté lors de l'utilisation de Bluepack.

Je remercie M^{elle} A.M. MAYERAT, M^{me} D. KRUGEL, Dr. M. BOUZELBOUDJEN et Mr. L. TACHER, qui ont largement contribué à la dactylographie, à la confection des figures, et à la correction du document.

Je suis persuadé que c'est par une diversification des activités dans un climat social serein que l'on atteint un équilibre optimal. C'est pourquoi je finirai en remerciant tous ceux qui ont contribué à améliorer mon équilibre social, culturel et sportif loin de mon pays bien-aimé. Je citerai :

- ma femme Maïmouna DIALLO et mes enfants Yoyo, Bébéchou et Jenny, qui ont dû, parfois, endurer avec patience mes états d'âme les plus désagréables, ou mes absences prolongées du foyer familial;
- le groupe de musique "FESTIVAL", dans lequel j'ai joué pendant 3 ans en compagnie de E. AGUIRRE, F. BOREL, P. BOVET, C.H. CODET et D. HUNDSKOPF;
- le Handball club de Neuchâtel, surtout Mr. C. SUTER et Mr. et M^{me} R. GIRARD, et le Handball club de la Chaux-de-Fonds, aux seins desquels j'ai évolué;
- l'association des arbitres de Handball de la région du Jura, dont j'étais membre;
- l'association des boursiers de la confédération, section de Neuchâtel, dont j'ai été le président avec un précieux collaborateur en la personne de Mr. M. RENAUD, Conseiller des étudiants de l'Université de Neuchâtel;
- et mes collègues de l'Ecole Polytechnique de Thiès (EPT), qui m'ont soutenu de près ou de loin depuis septembre 1987, date de ma prise de service à l'EPT en qualité de professeur.

A tous ceux que je n'ai pas cités, mais que je porte au fond de mon cœur, je présente tous mes remerciements les plus sincères.

TRANS3 : Modèle numérique d'un transfert de masse conductif-advectif par éléments finis en une, deux et trois dimensions (Programme d'ordinateur en Fortran 77).¹

**TRANS3 : Numerical Model of Mass and Energy Transport by Finite Elements
in one, two and three dimensions (Computer Program Using FORTRAN 77).**

Par Gérard André Robert SOUMA

Professeur à l'Ecole Polytechnique de Thiés,
BP. 10 THIES, SENEGAL
Tél. 221 511632

RESUME

Ce travail traite le problème de la modélisation du transport de masse ou d'énergie à travers un programme de calcul appelé TRANS3. Il s'agit d'un modèle numérique à éléments finis "quadratiques" qui permet de simuler un écoulement hydrodynamique, ou un transport conductif-advectif chimique ou thermique. Il peut être appliqué sur un domaine bidimensionnel ou tridimensionnel de la zone saturée d'un aquifère en régimes permanent ou transitoire. Trois types d'éléments 1-D, 2-D, 3-D peuvent être utilisés. TRANS3 intègre le programme FEM301 développé à l'Université de Neuchâtel pour la partie simulation 3-D des écoulements en régime permanent (Király, 1985). La vérification et la validation du programme sont abordés à l'aide de quelques exemples hydrogéologiques spécifiques. Par ailleurs, une application concrète a été réalisée dans le cadre du site expérimental thermique de Utzertorf-Aefligen (Canton de Berne).

MOTS-CLES

Simulation numérique 3-D, Ecoulement, Transport (conductif-advectif), Méthode des éléments finis, Régime transitoire, Programme d'ordinateur.

ABSTRACT

This work deals with the problem of mass and energy transport using a computer program named TRANS3. The numerical model uses "quadratical" finite elements and simulates either hydrodynamical flow or advectiv-conductiv transport both chemical and thermal. It may be applied to a two or three dimensional domain of the saturated zone of an aquifer as well for the stationary as the transient state. Three kind of elements 1-D, 2-D, 3-D can be used. TRANS3 includes the code FEM301 developed at Neuchâtel University that's used for the 3-D stationary flow simulation (Király, 1985). Verification and validation of the program are done by means of a couple of typical hydrogeological examples. Further, an actual application was performed in the framework of the experimental site of thermal injection of Utzentorf-Aeflingen (Bern Canton).

KEY-WORDS

Numerical simulation 3-D, Hydrodynamic flow, Transport (conductiv-advectiv), Finite Element Method, Transient State, Computer Program.

¹Thèse de Doctorat présentée à la Faculté des Sciences de l'Université de Neuchâtel (Suisse) le 17 Mai 1989.

Remerciements

Résumé

Table des matières

Liste des figures

0.Introduction

- 0.1 Généralités
- 0.2 Classification des modèles
 - 0.2.1 Modèles de prévision
 - 0.2.2. Modèles d'identification ou d'évaluation
 - 0.2.3. Modèles de gestion
- 0.3 Buts du programme TRANS3
- 0.4 Structure de cet ouvrage
- 0.5. Méthode des éléments finis
- 0.6 Synthèse du programme
 - 0.6.1 Méthode de résolution
 - 0.6.2 Formes et dimensions des éléments
 - 0.6.3 Fichiers d'Entrées/Sorties
 - 0.6.4 Souplesse du modèle
- 0.7 Hypothèses et limites du programme
 - 0.7.1 Hypothèses concernant l'écoulement hydrodynamique
 - 0.7.2 Hypothèses concernant la migration de soluté
 - 0.7.3 Hypothèses concernant le transfert thermique
 - 0.7.4 Hypothèses concernant le modèle numérique
 - 0.7.5 Limites
- 0.8 Application du programme

1. Modèles physique et mathématique

- 1.1 Equation aux dérivées partielles de l'écoulement hydrodynamique
 - 1.1.1 Loi de Darcy
 - 1.1.2 Equation de continuité
 - 1.1.3 Conditions aux limites et conditions initiales usuelles
 - 1.1.4 Equation du schéma de diffusivité
- 1.2 Critère de pollution
- 1.3 Equation aux dérivées partielles du transport de fluides miscibles
 - 1.3.1 Conduction
 - 1.3.1.1 La diffusion moléculaire
 - 1.3.1.2 La dispersion cinématique
 - 1.3.2 Advection
 - 1.3.3 Equation du couplage conductif-advectif
 - 1.3.4 Sources, pertes et réactions chimiques
 - 1.3.5 Equation du schéma de convection-advection
 - 1.3.6 Elément de résolution du schéma de conduction-advection
- 1.4 Equation aux dérivées partielles du transport thermique
- 1.5 Equation du modèle TRANS3

2. Modèle numérique : formulation par éléments finis de l'équation du modèle TRANS3

- 2.1 Justification du choix de la méthode des éléments finis
 - 2.1.1 Méthode semi-analytique
 - 2.1.2 Méthode par particules mobiles
 - 2.1.3 Méthode des différences finies

- 2.1.4 Méthode des éléments finis
- 2.1.5 Conclusion
- 2.2 Types d'éléments utilisés dans le modèle
 - 2.2.1 Fonctions d'interpolation
 - 2.2.2 Fonctions de transformation géométrique
 - 2.2.3 Eléments isoparamétriques
 - 2.2.4 Définitions
- 2.3 Formulation intégrale: méthode des résidus pondérés de Galerkin
- 2.4 Transformation de la forme intégrale
- 2.5 Calcul de la matrice des gradients [B]
- 2.6 Intégration numérique sur des éléments curvilignes
 - 2.6.1 Intégration numérique sur des domaines rectangulaires ou prismatiques
 - 2.6.2 Intégration numérique sur des domaines triangulaires ou tétraédriques
 - 2.6.3 Conclusion
- 2.7 Résolution du système non-stationnaire
 - 2.7.1 Méthode d'Euler
 - 2.7.2 Stabilité de la méthode d'Euler
 - 2.7.3 Méthode de Crank-Nicholson
- 2.8 Calcul des vitesses nodales

3 Modèle numérique : algorithme FRONT

- 3.1 Idée principale de l'élimination de Gauss
- 3.2 Problème et notation
- 3.3 Algorithme FRONT
 - 3.3.1 Algorithme code d'apparition
 - 3.3.2 Algorithme de l'élimination
 - 3.3.3 Algorithme de substitution inverse
- 3.4 Exemple complet
 - 3.4.1 Algorithme code d'apparition
 - 3.4.2 Asemblage et élimination
 - 3.4.3 Substitution inverse
- 3.5 Algorithme "BANDE"
- 3.6 Comparaison des algorithmes "BANDE" et "FRONT"

4 Présentation de TRANS3

- 4.1 Fichiers de données et de résultats
 - 4.1.1 Fichier des éléments
 - 4.1.2 Fichier des coordonnées
 - 4.1.3 Fichier des paramètres
 - 4.1.3.1 Simulation hydrodynamique
 - 4.1.3.2 Simulation d'un transport de masse ou d'énergie
 - 4.1.4 Fichier des potentiels
 - 4.1.5 Fichier des conditions initiales
 - 4.1.6 Fichier des résultats
 - 4.1.7 Contrôle de la largeur du front à l'aide du fichier des éléments
- 4.2 Description du logiciel TRANS3
- 4.3 Procédures de commandes VAX
- 4.4 Procédures de commandes CRAY

5 Vérification de TRANS3

- 5.1 Solution analytique d'un problème unidimensionnel
- 5.2 Résolution analytique d'un exemple unidimensionnel
- 5.3 Résolution numérique d'un exemple unidimensionnel
 - 5.3.1 Discrétisation par éléments finis
 - 5.3.2 Présentation des fichiers de données et de sortie de l'exemple 5.1

6 Projet Altwiden et méthodologie de validation

- 6.1 Présentation du projet Altwiden
- 6.2 Choix des limites du modèle physique
- 6.3 Discrétisation par éléments finis
- 6.4 Différentes étapes du calage du modèle numérique

7 Conclusion et recommandations

Annexe A : Fonctions d'interpolation

- A.1 Eléments d'ordre 2 de la famille de Lagrange
- A.2 Eléments d'ordre 2 de la famille de Sérendip
- A.3 Eléments en coordonnées naturelles

Annexe B

- B.1 Définition des variables principales de TRANS3
- B.2 Listing du programme TRANS3
 - B.2.1 Module principal de TRANS3
 - B.2.2 Elimination symbolique
 - B.2.3 Lecture des fichiers
 - B.2.4 Calcul des vitesses
 - B.2.5 Résolution des systèmes d'équations
 - B.2.6 Calcul des vecteurs et matrices élémentaires
 - B.2.7 Calcul des matrices des gradients
 - B.2.8 Fonctions d'interpolation et leurs dérivées
- B.3 Listing des procédures de commande VAX et CRAY-2
 - B.3.1 Procédure de commandes VAX
 - B.3.2 Procédure de commandes CRAY-2

Annexe C : Données géologiques et hydrogéologiques du projet Altwiden

Bibliographie

Liste des figures et tableaux

- Figure 0.1 : Différentes étapes d'un modèle de prévision utilisant la simulation numérique.
- Figure 0.2 : Données nécessaires pour un modèle de prévision.
- Tableau de synthèse illustrant les fichiers de données ENTREE selon le cas simulé.
- Figure 1.1 : La distribution statique des chemins de l'écoulement autour des hétérogénéités locales.
- Figure 1.2 : Composantes de la conduction.
- Figure 1.3 : Dispersion longitudinale et transversale d'un traceur.
- Figure 1.4 : Courbes d'avancement ("Breakthrough curves") du traceur avec et sans conduction.
- Figure 2.1 : Réseau d'éléments finis avec des éléments à 8 nœuds et à 6 nœuds.
- Figure 2.2 : Coordonnées globales et locales d'éléments à 1-, 2- et 3-dimensions.
- Figure 2.3 : Ordre de numérotation des nœuds.
- Figure 2.4 : Représentation des gradients en coordonnées curvilignes.
- Figure 4.1 : Structure du fichier des éléments.
- Figure 4.2 : Structure du fichier des coordonnées.
- Figure 4.3 : Structure du fichier des paramètres.
- Figure 4.4 : Structure du fichier des potentiels ou des conditions initiales.
- Figure 4.5 : Structure d'un fichier d'un écoulement hydrodynamique transitoire.
- Figure 4.6 : Structure d'un fichier de sortie d'un transport de masse transitoire.
- Figure 4.7 : Exemple 4.1. Aquifère captif avec écoulement hydrodynamique permanent.
- Figure 4.8 : Subdivision du domaine de l'exemple 4.1 en éléments finis.
- Figure 4.9a : Organigramme du programme TRANS3.
- Figure 4.9b : Organigramme de la sous-routine VIT.
- Figure 4.9c : Organigramme de la sous-routine MATELM.
- Figure 4.9d : Organigramme de la sous-routine TRANST.
- Figure 5.1 : Diagramme schématique montrant la section verticale d'un aquifère dans le sens de l'écoulement.
- Figure 5.2 : Concentration adimensionnelle C/C_0 versus la distance du point d'injection au bout de 1 et 2 ans de pollution constante : solution analytique.
- Figure 5.3 : Discrétisation par éléments finis du domaine de l'exemple 5.1 : numérotation des éléments et des nœuds.
- Figure 5.4 : Concentration adimensionnelle C/C_0 versus la distance du point d'injection au bout de 1 et 2 ans de pollution constante : solution numérique calculée par TRANS3.
- Figure 5.5 : Concentration adimensionnelle C/C_0 versus la distance du point d'injection au bout de 1 et 2 ans de pollution constante : superposition des solutions analytique et numérique.
- Figure 6.1 : Plan de masse du projet Utzenstorf-Aefligen.
- Figure 6.2 : Localisation du champ d'essai Altwiden.
- Figure 6.3 : Valeurs journalières du débit de l'Emme à la station EMM07 d'octobre 1985 à avril 1986.
- Figure 6.4 : Valeurs journalières de l'infiltration de l'Emme à la station QIE07 d'octobre 1985 à avril 1986.
- Figure 6.5 : Valeurs journalières de la température de l'Emme à la station WAB37 d'octobre 1985 à avril 1986.
- Figure 6.6 : Valeurs journalières de la précipitation à la station de Oeschberg d'octobre 1985 à novembre 1986.

- Figure 6.7 : Valeurs de l'infiltration efficace à la station QNE07 d'octobre 1985 à avril 1986.
- Figure 6.9 : Isolignes de température de la zone saturée et non saturée du milieu poreux le long d'une coupe verticale suivant l'axe 3 (voir Figure 6.9).
- Figure 6.10 : Localisation de l'axe 3 et des piézomètres de mesure du niveau de l'eau souterraine et de sa température. Positionnement du champ d'essai.
- Figure 6.11 : Plan détaillé du champ d'essai Altwiden. Identification des piézomètres.
- Figure 6.12 : Champ d'essai Altwiden : esquisse schématique des trois zones d'injection.
- Figure 6.13 : Champ d'essai Altwiden : tableau récapitulatif des campagnes d'acquisition de données.
- Figure 6.14 : Isohypse de la campagne de mesure du 13 mars 1986 : a) carte piézométrique; cartes des isothermes b) à 0.10 m, c) à 1.10 m, d) à 2.10 m, et e) à 4.10 m du niveau piézométrique.
- Figure 6.15 : Limites du domaine du modèle physique.
- Figure 6.16 : Discrétisation par éléments finis du domaine : a) bloc diagramme; b) numérotation des nœuds des éléments bidi de surface.
- Figure 6.17 : Comparaison entre les limites des éléments et celles de la lithologie des coupes stratigraphiques des piézomètres No 120, 150 et 180.
- Figure 6.18 : Comparaison entre les limites des éléments et les profils verticaux de mesures de perméabilités par flow mètre dans les piézomètres No 120, 150 et 180.
- Figure 6.19 : Influence de la variation des paramètres conductif-advectif sur la solution en état permanent le long de trois axes d'arêtes du modèle dans la direction nord. ($K=0$ m/s, $(\lambda)/\rho C=0.474 \times 10^{-6}$ m²/s, $\rho''C''/\rho C=0.641$)
- Figure 6.20 : Influence de la variation des paramètres conductif-advectif sur la solution en état permanent le long de trois axes d'arêtes du modèle dans la direction nord. ($K=0$ m/s, $(\lambda)/\rho C=1.03 \times 10^{-6}$ m²/s, $\rho''C''/\rho C=0.501$)
- Figure 6.21 : Influence de la variation des paramètres conductif-advectif sur la solution en état permanent le long de trois axes d'arêtes du modèle dans la direction nord. ($K=10^{-3}$ m/s, $(\lambda)/\rho C=1.03 \times 10^{-6}$ m²/s, $\rho''C''/\rho C=0.501$)
- Figure 6.22 : Influence de la variation des paramètres conductif-advectif sur la solution en état permanent le long de trois axes d'arêtes du modèle dans la direction nord. ($K=5 \times 10^{-3}$ m/s, $(\lambda)/\rho C=1.03 \times 10^{-6}$ m²/s, $\rho''C''/\rho C=0.501$)
- Figure 6.23 : Influence de la variation des paramètres conductif-advectif sur la solution en état permanent le long de trois axes d'arêtes du modèle dans la direction nord. ($K=10^{-2}$ m/s, $(\lambda)/\rho C=1.03 \times 10^{-6}$ m²/s, $\rho''C''/\rho C=0.501$)

0. INTRODUCTION

0.1 Généralités [SOUMA, 1983], [MENJOZ - JOOS, 1977]

Lors de l'étude des ressources terrestres, le chercheur est souvent confronté à des phénomènes de grande étendue à la surface du globe. Les techniques d'études conventionnelles impliquent des mesures au sol effectuées soit par des opérateurs, soit par des appareils automatiques. Elles ne permettent d'observer les phénomènes qu'en un nombre limité de points. Cette manière de procéder induit des erreurs d'interprétation du fait de l'incertitude sur la qualité de l'échantillonnage. Pour étudier un phénomène de vaste étendue, il est en outre nécessaire de multiplier les points d'observation. L'étude de la variation temporelle des phénomènes se heurte également à de grandes difficultés matérielles.

Les informations sont difficiles à recueillir, et surtout très onéreuses, par les méthodes traditionnelles d'interventions "in situ". Elles le sont dans les pays industrialisés en raison de la prestation de spécialistes coûteux. Elles le sont dans les pays en développement, en raison de l'étendue des terres à prospecter et des difficultés d'accès d'une part, et de la pénurie de spécialistes, ou de la prestation coûteuse de spécialistes douteux d'autre part.

Voilà pourquoi il convient de chercher à se libérer au maximum de l'intervention au sol. Modèles, télédétection, télétransmission, parmi divers moyens de conception récente, permettent de répondre à ce souci.

En hydrogéologie, le modèle numérique par éléments finis, constitue un outil de travail et de recherche souple et précieux. Il se révèle particulièrement précieux pour prévoir qualitativement et quantitativement les effets d'une pollution chimique ou thermique d'un aquifère, et pour estimer son évolution dans le temps.

Depuis quelques décennies, les ressources hydrauliques du sous-sol sont observées avec une acuité particulière, tant du point de vue potentiel à usage domestique ou industriel (chauffage, climatisation, stockage), que du point de vue de la qualité des eaux à usage de consommation (dureté, pollution etc).

On peut distinguer deux grands types d'aquifères: les nappes de faible profondeur (phréatiques), dont l'état hydraulique est assez fortement lié à l'hydrologie de surface (ruissellement, précipitation, cours d'eau) et généralement destinées au réseau de consommation; et les nappes profondes, souvent impropres à la consommation de par leur chimisme et leur température.

Les outils d'investigation de terrain pour l'étude de ces nappes sont essentiellement les forages (puits ou piézomètres) associés aux essais de pompage, d'injection ou de traçage. Ces méthodes permettent de constater et d'appréhender un état présent, ou de suivre une évolution localisée sur une certaine période. Bien qu'ayant fait ses preuves, cette méthodologie expérimentale présente deux handicaps importants: d'une part le coût unitaire qui varie avec la profondeur et le type de forage et d'autre part le nombre de forages nécessaires pour obtenir une carte représentative du système étudié.

Le modèle numérique quant à lui apparaît sur le plan méthodologique comme un complément et une extension de ces méthodes. Il utilise pour sa définition et son ajustement les mesures effectuées, et il peut ensuite, sur la base de scénarios futurs ou envisagés, fournir une estimation de l'état de l'aquifère sur une longue période. Il permet également de reproduire des situations passées.

Sur le plan de la pollution des aquifères, l'estimation préventive ou les moyens de lutte demandent que l'on suive l'évolution de la perturbation, non pas seulement à l'aval immédiat du ou des points de rejet, mais également sur l'ensemble du secteur aval où la qualité de l'eau est conditionnée par ces rejets. A l'aide du modèle, la notion de domaine d'investigation est rendue plus élastique.

0.2 classification des modèles

Les modèles en écoulement souterrain peuvent être subdivisés selon leur objectif, comme suit :

- a) modèles de prévision,
- b) modèles d'identification ou d'évaluation,
- c) modèles de gestion.

Tous ces trois types sont intimement liés, les modèles de prévision formant une base pour les deux autres. Nous allons présenter chacun d'entre eux individuellement.

0.2.1 Modèles de prévision [PECK, A., et al, 1988]

La majorité des modèles en utilisation courante sont des modèles de prévision basés sur la technique de simulation numérique. Ils prédisent la réaction d'un système d'écoulement souterrain, en terme de variation de charge hydraulique, aux sollicitations naturelles et/ou artificielles, spécialement celles associées à des prélèvements d'eau souterraine par pompage. Parmi tous les problèmes qui peuvent être abordés par de tels modèles, sont inclus ceux de la prévision :

- a) de rabattement maximum d'un pompage de longue durée dans un puits d'aquifère avec une recharge saisonnière;
- b) de superposition de rabattements et de rayons d'action suite à un pompage de courte durée dans des puits multiples;
- c) de tests de rabattement à long terme afin de déterminer la durée de vie utile de puits de pompage, dans un aquifère surexploité.
- d) de réduction de l'écoulement de surface des connections hydrauliques entre aquifères, résultant d'un pompage, grâce à des calculs et interprétations de rabattements appropriés;
- e) d'accroissement du débit des cours d'eau en contact hydraulique avec les aquifères, résultant du drainage des eaux d'irrigation et des lâchures de canaux artificiels;
- f) de changements de l'écoulement souterrain résultant d'une réduction de la recharge d'aquifère, dûs à des facteurs tels que l'urbanisation;
- g) de changements de l'écoulement souterrain résultant d'une augmentation de la recharge d'un aquifère, dûs à des facteurs tels que l'irrigation, les lâchures de canaux artificiels, les travaux de recharge artificielle, ou l'effet de l'urbanisation;
- h) de mouvements de l'interface eau douce-eau salée résultant de prélèvements d'eau souterraine des aquifères côtiers;

- i) de débits de pompage requis pour dénoyer une zone devant se prêter à des travaux d'ingénierie;
- j) de conception de fossés ou autre ouvrage de drainage.

Dans le cas de transport de polluant, la distribution de concentration associée à une charge de pollution donnée, fait aussi l'objet de prévision. Les applications sont habituellement limitées à la prévision de la distribution d'une source de pollution simple et continue, avec une simplification grossière de la représentation des processus de dispersion, d'adsorption et de dégradation du polluant. La modélisation de ce problème est habituellement limitée à un site d'échelle locale. La prévision d'un transport de polluant à une échelle régionale, la migration de polluant d'eau souterraine de source diffuse et le comportement de ces polluants requièrent des connaissances de ce chimisme si complexe que des prévisions réelles ne peuvent être faites.

Les grandes lignes du développement d'un modèle de prévision utilisant la simulation numérique sont présentées à la figure 0.1. Ce développement se fait en plusieurs étapes :

- 1) Décision de l'option de l'état permanent ou transitoire, du choix approprié des dimensions d'espace, des conditions aux limites à utiliser dans le modèle, et de leurs relations avec celles de l'aquifère entier. Ces décisions seront guidées par une synthèse de l'information disponible, incluant tout modèle conceptuel existant du système d'écoulement souterrain.
- 2) Formulation de l'ensemble des équations mathématiques pertinentes, de leur expression sous forme numérique (normalement pas la technique des éléments finis ou des différences finies) et de leur programmation dans un langage d'ordinateur approprié.
- 3) Vérification de la capacité du programme à résoudre l'ensemble des équations différentielles choisies avec une convergence de précision acceptable. Cela est fait habituellement en considérant des cas spéciaux qui admettent des solutions analytiques. Puisque certaines formulations de modèles ne sont valables que pour un intervalle réduit de valeurs de paramètres, il est important de considérer le plus large intervalle possible de conditions d'aquifère pouvant être inclus dans le problème à formuler.
- 4) Calage du modèle, (validation), en ajustant ou calibrant les valeurs des paramètres et des conditions aux limites, afin de reproduire au mieux les réactions (observées sur le terrain) de l'aquifère à des sollicitations hydrauliques et/ou de charges connues de polluant, et éventuellement d'obtenir des statistiques eu égard à l'incertitude des paramètres de calibration.

Les étapes (2) et (3) donnent lieu à un logiciel d'ordinateur qui peut être utilisé par plusieurs cas différents. Les étapes (1) et (4) sont spécifiques à chaque étude. La phase (4) est réalisée en utilisant soit un modèle inverse, soit par "essai et erreur", avec le "modèle de prévision" dans un mode "identification ou évaluation", tel que défini dans la prochaine section.

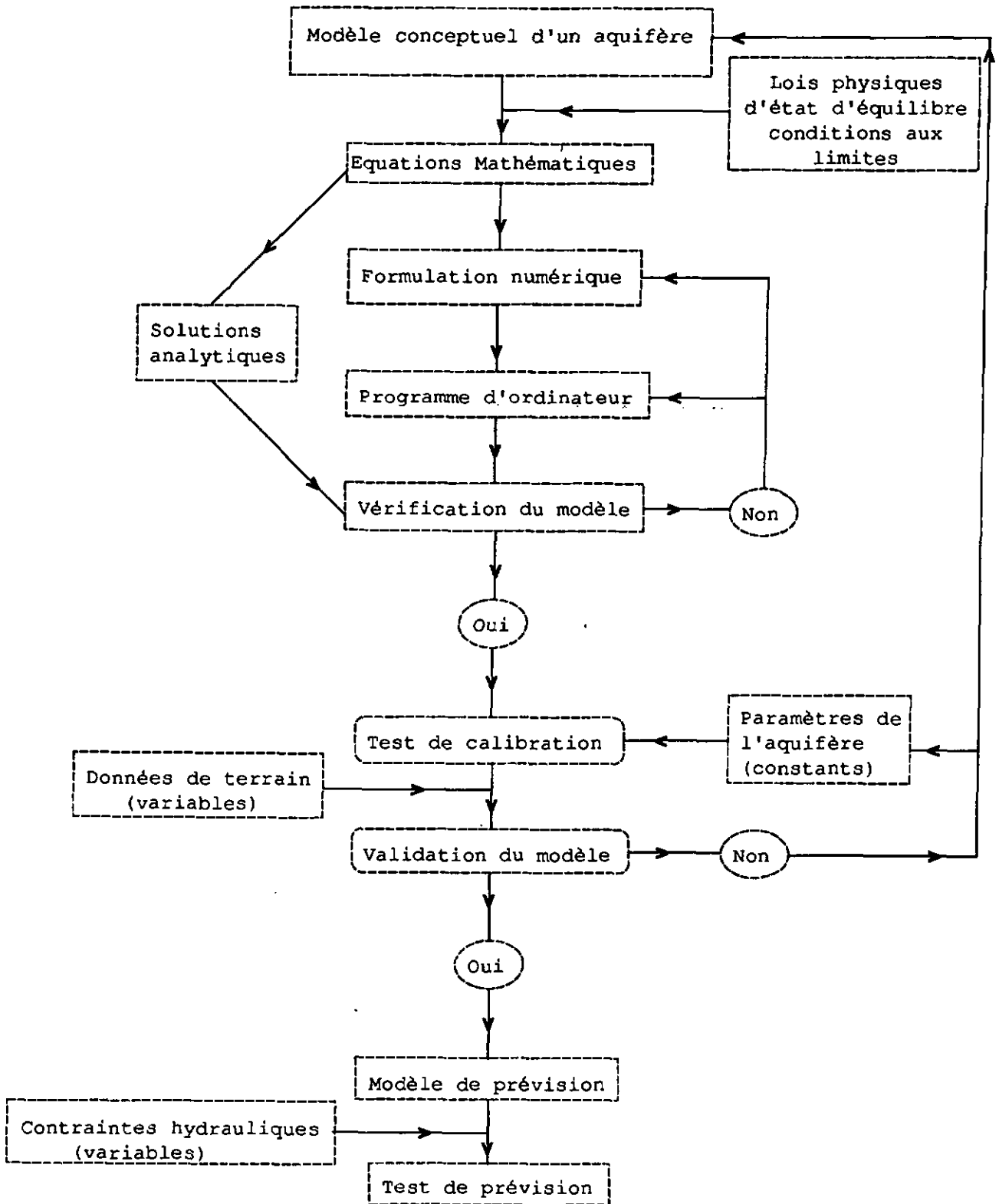


Figure 0.1 : Différentes étapes d'un modèle de prévision utilisant la simulation numérique, (de PECK et al, 1988)

Le calage d'un modèle à travers le processus de calibration n'est pas direct, parce que diverses combinaisons de paramètres et de conditions aux limites donneront des prévisions presque identiques, lorsque les données sur le comportement de l'aquifère observé sont limitées. Autrement dit, il n'y a pas de solution unique au problème de calibration. Si, de plus, les données de terrain ne sont disponibles que pour une condition de sollicitation hydraulique faible, des résultats erronés de calibration peuvent être obtenus. Par exemple, de grosses surestimations de l'emmagasinement moyen peuvent facilement se produire avec des aquifères phréatiques consolidés. Un tel modèle indiquera invariablement de grands volumes d'emmagasinement d'eau souterraine, du moins sur papier, et il y a un danger que cette "eau sur papier" puisse passer dans des planifications de ressources sans considération plus poussée de la validité de ses bases physiques. Jugement et précaution hydrogéologiques considérables sont alors requis à cette étape de validation du modèle.

Une fois que le modèle est validé, le programme d'ordinateur associé acquiert le statut de modèle opérationnel pouvant alors être utilisé pour la prévision de comportement de l'aquifère, en réponse à d'autres variations naturelles et artificielles de sollicitation hydraulique ou de charge de polluant. Cependant, dans les toutes premières années de son existence, un modèle sera normalement sujet à une régulière recalibration et à un raffinement à mesure que l'on collecte des données de terrain, correspondant à un large intervalle et une grande échelle de sollicitations appliquées. Ainsi, les premières prévisions d'un modèle, validé à l'aide d'un nombre limité de données de terrain, peuvent être sujettes à de larges erreurs et nécessitent d'être interprétées avec une précaution appropriée.

On doit se garder de discréditer les données de terrain, simplement parce qu'elles ne peuvent pas être simulées correctement par le modèle de prévision développé. Fréquemment, le modèle s'avère être inapproprié, et par là même inadéquat pour représenter les mécanismes d'écoulement souterrain réels. Quand des modifications fondamentales sont faites, des agrandissements dramatiques sont souvent obtenus dans les corrélations entre les résultats du modèle et des données de terrain.

Ignorer certains aspects d'écoulement d'eau souterraine et certains types de caractéristiques d'aquifère conduit parfois à de sérieuses erreurs. Ces omissions pourraient être les suivantes : variations énergiques de transmissivité et changements abrupts d'emmagasinement (rendement spécifique) avec une épaisseur d'aquifère saturée; écoulement vertical prépondérant et composantes de la recharge verticale; et pénétrations partielles de puits et de rivières.

De plus, tous les problèmes d'eau souterraine sont en réalité tri-dimensionnels et transitoires. De tels modèles nécessitent aussi bien une demande accrue de provisions de données (figure 0.2), qu'un important temps de calcul d'ordinateur, et de mémoire de stockage. L'approche habituellement adoptée est de réduire le nombre de dimensions représentées et/ou de considérer seulement l'état permanent; ce qui est acceptable seulement si le modèle reflète encore le mécanisme d'écoulement souterrain prédominant.

0.2.2 Modèles d'identification ou d'évaluation

Un modèle de simulation numérique peut être d'abord développé pour identifier ou évaluer les paramètres et limites d'un petit aquifère connu. Ceci peut être entrepris en utilisant le modèle de simulation exclusivement en mode calibration (figure 0.1) : en ajustant la valeur des paramètres et/ou des conditions aux limites pour reproduire l'état de l'aquifère observé, résultant de sollicitations connues.

Figure 0.2 : Données nécessaires pour un modèle de prévision [MERCER, J., 1980]**I. Modèle physique****A. Ecoulement hydrodynamique**

1. Carte hydrogéologique montrant l'étendue du domaine, ses limites et les conditions aux limites de tous les aquifères.
2. Carte topographique montrant les classes d'eau de surface.
3. Cartes du plan d'eau, de la configuration du substratum imperméable, et de l'épaisseur de l'aquifère.
4. Carte de transmissivité montrant l'aquifère et ses limites.
5. Cartes de transmissivité et d'emmagasinement spécifique pour un aquifère captif.
6. Carte montrant les variations du coefficient d'emmagasinement de l'aquifère.
7. Relation entre l'épaisseur saturée et la transmissivité.
8. Relation entre cours d'eau et aquifère (continuité hydraulique).

B. Transport de soluté (en addition à ce qui précède).

9. Estimation des paramètres qui incluent la dispersion hydrodynamique.
10. Distribution de la porosité efficace.
11. Informations sur la distribution de concentration naturelle, ou "bruit de fond", dans l'aquifère.
12. Estimation de la variation de la densité du fluide, et relation entre la densité et la concentration.
13. Distribution de la charge hydraulique (utilisée pour déterminer le champ des vitesses).
14. Conditions aux limites pour les concentrations.

C. Transport de chaleur (en addition à ce qui précède).

15. Estimation des conductivités thermiques et chaleurs spécifiques de l'eau et du squelette minéral.
16. Information sur la distribution de température naturelle, ou "bruit de fond", dans l'aquifère, incluant des mesures de chaleur.
17. Estimation des variations de la densité du fluide et des relations entre la densité, la viscosité et la température.
18. Conditions aux limites pour la température.

II. Sollicitations du système.**A. Ecoulement des eaux souterraines**

1. Les types et étendues des zones de recharge (irrigation, bassins de stockage, puits, etc...).
2. Ligne de partage des eaux.
3. Pompage des eaux souterraines (distribué dans le temps et dans l'espace).
4. Ecoulement de courant (distribué dans le temps et dans l'espace).
5. Précipitation.

B. Transport de soluté (en addition à ce qui précède).

6. Distribution spatio-temporelle de la qualité de l'eau dans l'aquifère.
7. Qualité de l'écoulement de courant (distribuée dans le temps et dans l'espace).
8. Sources et intensités de pollution.

C. Transport de chaleur (en addition à ce qui précède).

9. Distribution spatio-temporelle de la température dans l'aquifère.
10. Intensités des sources de chaleur

III. Autres facteurs.

1. Informations économiques sur l'approvisionnement en eau.
2. Règles légales et administratives.
3. Facteurs de l'environnement.
4. Plans d'aménagement du territoire et de l'utilisation de l'eau.

0.2.3 Modèles de gestion

Les modèles de prévision employant des méthodes de simulation numérique et des paramètres d'aquifères hétérogènes ont souvent été utilisés pour explorer des alternatives de gestion d'eau souterraine. A cette fin, le modèle est exécuté en plusieurs scénarios afin d'atteindre un objectif particulier, comme celui d'obtenir un approvisionnement soutenu en eau, de dénoyer une zone excavée pour construction, de prévenir une invasion d'eau salée ou de contrôler une propagation de polluant. L'utilisation d'une telle approche empêche, cependant, une formulation rigoureuse des buts de gestion de l'eau souterraine et peut manquer de considérer d'importantes restrictions opérationnelles. C'est alors improbable que l'on arrive à des solutions optimales de gestion en utilisant seulement des modèles de simulation numériques.

Le développement et l'application d'un modèle mathématique devrait être un exercice dans la réflexion sur la manière dont un système d'eau souterraine réagit. Les modèles doivent être considérés comme des instruments d'aide à la prise de décision, mais celle-ci ne devrait pas se suffire des résultats générés par le modèle. Si les principes de base de l'écoulement de l'eau souterraine (ou du transport de polluant) et les hypothèses sous-tendant la modélisation sont perdus de vue, il y aura un sérieux danger d'effectuer de très mauvaises interprétations des résultats du modèle. Dans l'application de tout modèle, et plus spécialement de ceux traitant de qualité d'eau souterraine, un degré de jugement scientifique élevé, tempéré par une expérience de terrain, est désirable pour cerner les interprétations des "bruits de fond", (anomalies naturelles).

0.3 But du programme TRANS3.

Le but recherché par les travaux présentés ici, est de fournir un outil de travail, parmi tant d'autres, pouvant aider à la gestion, grâce au calage d'un modèle de prévision. Cet outil est un logiciel de programmation intitulé TRANS3.

TRANS3 hérite des importants développements du logiciel FEM301, (KIRALY, 1985), qui permet la simulation par éléments finis d'un écoulement hydrodynamique en état permanent.

TRANS3 est un programme FORTRAN qui offre quatre possibilités de simulation en milieu poreux saturé:

- * Ecoulement hydrodynamique permanent.
- * Ecoulement hydrodynamique transitoire.
- * Transport de masse ou d'énergie permanent.
- * Transport de masse ou d'énergie transitoire, étant données des conditions aux limites et des conditions initiales pouvant varier pour une simulation transitoire.

Le programme permet l'incorporation d'éléments uni- ou bi-dimensionnels dans un réseau d'éléments tri-dimensionnels.

La possibilité que possède TRANS3 de tenir compte de discontinuités discrètes lui permet d'être particulièrement bien adapté à l'analyse de l'écoulement et du transport dans des milieux géologiques très hétérogènes (e.g. roches cristallines, calcaire karstique).

Initialement conçu pour être exécuté sur un ordinateur scalaire (VAX-VMS 785 puis 6320 et 8530 du Département de calcul de l'Université de Neuchâtel),

TRANS3 a été modifié pour tourner sur un super-ordinateur vectoriel (CRAY-1S puis le CRAY-2 du Centre de calcul de l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne). Une étude du gain de temps CPU sera présentée en annexe pour un cas permanent et transitoire.

0.4 Structure de cet ouvrage

Dans les sections suivantes de ce chapitre 0, nous présentons une brève synthèse du programme, ses limites et des hypothèses qui régissent son domaine de validité.

Le chapitre 1 abordera les notions de modèles physique et mathématique des écoulements en milieu poreux et des transports de masse et d'énergie.

Cela nous conduira à une équation différentielle linéaire unique pour ces trois types de transport. Ce modèle mathématique sera ensuite transformé en modèle numérique dans le chapitre 2. Nous utiliserons, à cette fin, la méthode des résidus pondérés de Galerkin, avec des éléments finis isoparamétriques à interpolation quadratique. L'intégration numérique se fera par la méthode de Gauss-Legendre, et la résolution du système transitoire à l'aide de la méthode de Crank-Nicholson. Celle-ci est un cas particulier de la méthode d'Euler semi-explicite. Nous présentons aussi le procédé de calcul par intégration numérique des vitesses continues sur chaque élément et d'un élément à l'autre. La méthode frontale permettra ensuite de résoudre ces systèmes d'équations linéaires.

Une présentation de TRANS3 suivra dans le chapitre 3 avec la structure détaillée des fichiers de données et de résultats pour chaque cas de simulation possible, d'une part, et la description du logiciel sous forme d'organigramme, d'autre part.

Une vérification et une méthodologie de la validation de TRANS3 sur des exemples analytiques et numériques suivront dans les chapitres 5 et 6.

Les fonctions d'interpolation des différents types d'éléments utilisés dans TRANS3 ainsi qu'une interprétation des résultats et un listing du programme Fortran sont mis en annexes.

0.5 Méthode des éléments finis [DHATT, G., TOUZOT, G., 1981]

La méthode des éléments finis consiste à utiliser une approximation simple des variations inconnues pour transformer les équations aux dérivées partielles en équations algébriques. Elle fait appel aux trois domaines suivants:

- Sciences de l'ingénieur pour construire les équations aux dérivées partielles.
- Méthodes numériques pour construire et résoudre les équations algébriques.
- Programmation et informatique pour exécuter efficacement les calculs sur l'ordinateur.

La compréhension de la méthode exige en effet des connaissances intuitives dans des domaines variés:

- compréhension du problème physique étudié et connaissance intuitive de la solution recherchée,
- approximation des fonctions inconnues par sous-domaines et construction de fonctions d'interpolation,

- construction des équations du système étudié sous forme variationnelle, soit à partir de méthodes énergétiques, soit à partir d'équations aux dérivées partielles,
- technique d'organisation matricielle des données,
- méthodes numériques d'intégration, de résolution de systèmes d'équations algébriques et différentielles, linéaires et non linéaires,
- techniques informatiques adaptées à des programmes complexes et à des volumes d'information importants.

0.6 Synthèse du programme

Le programme TRANS3 résout les équations différentielles partielles décrivant l'écoulement souterrain ou le transport chimique ou thermique en état permanent ou transitoire dans un milieu poreux ou fracturé. Les équations viennent de la combinaison de la loi de Darcy (exprimant la conservation du moment) et de l'équation de continuité (exprimant la conservation de masse ou d'énergie). Ces équations sont résolues par la méthode des éléments finis.

0.6.1 Méthode de résolution

Dans la méthode des éléments finis, la fonction inconnue u (Potentiel hydraulique, concentration, température) est approximée sur des sous-domaines (ou éléments) d'un domaine global en utilisant des types de fonctions connues (fonctions d'interpolation). Dans le présent programme, seules les fonctions d'interpolation quadratiques sont utilisées.

L'approche de la méthode des résidus pondérés de Galerkin permet de transformer chaque équation différentielle en un ensemble d'équations intégrales. Ensuite, l'intégration par parties fournit des formes intégrales dites faibles qui contiennent uniquement des dérivées du premier ordre. La différentielle par rapport au temps t du système d'équations est résolue par la méthode semi-implicite, inconditionnellement stable de Crank-Nicholson. L'intégration numérique est effectuée sur chaque élément pour donner un ensemble d'équations linéaires. Ce système d'équations linéaires est résolu par une méthode d'élimination frontale pour matrice non symétrique que nous avons développée en modifiant celle de B. IRONS (1970), établie pour une matrice symétrique.

0.6.2 Formes et dimensions des éléments

Le domaine entier du modèle doit être discrétisé en éléments uni-, bi-, ou tri-dimensionnels. Le programme permet l'utilisation de triangles ou de rectangles comme éléments bidimensionnels, de tétraèdres, de prismes triangulaires ou de cubes comme éléments tridimensionnels. Ces éléments peuvent subir des déformations (e.g. réduction d'un côté ou d'une face d'élément à un point en assignant les mêmes coordonnées à plus d'un nœud) bien que des précautions soient nécessaires pour assurer la compatibilité avec les éléments voisins. Nous utilisons des fonctions d'interpolation quadratiques de sorte que chaque arête d'élément doit comprendre trois nœuds. De plus, pour les éléments de Lagrange, des nœuds sur les faces et à l'intérieur des éléments sont requis. Le nombre des formes d'éléments que nous utilisons permet une flexibilité considérable dans la conception d'un modèle hydrogéologique.

La possibilité d'utiliser des éléments de dimension 1, 2 ou 3 dans l'espace tridimensionnel permet la modélisation de phénomènes plans ou unidimensionnels localisés sans augmenter de manière significative le nombre d'éléments tridimensionnels requis.

0.6.3 Fichiers d'Entrées/Sorties

Les Entrées/Sorties au programme TRANS3 sont des fichiers distincts dont le nombre varie en fonction du cas à simuler:

1. Le fichier des éléments définit:
 - la topologie de l'élément (forme de l'élément, le nombre de ses nœuds, le nombre d'arêtes et les numéros des nœuds);
 - la classe de conductivité (hydraulique, chimique ou thermique) et du coefficient d'emménagement ou de la capacité calorifique;
 - la classe d'alimentation distribuée (Infiltration ou exfiltration répartie) pour chaque élément de la région à modéliser.
2. Le fichier de coordonnées définit les coordonnées spatiales (x,y,z) de chaque nœud et les facteurs d'échelle.
3. Le fichier de paramètres définit:
 - la valeur de la conductivité de chacune des classes définies dans le fichier des éléments (ou le produit conductivité par épaisseur pour les éléments 2-D ou le produit conductivité par section pour les éléments 1-D);
 - le nombre de changements des valeurs des conditions aux limites, des potentiels pour le calcul des vitesses, et des alimentations distribuées (ces trois ensembles de valeurs doivent changer simultanément), durant une période de simulation transitoire donnée; il faudra aussi indiquer la durée séparant chaque changement, du début de la simulation transitoire;
 - la valeur de chaque classe de coefficient d'emménagement, de porosité ou de capacité calorifique;
 - la valeur de chaque classe d'alimentation distribuée, pour tous les changements prévus par l'utilisateur (état transitoire);
 - les paramètres d'incrément de temps, d'impression des résultats et de durée maximale des calculs;
 - les valeurs nodales à imposer (soit une valeur de la fonction u, soit un débit volumique représentant une injection ou un pompage à un puits, imposé à un nœud ayant une valeur constante), pour tous les changements prévus avec l'avancement de l'état transitoire.
4. Le fichier des conditions initiales définit les valeurs de la fonction u à tous les nœuds du réseau. Un fichier de résultat d'un cas permanent présente un format adéquat pour être utilisé comme un fichier de conditions initiales pour une simulation transitoire.
5. Le fichier des potentiels définit:
 - la conductivité hydraulique de chaque classe;
 - les valeurs de potentiels à tous les nœuds du réseau en vue du calcul des vitesses de Darcy nodales. Un fichier de résultats d'un cas permanent hydrodynamique présente un format adéquat.
6. Le fichier des résultats est constitué:
 - d'un écho du fichier des paramètres;

- d'une table des valeurs de la fonction calculée et des débits de recharge ou de pompage à tous les nœuds du domaine modélisé et à tous les temps d'impression demandés;
- de la somme de tous les débits du modèle, présentée comme vérification de la balance totale du modèle entier.

Tableau de synthèse illustrant les fichiers de données ENTREE selon le cas simulé.

ECOULEMENT HYDRODYNAMIQUE		TRANSPORT DE MASSE OU D'ENERGIE	
PERMANENT	TRANSITOIRE	PERMANENT	TRANSITOIRE
<ul style="list-style-type: none"> ◦ Eléments. ◦ Coordonnées. ◦ Paramètres. 	<ul style="list-style-type: none"> ◦ Eléments. ◦ Coordonnées. ◦ Paramètres. ◦ Conditions initiales. 	<ul style="list-style-type: none"> ◦ Eléments. ◦ Coordonnées. ◦ Paramètres. ◦ Potentiels. 	<ul style="list-style-type: none"> ◦ Eléments. ◦ Coordonnées. ◦ Paramètres. ◦ Potentiels. ◦ Conditions initiales.

Une série de codes de post-traitement sont disponibles pour représenter les résultats calculés. On y trouve la possibilité de représenter les isolignes de la fonction u modélisée sur des sections bidimensionnelles de direction $x-y$, $x-z$ ou $y-z$. Seules des représentations d'isolignes sur des surfaces d'éléments sont présentement possibles. Des codes sont aussi disponibles pour effectuer des sommes de débits sur des sous domaines donnés du modèle et en divisant par les surfaces d'influence ils permettent d'obtenir les alimentations distribuées. De plus, des débits calculés peuvent être additionnés le long de divers segments de cours d'eau pour obtenir la contribution au débit mesuré aux stations de jaugeage provenant du drainage simulé de l'aquifère.

Les gradients de la fonction évaluée peuvent être calculés en tout point du réseau d'éléments tridimensionnels en utilisant le code de post-traitement GRAD.

Les codes STEADRES et GRAPH3 permettent de représenter, le long d'un segment donné, la fonction à l'étude versus la distance du début du segment pour un cas permanent ou pour un temps t donné d'un cas transitoire.

TRANSRES et GRAPH1 permettent de représenter, à un nœud donné, la fonction à l'étude versus le temps de calcul transitoire, uniquement pour les résultats intermédiaires existants dans le fichier des résultats.

0.6.4 Souplesse du modèle

TRANS3 contient plusieurs aspects permettant au modélisateur d'introduire des changements rapides dans le modèle conceptuel. De plus, la possibilité d'utiliser des éléments de dimensions variables et la facilité avec laquelle la topologie des éléments peut être modifiée (due à l'utilisation de la méthode de résolution frontale) donnent au modélisateur une flexibilité considérable. Les effets spéciaux de TRANS3 sont énumérés ci-dessous:

- L'utilisation de classes de conductivité permet de faire varier rapidement la conductivité assignée à une partie du modèle. Ainsi l'hétérogénéité de l'aquifère peut être définie sur des groupes d'éléments plutôt qu'élément par élément.
- L'utilisation de classes d'infiltration permet de faire varier facilement l'alimentation distribuée assignée.
- Des champs de conductivité anisotropes peuvent être modélisés.
- L'utilisation de la méthode de résolution frontale permet d'avoir une solution efficace de très grands problèmes 3-D.
- Les éléments quadratiques permettent l'utilisation d'éléments à arêtes curvilinéaires.
- Il est possible de tenir compte de la variation discrète des conditions aux limites, de l'alimentation distribuée et champ de potentiel permettant de calculer le champ de vitesse.

0.7 Hypothèses et limites du programme

Ainsi que pour toute approximation numérique d'un modèle mathématique ou toute représentation mathématique d'un phénomène physique, plusieurs approximations ont été faites dans la formulation de TRANS3. L'utilisateur doit être attentif à ces hypothèses car elles fixent les limites de son application comme outil de calcul d'un cas réel.

Le modèle mathématique, représenté par l'équation d'écoulement hydrodynamique ou de transport de masse ou d'énergie en régime permanent ou transitoire, conduit aux hypothèses énoncées ci-dessous.

0.7.1 Hypothèses concernant l'écoulement hydrodynamique [KIRALY, L., 1985]

- Tout le domaine à l'étude doit nécessairement être saturé. Le milieu peut être discontinu (éléments 1-D et 2-D dans l'espace 3-D).
- Milieu hétérogène et anisotrope: les directions principales et l'anisotropie peuvent varier dans l'ensemble du domaine.
- Réseau d'écoulement non-uniforme: celui-ci peut présenter d'importantes variations au voisinage de certains points (sources, sites de stockage, fissures, etc...)
- La loi de Darcy est applicable pour définir le flux volumique dans le milieu poreux à l'échelle macroscopique. Ceci implique que:
 - le mouvement de l'eau soit régi par des forces de gravité et des gradients de pression;
 - la vitesse d'écoulement soit suffisamment faible pour pouvoir négliger les termes d'inertie;
 - la résistance à l'écoulement soit linéairement proportionnelle au flux de volume.
- Les variations spatiales de densité sont faibles (i.e la densité est constante), de sorte que les écoulements soient irrotationnels.

0.7.2 Hypothèses concernant la migration de soluté

Les mécanismes suivants sont inclus dans les calculs:

- transport physique par advection naturelle;
- transport conductif causé par diffusion moléculaire et dispersion cinématique;
- la masse volumique et la viscosité ne varient pas avec la concentration (hypothèse du traceur inerte);
- l'interaction entre les solutés et la matrice poreuse est régie par une loi qui dépend de la variété des autres éléments présents dans la solution. Cette loi doit être prise comme une représentation macroscopique globale des phénomènes d'échange. Aucune hypothèse n'est faite sur les mécanismes d'interaction physique élémentaires, qui sont probablement nombreux (adsorption, désorption, échange d'ions, diffusion dans la matrice poreuse, etc...).

0.7.3 Hypothèses concernant le transfert thermique

- La température du solide et celle du fluide s'égalisent presque instantanément, il n'existe qu'une seule température dans le milieu poreux saturé.
- L'écoulement est irrotationnel : le gradient thermique vertical minimum, au-dessus duquel des cellules de convection naturelle apparaissent, ne doit pas être dépassé.

0.7.4 Hypothèses concernant le modèle numérique, relatives à la méthode des éléments finis:

- la fonction u approximée peut uniquement varier comme une fonction quadratique au sein de chaque élément;
- une arête d'élément peut être déformée jusqu'au degré deux d'approximation polynomiale choisi pour évaluer la fonction u ;
- on ne fait pas la recherche du plus grand pivot pour la résolution frontale le risque de singularité par l'utilisation d'un petit pivot n'est donc pas contrôlé;
- l'advection doit être faible par rapport à la conduction sinon l'équation elliptique ou parabolique que nous résolvons risque d'être hyperbolique. Il suffit de vérifier que le nombre de Péclet ($Pe = |V_e|d/D$) reste dans des limites raisonnables. Nous ne faisons pas cette vérification. Nous supposons que les écoulements laminaires de Darcy sont suffisamment lents pour donner un nombre de Péclet faible.

0.7.5 Limites

Les limites propres à l'application du programme TRANS3 sont les suivantes :

- des éléments trop grands peuvent générer localement des résultats irréels dans des régions où le champ de la fonction à évaluer ne peut être décrit par une fonction quadratique; (voir exemple dans KIRALY, L., 1985)
- on ne vérifie pas que l'intégrale de surface du flux normal est nulle sur chaque élément;
- l'utilisation du terme "couplé" est un abus de langage car nous ne tenons pas compte de la variabilité spatio-temporelle de la densité du fluide en fonction de la température ou de la concentration du soluté.

0.8 Application du programme

On peut utiliser TRANS3 pour une grande variété de problèmes d'écoulement et de transport permanent et transitoire. Il est particulièrement approprié aux problèmes contenant des discontinuités unidimensionnelles ou bidimensionnelles au sein d'un milieu aquifère quelconque.

Une application de TRANS3 a été réalisée par D. EVARD, (1987), dans le cadre d'une simulation de stockage souterrain de chaleur sur les données d'un site expérimental situé à Cortaillod (NE), pour le bureau B. MATHEY de Montézillon, (NE).

Une autre application de TRANS3 a été effectuée sur le site d'injection thermique d'Utzenstorf-Aefligen, (BE). Cette banque de données a été mise à notre disposition par le bureau Werner de Berthoud en Suisse grâce à la recommandation que Dr. KIRALY a pu obtenir du Dr. BLAU, du Wasser und Energie-wirtschaftsamt des Kantons Bern, (WEA).

1. Modèles physique et mathématique.

Considérons un volume de roche donné ayant une partie saturée dont la base est imperméable. Cette zone est appelée aquifère ou nappe. On dira que l'aquifère est artésien si la pression mesurée au toit de l'aquifère est supérieure à la pression atmosphérique. Dans le cas contraire, l'aquifère est dit phréatique.

Toute zone de la roche qui ne serait pas en continuité hydraulique avec l'aquifère artésien ou phréatique constitue un système hydraulique isolé, par exemple une nappe perchée. Une telle nappe ne sera pas incluse dans notre système physique.

Nous ne considérons que la partie de la roche saturée contenant de l'eau gravitaire, et au sein de laquelle la continuité hydraulique est assurée.

Dans la modélisation de l'écoulement de l'eau souterraine avec ou sans transport de masse ou d'énergie, les équations fondamentales d'intérêt proviennent de deux sources:

1. la loi de conservation de moment, dont la loi d'écoulement de Darcy pour un milieu poreux en est un exemple;
2. l'équation de continuité qui exprime la conservation de masse.

Ce chapitre n'aura pas pour objectif de détailler la dérivation de la loi de Darcy, des flux de masse et d'énergie et l'équation de continuité. Des développements plus rigoureux peuvent être trouvés dans HUBBERT (1940, 1957), DE WIEST (1965), BEAR (1972, 1979), DAGAN (1972), et DE MARSILY (1981).

Notre but est de présenter la forme générale de ces équations, en insistant plutôt sur les hypothèses simplificatrices qui nous permettent d'obtenir les classiques "équations de diffusivité" et "équation de conduction-advection" utilisées dans plusieurs problèmes hydrogéologiques pratiques.

1.1 Equation aux dérivées partielles de l'écoulement hydrodynamique.

1.1.1 Loi de Darcy. [KIRALY, 1985]

La loi de Darcy est une expression décrivant le flux volumique "conductif" dans un milieu poreux à une échelle macroscopique. Elle peut être dérivée des équations de Navier-Stokes exprimant la conservation de moment (HUBBERT, 1957; DAGAN, 1972; DE MARSILY, 1981) moyennant les hypothèses suivantes:

- les seules forces agissant sur le fluide sont le gradient de pression et la gravité;
- les termes d'inertie peuvent être négligés (la vitesse d'écoulement étant suffisamment petite);
- la résistance à l'écoulement est due en grande partie au cisaillement visqueux et est proportionnelle au flux volumique ou "vitesse de Darcy" V [$L^3T^{-1}L^{-2}$]. Nous obtenons alors la loi de Darcy sous la forme suivante:

$$V = -\frac{[k]}{\mu} (\text{grad } p + \rho g \text{ grad } z) = -\frac{[k]}{\mu} (\text{grad } p - \rho g) \quad (1.1)$$

où \mathbf{V} = flux volumique, $[L^3T^{-1}L^{-2}]$
 $[k]$ = perméabilité intrinsèque ou géométrique, $[L^2]$
 μ = viscosité dynamique, $[ML^{-1}T^{-1}]$.
 p = pression, $[ML^{-1}T^{-2}]$
 ρ = masse volumique de l'eau, $[ML^{-3}]$
 \mathbf{g} = vecteur accélération due à la gravité, $[LT^{-2}]$
 z = élévation par rapport au niveau de référence donné $[L]$

Le flux volumique \mathbf{V} est le volume d'eau s'écoulant par unité de temps à travers une section unitaire du milieu poreux perpendiculaire à la direction de l'écoulement. Le flux volumique \mathbf{V} n'est pas la vitesse moyenne d'écoulement souterrain, car seulement un faible pourcentage de la section du milieu poreux contribue à l'écoulement de l'eau ("les pores interconnectés").

Les vecteurs $\mathbf{grad} p$ et $\rho\mathbf{g}$ sont des forces par unité de volume d'eau $[MLT^{-2}L^{-3}]$, et leur résultante $\mathbf{F} = \mathbf{grad} p - \rho\mathbf{g}$ représente la force générale gouvernant l'écoulement de l'eau souterraine. Si le champ de force \mathbf{F} est irrotationnel, il peut être dérivé d'une force de potentiel, ou potentiel hydraulique H . La condition pour que le champ de force \mathbf{F} soit irrotationnel est:

$$\begin{aligned}\text{rot } \mathbf{F} &= \text{rot } (\mathbf{grad} p - \rho\mathbf{g}) = 0 \\ \text{rot } \mathbf{F} &= \text{rot } \mathbf{grad} p - \mathbf{grad} \rho \times \mathbf{g} - \rho \text{ rot } \mathbf{g}\end{aligned}$$

Puisque $\text{rot } \mathbf{grad} p = 0$ et $\text{rot } \mathbf{g} = 0$, nous avons la condition d'existence d'un potentiel hydraulique:

$$\text{rot } \mathbf{F} = \mathbf{grad} \rho \times \mathbf{g} = 0 \quad (1.2)$$

L'équation (1.2) est satisfaisante seulement dans deux cas:

1. Dans les conditions hydrostatiques, s'il y a une stratification horizontale des densités ($\mathbf{grad} \rho$ parallèle à \mathbf{g}).
2. Dans des aquifères où $\mathbf{grad} \rho = 0$ (La densité de l'eau est constante) ou, au moins $\mathbf{grad} \rho$ peut être négligé (Les variations spatiales de la densité sont faibles).

Nous pouvons mentionner que HUBBERT (1940, 1957) propose une expression différente de la force gouvernant l'écoulement, notée \mathbf{E} $[MLT^{-2}M^{-1}]$, qui exprime la force par unité de masse d'eau:

$$\mathbf{E} = (1/\rho) \mathbf{grad} p - \mathbf{g}$$

L'avantage important de cette expression est que le champ de force \mathbf{E} demeure irrotationnel (et peut être dérivé d'une force de potentiel) même pour des fluides compressibles, si la densité ρ du fluide dépend uniquement de la pression p . La condition pour que \mathbf{E} soit irrotationnel est:

$$\text{rot } \mathbf{E} = \mathbf{grad} (1/\rho) \times \mathbf{grad} p + (1/\rho) \text{ rot } \mathbf{grad} p - \text{rot } \mathbf{g} = 0$$

Puisque $\text{rot } \mathbf{g} = 0$ et $\text{rot } \mathbf{grad } p = 0$, nous avons:

$$\text{rot } \mathbf{E} = \mathbf{grad } (1/\rho) \times \mathbf{grad } p = 0 \quad (1.2.a)$$

et l'équation (1.2.a) est satisfaite dans les cas suivants:

1. $\mathbf{grad } p = 0$ (= champ de pression constante).
2. $\mathbf{grad } (1/\rho) = 0$, i.e. la variation spatiale de la densité est nulle ou négligeable ($\rho = \text{constante}$).
3. $\mathbf{grad } p$ est parallèle à $\mathbf{grad } (1/\rho)$, i.e. les surfaces d'égale pression sont parallèles à celles d'égale densité. Ceci se produit quand la densité $\rho = \rho(p)$ dépend uniquement de la pression, et dans ce cas la force gouvernante \mathbf{E} peut être exprimée comme étant le gradient de la force de potentiel de HUBBERT:

$$\mathbf{E} = \mathbf{grad} \left[\int_0^p \frac{dp}{\rho(p)} + gz \right] = \mathbf{grad } H$$

Dans ce cas, H , $[ML^2T^{-2}M^{-1}]$, est une densité d'énergie par unité de masse d'eau.

Si l'écoulement de l'eau souterraine n'est pas couplé avec un transport de chaleur et/ou de soluté (i.e. si la densité ne varie pas avec la température et/ou la concentration de soluté), il serait inutile d'introduire une densité d'eau variable dans le modèle d'écoulement. Ainsi nous admettons une importante hypothèse simplificatrice: nous supposons que, dans le volume modélisé, les variations spatiales de la densité sont petites et on peut négliger $\mathbf{grad } \rho$.

$$\rho \approx \text{Constante} \quad (1.3)$$

En faisant cette hypothèse, nous permettons au champ de force \mathbf{F} ou \mathbf{E} et au champ d'écoulement \mathbf{V} d'être irrotationnel et nous pouvons définir le potentiel hydraulique, aussi bien que la loi de Darcy, de différentes façons:

$$\mathbf{V} = - ([k]/\mu) \cdot \mathbf{grad } (p + \rho gz) = - [k_1] \cdot \mathbf{grad } H_1 \quad (1.4)$$

$$\mathbf{V} = - \rho ([k]/\mu) \cdot \mathbf{grad } ((p/\rho) + gz) = - [k_2] \cdot \mathbf{grad } H_2 \quad (1.5)$$

$$\mathbf{V} = - \rho g ([k]/\mu) \cdot \mathbf{grad } ((p/\rho g) + z) = - [k_3] \cdot \mathbf{grad } H_3 \quad (1.6)$$

Les potentiels H_1 , $[ML^{-1}T^{-2}]$, H_2 , $[L^2T^{-2}]$, et H_3 , $[L]$, sont des densités d'énergie par unité de volume d'eau, par unité de masse d'eau et par unité de poids d'eau, respectivement. Puisque \mathbf{V} doit être dans tous les cas un flux volumique, la définition des conductivités volumiques ou conductivités hydrauliques $[K]$, dépendra du choix du potentiel H_i :

$$[K_1] = [k]/\mu \quad , \quad [L^3TM^{-1}] \text{ pour } H_1$$

$$[K_2] = \rho[k]/\mu = [k]/\nu \quad , \quad [T] \quad \text{pour } H_2$$

$$[K_3] = \rho g[k]/\mu = g[k]/\nu \quad , \quad [LT^{-1}] \quad \text{pour } H_3$$

où $\nu = \mu/\rho =$ viscosité cinématique, $[L^2T^{-1}]$.

Dans notre modèle, nous utiliserons l'équation (1.6), plus familière aux hydrogéologues, où le potentiel ("charge") est défini en [L] et la conductivité hydraulique ("Perméabilité" des Hydrogéologues est donnée en $[LT^{-1}]$.

1.1.2 L'équation de continuité. [de MARSILY, 1981]

Dans notre problème d'écoulement souterrain (milieu poreux saturé), nous exprimons le bilan de masse pour un volume d'eau unitaire par l'équation suivante (BEAR, 1979):

$$\partial(m\rho)/\partial t + \text{div}(\rho\mathbf{V}) + \rho Q = 0 \quad (1.7)$$

où: ρ = densité de l'eau, $[ML^{-3}]$
 m = porosité du milieu poreux, [1]
 \mathbf{V} = flux volumique ou vitesse de Darcy, équation (1.6), $[L^3 T^{-1}L^{-2}]$
 Q = terme de source ou perte volumique, $[L^3 T^{-1}L^{-3}]$

Afin d'obtenir "l'équation de diffusivité" classique utilisée dans plusieurs problèmes pratiques en hydrogéologie, nous devons introduire quelques simplifications dans le premier et le second terme de l'équation du bilan de masse.

Le **premier terme** est une variation de masse de l'eau souterraine par unité de temps et par unité de volume du milieu poreux. Si ce terme est non nul, nous devons admettre que la densité ρ et la porosité m peuvent changer, tant soit peu, avec le temps. Même si la compressibilité de l'eau et du squelette rocheux sont petites, des variations de la pression de l'eau produiront de petites variations de la densité ρ et de la porosité m (BEAR, 1979), ce qui changera la masse d'eau stockée dans un volume unitaire de milieu poreux.

Soient $m = m(p)$ et $\rho = \rho(p)$. Le premier terme peut s'exprimer comme suit:

$$\frac{\partial(m\rho)}{\partial t} = \left[m \frac{\partial\rho}{\partial p} + \rho \frac{\partial m}{\partial p} \right] \frac{\partial p}{\partial t} = S_{(p)}^m \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \quad (1.8)$$

où $S_{(p)}^m$ peut être considéré comme un "coefficient d'emménagement massique" lié à un changement de pression. C'est la masse d'eau de stockage perdue (ou gagnée) dans un volume unitaire d'aquifère suite à une baisse (ou augmentation) unitaire de pression.

Définissons la compressibilité de l'eau β , $[LT^2M^{-1}]$ et la compressibilité verticale de la matrice solide α , $[LT^2M^{-1}]$ par:

$$\beta = \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial\rho}{\partial p} \quad \text{et} \quad \alpha = \frac{1}{(1-m)} \cdot \frac{\partial m}{\partial p}$$

alors $\frac{\partial \rho}{\partial p} = \rho \beta$ et $\frac{\partial m}{\partial p} = (1-m)\alpha$, et nous pouvons exprimer le coefficient d'emmagasinement massique comme suit:

$$S_{(p)}^m = \rho [(1-m)\alpha + m\beta] \quad (1.9)$$

Cependant, puisque nous voulons utiliser le potentiel $H (= (p/\rho g) + z)$ plutôt que la pression p , nous exprimerons $\partial p/\partial t$ dans (1.8) par la dérivée temporelle de H :

$$p = \rho g (H-z) \Rightarrow \frac{\partial p}{\partial t} = \rho g \frac{\partial H}{\partial t} + (H-z) g \frac{\partial \rho}{\partial p} \cdot \frac{\partial p}{\partial t}$$

$$\text{ou } \rho g \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t} \left[1 - \underbrace{(H-z)g \cdot \frac{\partial \rho}{\partial p}}_{\text{Petit comparé à 1}} \right]$$

Le second terme entre crochets est petit comparé à 1, même si $(H-z)$ est de l'ordre de 10^4 [m]! Prenons par exemple les valeurs:

$$\rho = 10^3 [\text{kg/m}^3], \quad g = 10 [\text{m/s}^2], \quad (H-z) = 10^4 [\text{m}], \quad \text{et } \beta = 5 \cdot 10^{-10} [\text{ms}^2/\text{kg}],$$

$$\text{alors : } \quad g(H-z) \frac{\partial \rho}{\partial p} = g \rho \beta (H-z) = 10 \cdot 10^3 \cdot 5 \cdot 10^{-10} \cdot 10^4 = 5 \cdot 10^{-2}$$

Ainsi, nous avons une bonne approximation:

$$\frac{\partial p}{\partial t} \approx \rho g \frac{\partial H}{\partial t} \quad (1.10)$$

Substituant (1.10) dans (1.8), nous obtenons pour le premier terme de l'équation du bilan de masse:

$$\frac{\partial(m\rho)}{\partial t} \approx \rho g S_{(p)}^m \cdot \frac{\partial H}{\partial t} = \rho S_s \cdot \frac{\partial H}{\partial t} \quad (1.11)$$

où S_s , [L^{-1}], est le coefficient d'emmagasinement volumique ou "coefficient d'emmagasinement spécifique" lié à un changement de charge hydraulique: c'est le volume d'eau de stockage perdu (ou gagné) dans un volume unitaire d'aquifère suite à une baisse (ou augmentation) unitaire de charge hydraulique. Le coefficient d'emmagasinement spécifique peut s'écrire comme suit:

$$S_s = \rho g [(1-m)\alpha + m\beta] \quad (1.12)$$

Le **second terme** de l'équation du bilan de masse, (1.7), est la divergence d'un flux de masse advectif. Nous préférons le terme "advection" au terme "convection" pour signifier un transport de masse à la même vitesse que l'eau, parce que strictement parlant, la convection fait référence à un mouvement de fluide dû à des différences de température. Le développement du terme nous donne:

$$\text{div} (\rho \mathbf{V}) = \rho \text{div} \mathbf{V} + \text{grad} \rho \cdot \mathbf{V}$$

Puisque $\rho = \rho(p)$, le terme **grad** ρ n'est pas tout à fait nul. Cependant, la compressibilité de l'eau est si petite (environ $5 \cdot 10^{-10}$ [ms²/kg]) que **grad** ρ peut être de nouveau négligé, lorsqu'on le compare aux autres termes. Avec cette approximation, nous obtenons pour le second terme de l'équation du bilan de masse:

$$\text{div} (\rho \mathbf{V}) \approx \rho \text{div} \mathbf{V} \quad (1.13)$$

En remplaçant le terme simplifié de dérivée par rapport au temps (équation (1.11)) et le terme simplifié de la divergence advective (équation (1.13)), nous avons:

$$\rho S_s \frac{\partial H}{\partial t} + \rho \text{div} \mathbf{V} + \rho Q = 0$$

En divisant par la densité ρ nous obtenons:

$$\begin{aligned} S_s \frac{\partial H}{\partial t} + \text{div} \mathbf{V} + Q &= 0 \\ \text{ou} & \\ S_s \frac{\partial H}{\partial t} + \text{div} (-[K] \text{grad} H) + Q &= 0 \end{aligned} \quad (1.14)$$

avec $[K] = \rho g [k] / \mu$ et $H = (p/\rho g) + z$. C'est "l'équation de diffusivité" classique ou "équation de bilan de volume" utilisée par les hydrogéologues pour décrire un écoulement d'eau souterraine simple. Pour un écoulement permanent, la dérivée temporelle est nulle et l'équation (1.14) devient:

$$\text{div} (-[K] \text{grad} H) + Q = 0 \quad (1.15)$$

Les équations (1.14) et (1.15) sont les équations de base utilisées avec des conditions aux limites et des conditions initiales appropriées.

1.1.3 Conditions aux limites et conditions initiales usuelles [de MARSILY, 1981]

Nous avons établi au paragraphe précédent l'équation de diffusivité, qui est une équation aux dérivées partielles de type elliptique en régime permanent ($\partial H/\partial t = 0$) ou parabolique en régime transitoire ($\partial H/\partial t \neq 0$). Les différents types de nappe que nous rencontrons en pratique sont les "domaines" où nous allons intégrer l'équation de diffusivité.

Pour ce faire, il nous faut tout d'abord préciser les "conditions aux limites" de ces domaines d'intégration. On connaît en mathématiques trois types de conditions aux limites:

- les conditions de Dirichlet, qui portent sur la variable: H imposé;
- les conditions de Neumann, qui portent sur la dérivée première de la variable: $\partial H/\partial n$, flux imposé, où n est le vecteur unitaire perpendiculaire à la limite du domaine et dirigé positivement à l'extérieur de celui-ci;
- les conditions de Fourier ou de Cauchy, qui portent sur H et $\partial H/\partial n$: $H + \alpha(\partial H/\partial n)$ imposé.

De MARSILY (1981) en ajoute un quatrième type: les conditions de surface libre ou de suintement, qui sont des conditions aux limites doubles. Puis nous examinerons le problème des conditions initiales.

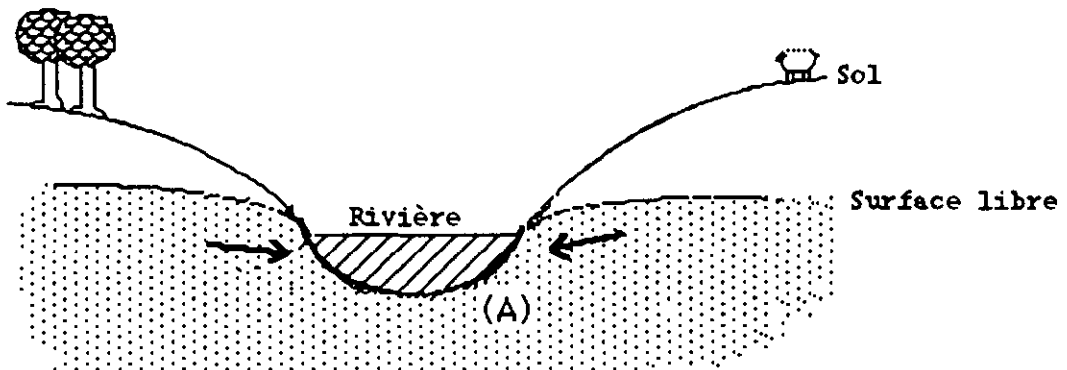
Nous classons ces conditions aux limites en deux grands ensembles :

- les conditions aux limites essentielles, qui concernent la limite du domaine sur laquelle on impose le potentiel;
- et les conditions aux limites naturelles, qui concernent la limite du domaine sur laquelle on impose un flux. Ce flux sera incorporé dans le terme de source de l'équation qui lui est associée, sous forme d'intégrale de contour et/ou de débit ponctuel.

En effet pour la résolution du système d'équation de TRANS3, à tous les points du domaine pour lesquels une équation est établie, soit on impose un débit et on calcule un potentiel, soit on impose un potentiel et on calcule un débit.

a) Limites à potentiel imposé

On impose les conditions de Dirichlet sur une limite si la charge hydraulique à la limite est indépendante des conditions de circulation dans la nappe. Ce sera généralement le contact d'une nappe avec un plan d'eau libre (mer, lac, rivière,...).



(d'après de MARSILY, G., 1981).

Le long du contact (A) nappe-rivière, le potentiel (ou charge hydraulique) est constant et imposé par la cote de l'eau dans la rivière. La rivière pourrait aussi bien drainer qu'alimenter la nappe. En plan, le cours d'une rivière peut constituer une limite à potentiel d'une nappe: la charge dans la rivière varie bien sûr le long de celle-ci, et éventuellement au cours du temps, mais c'est une donnée exogène à la nappe.

Un exutoire de nappe (ligne de source) peut également être une limite à potentiel imposé, celle de la cote d'eau dans la source, tant que la nappe s'écoule vers l'extérieur.

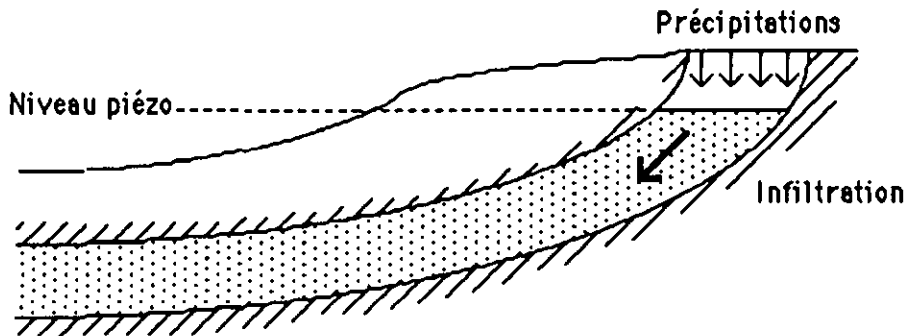
Les affleurements d'une nappe peuvent également être considérés comme une limite à potentiel imposé, tant que le taux d'infiltration de l'eau de pluie sur les affleurements est supérieur au flux d'eau s'écoulant vers l'intérieur de la nappe. Autrement dit, la nappe est supposée être toujours "gorgée d'eau" sur ses affleurements, l'excès d'eau infiltrée étant drainé par un réseau de rivières en surface.

b) Limites à flux imposé

C'est une condition de Neumann. En effet, imposer une valeur de gradient de charge normal à la limite, $\partial H/\partial n$, revient, d'après la loi de Darcy, à imposer la valeur du flux: $-K (\partial H/\partial n)$ sur cette limite.

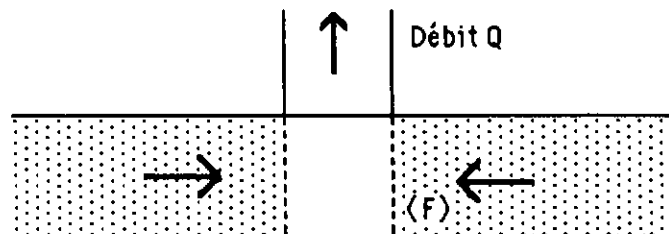
On distingue:

- Les limites à flux nul: $\partial H/\partial n = 0$
 - Par exemple le contact d'une formation aquifère avec un imperméable.
- Les limites à flux non nul:
 - Par exemple, un affleurement dans une zone où le taux d'infiltration de la pluie est inférieur au flux d'eau s'écoulant vers l'intérieur de la nappe. C'est le taux d'infiltration de la pluie qui fixera le flux entrant.



(d'après de MARSILY, G., 1981).

- Un prélèvement à débit imposé dans un ouvrage (puits, tranchée, ...) constitue également une limite à flux imposé:



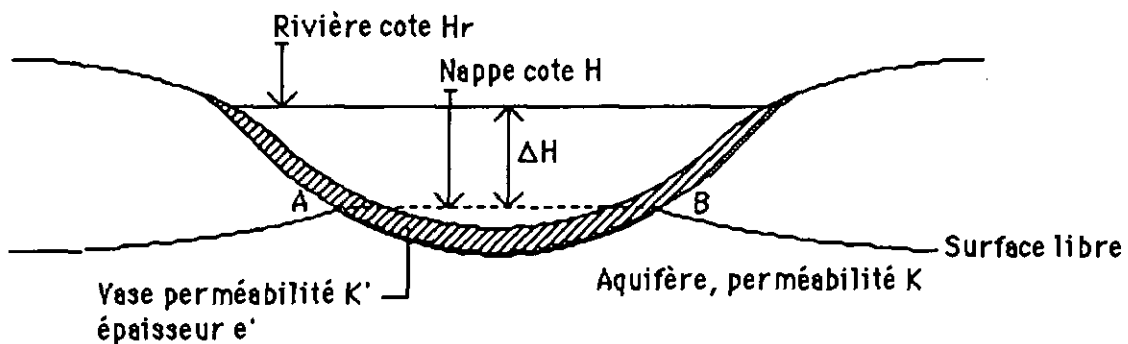
$$\int_{(F)} [K] \frac{\partial H}{\partial n} d\sigma = Q$$

(d'après de MARSILY, G., 1981).

- Le contact entre deux aquifères contigus à perméabilités différentes peut dans certains cas être traité comme une limite à flux imposé, si le contraste de perméabilité est très élevé. Si un domaine 2 auquel on s'intéresse est en contact par endroits avec un domaine 1 à perméabilité beaucoup plus faible: $K_1 \ll K_2$. On peut admettre que les écoulements dans un milieu 1 ne sont pas perturbés par ceux du milieu 2. C'est par exemple souvent le cas pour les écoulements d'une nappe de coteau latérale (milieu 1) vers une nappe alluviale très perméable (milieu 2).

c) Conditions de Fourier

Imaginons une rivière drainant (ou alimentant) une nappe libre, mais dont le fond serait colmaté par une couche de vase peu perméable.



(d'après de MARSILY, G., 1981).

La différence $\Delta H = H_r - H$ crée le gradient nécessaire à un certain débit q par unité de surface de contact nappe-rivière. D'après la loi de Darcy, on a:

$$q = K' \frac{\Delta H}{e'} = K' \frac{H_r - H}{e'}$$

Mais d'après cette même loi, ce débit q évalué dans l'aquifère est donné par:

$$q = -K \frac{\partial H}{\partial n}$$

où n est le vecteur unitaire normal à la surface de contact orienté positivement vers la rivière.

Par conservation du flux à la traversée de l'interface AB, on peut donc écrire:

$$-K \frac{\partial H}{\partial n} + \frac{K'}{e'} H = \frac{K'}{e'} H_r$$

ce qui est par définition une condition de Fourier.

d) Surface libre

Dans ce cas le problème est non-linéaire; les équations sont définies. Deux conditions définissent une surface libre:

- p = pression atmosphérique sur tout point de la surface libre. Exprimée en charge, on prend par convention pression atmosphérique = 0, et on écrit:

$H = z$ (Charge hydraulique en un point égale à la cote en ce point).

- De plus, la surface libre est une surface à flux nul si la nappe n'est pas alimentée par sa surface libre:

$$\frac{\partial H}{\partial n} = 0$$

Sinon, le flux qui la traverse est donné par:

$$\frac{\partial H}{\partial n} = a$$

a est positif pour une infiltration distribuée, négatif pour une évaporation.

Tout le problème de la surface libre est que l'on ne connaît pas à priori sa position. On est amené à rechercher, par approximations successives, une surface dans l'espace qui vérifie simultanément:

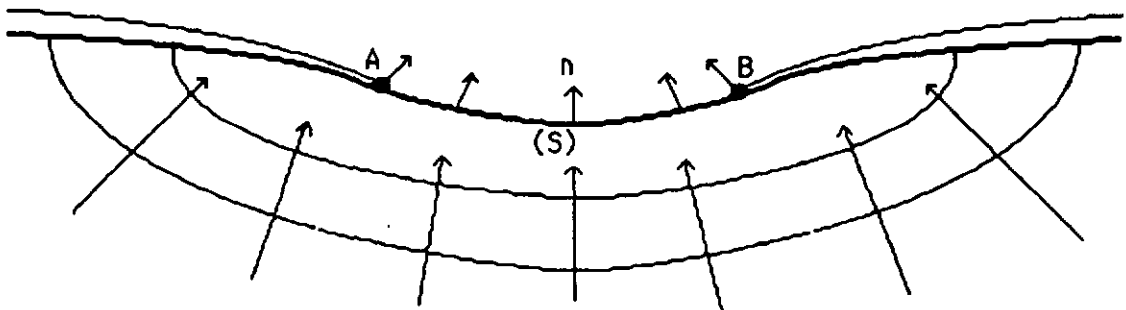
$$H = z$$

$$\frac{\partial H}{\partial n} = a$$

Le problème est donc assez délicat. On se donne d'habitude à priori une position estimée de la surface libre, ce qui délimite le domaine d'intégration. On fixe sur cette limite la charge hydraulique ($H=z$), et on vérifie après intégration de l'équation, que le flux calculé $K(\partial H/\partial n)$ est correct. S'il ne l'est pas, on modifie dans un sens souhaité la position de la surface libre et on recommence le calcul.

e) Surface de suintement

Quand l'eau d'une nappe sourd vers l'extérieur le long d'une ligne d'émergence, la surface de contact (S) est dite surface de suintement.



(d'après de MARSILY, G., 1981).

La condition est alors:

$$H = z \quad (\text{pression atmosphérique} = 0)$$

$$\frac{\partial H}{\partial n} < 0 \quad (\text{si } n \text{ orienté vers l'extérieur})$$

En effet, le flux de la nappe est sortant.

La surface de suintement pose le même genre de problèmes que la surface libre. Si on connaît la cote z le long de (S) , on est obligé de rechercher par approximations successives les points A et B où commence et s'achève respectivement la surface de suintement et où débute la surface libre. On impose généralement la position de la surface (S) et on vérifie que le flux est bien sortant.

f) Conditions initiales

Rappelons enfin que pour les problèmes transitoires ($\partial H/\partial t \neq 0$, équations paraboliques), il faudra de plus définir les conditions initiales du problème, soit les valeurs de la charge H en tout point du domaine pour $t = 0$.

1.1.4 Equation du schéma de diffusivité.

Soient V , un domaine, et S son contour. On subdivise S en deux parties S_1 et S_2 telles que:

$$S_1 \cap S_2 = \emptyset$$

$$S_1 \cup S_2 = S$$

L'équation de diffusivité est:

$$S_S \frac{\partial H}{\partial t} + \text{div} (-[K] \text{grad } H) + Q = 0 \quad \text{dans } V \quad (1.16a)$$

avec les conditions aux limites à satisfaire:

- Condition essentielle de Dirichlet

$$H(\mathbf{x}, t) = H_s(\mathbf{x}, t) \quad \text{sur } S_1 \quad (1.16b)$$

- Condition naturelle de Neumann

$$(-[K] \text{grad } H) \cdot \mathbf{n} = Q_s(\mathbf{x}, t) \quad \text{sur } S_2 \quad (1.16c)$$

et les conditions initiales:

$$H(\mathbf{x}, t) = H_0(\mathbf{x}) \quad \text{dans } V \quad \text{pour } t = t_0 \quad (1.16d)$$

où: H_0 est une fonction connue;

H_s est une fonction donnée pour une portion de limite S_1 ;

$\mathbf{x} = \langle x \ y \ z \rangle$ les coordonnées dans l'espace;

Q_s = flux normal à travers l'autre portion de limite S_2 .

Nous nous sommes intéressés jusqu'ici essentiellement aux phénomènes de transmission de pression (ou de charge) et à leurs conséquences en termes de débit. Nous allons aborder une autre classe de problème: celle des transports qui ont lieu avec l'eau. Nous parlerons des écoulements:

- de fluides miscibles }
- } en milieu poreux.
- de chaleur }

Les problèmes qui y sont liés sont très nombreux: pollution, géothermie, climatisation, stockage de la chaleur.

1.2 Critère de pollution. [CASTANY, 1982]

Une eau est polluée lorsque, sous l'effet de l'activité humaine, elle devient impropre à la demande d'utilisation ou qu'elle présente un danger pour l'environnement. Les causes naturelles de la dégradation de la qualité de l'eau souterraine sont donc exclues de ce concept. Exemples: dissolution de sels minéraux du réservoir, l'invasion des eaux salées marines dans les aquifères côtiers affluant à la mer, etc... En effet si cette définition était généralisée, la plupart des eaux thermales et minérales mériteraient le qualificatif de polluées.

Une eau souterraine renferme une teneur en substances dissoutes d'origine naturelle, géologique. C'est le "bruit de fond" des géochimistes. Le degré de pollution est apprécié par la mesure de l'écart entre les caractéristiques physico-chimiques de l'eau considérée, par référence au bruit de fond, local ou régional. Celui-ci est difficile à apprécier dans les régions objet de siècles d'activités agricoles ou de décennies de développement industriel.

La qualification de la qualité de l'eau est spécifiée par référence à des normes de qualité, fixées par les exigences de la demande. Par exemple une eau impropre à la boisson peut convenir à l'industrie ou à l'agriculture; les exigences sur la teneur en chlorures sont moins sévères en zone aride qu'en zone humide.

Le polluant, transporté et propagé par l'eau souterraine, subit une migration et une évolution dans l'espace souterrain. La vulnérabilité de l'eau souterraine à la pollution s'exprime par des cartes de vulnérabilité dont l'échelle est adaptée aux problèmes à résoudre.

1.3 Equation aux dérivées partielles du transport de fluides miscibles.

[CASTANY, 1982; WANG et ANDERSON, 1982; de MARSILY, 1981; BEAR, 1979; FRIED et COMBARNOUS, 1971]

Les fluides étant miscibles, on ne considérera qu'une phase fluide, et on définira la concentration d'une substance dans l'autre: par exemple, concentration d'eau salée dans l'eau douce, ou plus simplement de sel dans l'eau. Il n'y aura pas d'interface, mais une variation continue de la concentration dans le milieu. C'est la concentration C qui sera la variable principale. On appelle "transport en solution" ce type de déplacement.

Pour séparer nettement ce qui est loi du transport des lois d'échange entre les éléments transportés et le milieu, nous traiterons d'abord du mouvement des éléments ne subissant aucune modification ou échange en parcourant le milieu poreux: on les appelle les éléments conservatifs. Ceci exclut donc aussi bien la décroissance radioactive que les phénomènes d'adsorption.

Nous traiterons ensuite du problème des éléments non conservatifs et verrons comment les lois particulières du comportement de ces éléments viennent se rajouter aux équations proprement dites.

Il est d'abord nécessaire de bien caractériser ce que l'on entend par transport d'éléments en solution. Au premier chef, il s'agit d'éléments qui sont inclus dans des combinaisons chimiques formant des sels solubles dans l'eau. Ces sels peuvent eux-mêmes être plus ou moins ionisés, suivant leur force ionique. Cependant, ces éléments dissous peuvent également être présents sous forme de complexes chimiques électriquement neutres, formés d'agrégats de différentes molécules ou ions.

La terminologie récente anglo-saxonne appelle ion tout sel en solution, qu'il soit ou non chargé électriquement. Ainsi, par exemple, Co_3Ca en solution, non dissocié en Co_3^{2+} , Ca^{2-} , sera appelé un ion complexe électriquement neutre.

Par ailleurs, des sels dits "insolubles" peuvent cependant être transportés en solution en éléments-traces, cette "insolubilité" n'étant jamais nulle en réalité; compte tenu des très faibles concentrations auxquelles certains radioéléments sont toxiques, par exemple, ces éléments-traces peuvent ne pas être négligeables dans les calculs de sûreté radiologique.

Il faut enfin y ajouter les éléments transportés dans des agrégats moléculaires plus importants, tels que des micelles ou des colloïdes, qui seront éventuellement susceptibles d'être retenus par filtration mécanique dans le réseau du milieu poreux, compte tenu de leur diamètre.

Tous ces éléments transportés sont dits "en solution" dans la mesure où ils ne constituent pas une phase mobile différente de la phase fluide, mais s'intègre à l'unique phase fluide (l'eau de milieu naturel) en y modifiant éventuellement les propriétés physiques (masse volumique et viscosité) et chimiques.

On oppose ainsi le transport en solution aux écoulements de fluides immiscibles, tels que les écoulements d'huile et d'eau, dont les lois de migration sont entièrement différentes.

Quand des éléments en solution sont transportés par un fluide en mouvement, on définit, pour caractériser le transport, la concentration volumique du fluide qui circule en chacune des substances en solution. On l'exprime généralement en g/l ou mg/l, ou encore, pour des radioéléments, en multiples ou en fraction de la C.M.A.P. (Concentration Maximum Admissible dans l'eau de boisson pour la Population), définie par les arrêtés officiels.

Le mouvement de polluants dans les eaux souterraines se produit non seulement par "advection" mais aussi par "conduction".

La conduction est un mélange et une propagation causés en partie par un mouvement brownien appelé "diffusion moléculaire" et en partie par des variations de vitesse au sein du milieu poreux appelées "dispersion cinématique".

Le transport de solides dissous à la même vitesse que l'eau souterraine est appelé transport advectif. Nous utilisons le terme "advection" de préférence à "convection" parce que, strictement parlant, la convection fait référence à un mouvement de fluide dû à des différences de température.

Dans plusieurs problèmes concrets, la conduction causée par une diffusion moléculaire est négligeable comparée à celle causée par une dispersion cinématique.

Nous allons maintenant préciser les lois du transport conductif-advectif dans les milieux poreux saturés.

1.3.1 Conduction.

La conduction est le résultat d'une dispersion cinématique et d'une diffusion moléculaire au sein du milieu poreux saturé.

1.3.1.1 La diffusion moléculaire

C'est un phénomène lié à l'agitation moléculaire : dans un fluide au repos, le mouvement brownien envoie des particules dans toutes les directions de l'espace. Si la concentration du fluide est homogène dans l'espace, deux points voisins envoient, en moyenne, autant de particules, l'une vers l'autre, et l'agitation moléculaire ne modifie pas la concentration de la solution. Cependant, si la concentration de la solution n'est pas homogène dans l'espace, autrement dit s'il existe un gradient de concentration entre deux points voisins, le point à concentration la plus élevée enverra en moyenne plus de particules, dans toutes les directions, que le point à concentration faible. La résultante de cette agitation moléculaire sera donc un transfert de particules des zones à concentration élevée vers les zones à concentration faible.

Soit f^d_0 , le flux massique diffusif par unité de surface du soluté, $[MT^{-1}L^{-2}]$. Fick a établi que le flux massique de particules est, dans un fluide au repos, proportionnel au gradient de concentration :

$$f^d_0 = - [d_0] \text{ grad } C \quad (1.17)$$

Le coefficient de proportionnalité $[d_0]$, $[L^2T^{-1}]$, baptisé coefficient de diffusion moléculaire, est isotrope et s'exprime par :

$$[d_0] = (RT/N) (1/6\pi\mu r) \quad (1.18)$$

où R = constante des gaz parfaits = 8.32 unités MKS (Si), $[ML^2T^{-2} \text{ } ^\circ K^{-1}]$;
 N = nombre d'Avogadro = 6.023×10^{23} ;
 T = température absolue (degré Kelvin) = température $^\circ C + 273.15$;
 μ = viscosité du fluide;
 r = rayon moyen des agrégats moléculaires qui diffusent.

Par exemple, pour ClNa dans l'eau à 20 $^\circ C$, $d_0 = 1.3 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{sec}$.

En milieu poreux, la diffusion moléculaire se poursuit dans l'ensemble de la phase fluide (aussi celle qui s'écoule que celle qui est immobile). Seul le solide arrête (ou tout au moins ralentit très fortement) le mouvement brownien des particules. Il en résulte, pour un fluide dans un milieu poreux qui ne s'écoule pas, un coefficient de diffusion en milieu poreux qui est plus faible que $[d_0]$.

On admet généralement que le rapport d/d_0 , appelé la tortuosité du milieu, vaut :

$$[d]/[d_0] = 1/(F m) \quad (1.19)$$

où F = facteur de formation des géophysiciens, défini par le rapport résistivité électrique de la roche sur résistivité de l'eau contenue;
 m = porosité totale;

$[d]$ = coefficient de diffusion moléculaire de la phase fluide en présence du milieu poreux.

En pratique, $[d]/[d_0]$ varie de 0.1 (argiles) à 0.7 (sables).

En se rapportant à une section d'aquifère, la porosité totale intervient car seule la partie fluide est concernée par cette diffusion moléculaire. Le flux massique diffusif par unité de surface d'aquifère, f^d , $[MT^{-1}L^{-2}]$, peut donc s'écrire :

$$f^d = - m [d] \text{ grad } C \quad (1.20)$$

La partie fluide se subdivise en une partie mobile de concentration C , définie par la porosité cinématique, m_c , diffusant avec un coefficient $[d_1]$, et une partie immobile de concentration C' , définie par $(m - m_c)$, diffusant avec un coefficient $[d_2]$. Les fractions immobiles échangent des éléments en fonction du gradient de C' . Les coefficients $[d_1]$ et $[d_2]$ seraient probablement respectivement plus forts et plus faibles que le coefficient global $[d]$. Il faudrait, en toute rigueur, écrire le terme diffusif :

$$f^d = - m_c [d_1] \text{ grad } C - (m - m_c) [d_2] \text{ grad } C' \quad (1.21)$$

Nous négligerons cet effet, en particulier en raison de l'existence de la dispersion cinématique, qui rend déjà elle-même la diffusion presque négligeable.

1.3.1.2 La dispersion cinématique

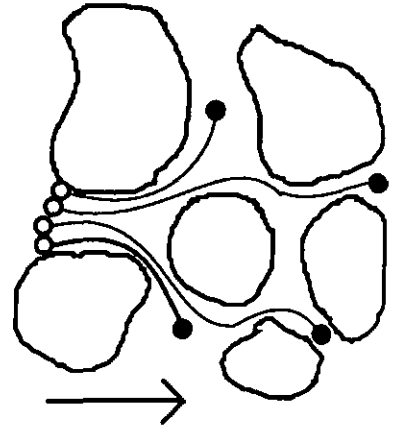
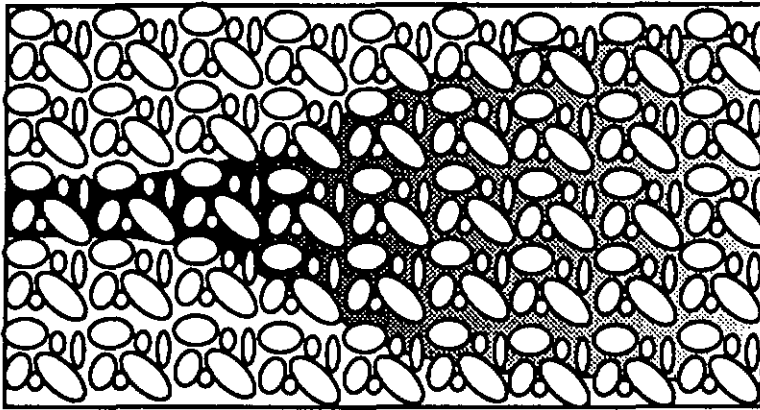
C'est un phénomène de mélange essentiellement lié à l'hétérogénéité des vitesses microscopiques, quelle qu'en soit l'échelle d'observation, au sein du milieu poreux (Figure 1.1).

A l'intérieur d'un pore, les vitesses ne sont pas uniformément réparties dans la fraction mobile, en régime laminaire, comme l'indique la loi de Poiseuille dans une conduite cylindrique (Figure 1.2a). Ceci entraîne une propagation plus rapide des éléments transportés dans l'axe des pores, d'où, par mélange et diffusion moléculaire, un étalement progressif des éléments transportés par rapport au mouvement moyen d'advection (Figure 1.1).

De pore à pore, la différence des ouvertures et des longueurs de trajet engendre une différence des vitesses moyennes (Figure 1.2b). Les fluides passant par chacun des chemins se mélangent et engendrent une dilution de la concentration. Notons que ce processus entraîne également un étalement de la propagation des éléments par rapport à la direction principale de l'écoulement (Figure 1.1).

Une stratification, ou tout élément d'hétérogénéité à plus grande échelle tels que lentilles, intercalations, zones broyées ou fissurées, etc... introduit aussi une hétérogénéité du champ des vitesses, engendrant par les mêmes mécanismes que ci-dessus un mélange, et un étalement dans toutes les directions de l'espace des éléments transportés par le fluide.

La dispersion cinématique est donc le résultat de l'existence d'un champ de vitesse réel fort complexe et inconnu, que l'on néglige totalement dans l'advection quand on utilise la vitesse de Darcy (qui suppose que l'ensemble du milieu continu est sujet à l'écoulement).



Direction de l'écoulement moyen. (De FRIED and COMBARNOUS, 1971)

Figure 1.1: La distribution statique des chemins de l'écoulement autour des hétérogénéités locales conduit à la dispersion. Le procédé est montré ici à une échelle microscopique où l'espace poreux entoure des grains de taille de gravier : ○:Particules de fluide au temps t . ●:Particules de fluide au temps $t+dt$. (De WANG and ANDERSON, 1982)

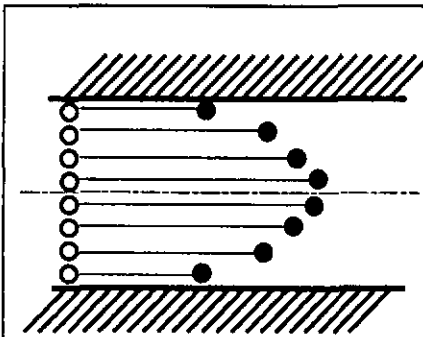


Figure 1.2.a: La vitesse est nulle sur la surface du solide, ce qui crée un gradient de vitesse dans la phase fluide, comme dans un tube capillaire. (De FRIED and COMBARNOUS, 1971)

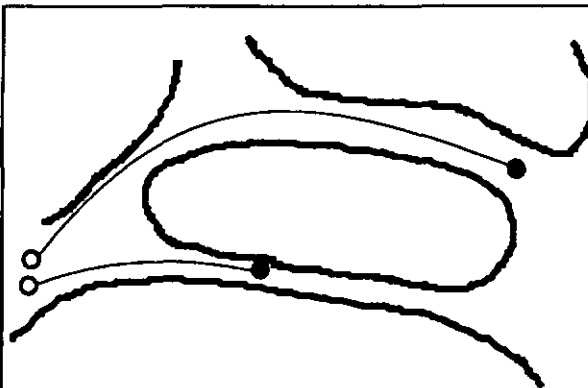


Figure 1.2.b: La variation des dimensions des pores cause des écarts entre les vitesses maxima le long de l'axe des pores. (De FRIED and COMBARNOUS, 1971).

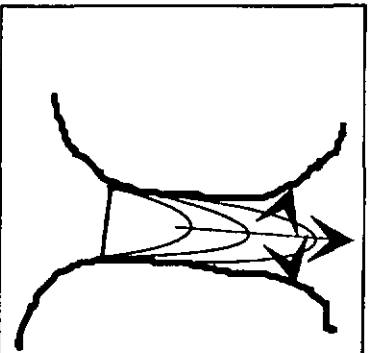


Figure 1.2.c: Un gradient de concentration est produit entre les lignes de courant adjacentes, causant ainsi une diffusion moléculaire transversale. (De BEAR, 1979).

Figure 1.2: Composantes de la conduction.

- :Particules de fluide au temps t .
- :Particules de fluide au temps $t+dt$.

Cette vitesse de Darcy est malheureusement la seule que l'on puisse atteindre macroscopiquement par le biais de la perméabilité; mais elle a cependant l'avantage d'être exacte au niveau de l'intégrale sur une surface donnée pour calculer un bilan des flux.

La décomposition du transfert en un terme advectif représentant le déplacement moyen et un terme dispersif intégrant les effets des hétérogénéités est purement arbitraire; le rôle respectif de chacun des termes dépend essentiellement du degré de finesse avec lequel le milieu poreux peut être décrit.

Quelle forme mathématique donner à la dispersion cinématique ? La réponse peut être soit théorique, soit expérimentale.

Le développement de la théorie essentiellement dû à Taylor, Scheidegger, Bear, Bachmat, et Fried, a été établi en considérant une distribution aléatoire dans l'espace de canalicules représentant les conduits à travers les pores du milieu poreux.

La formule mathématique proposée consiste à adopter une loi de transfert par dispersion, représentant ces phénomènes de mélange, analogue à la loi de Fick. Soit f^D , le flux massique dispersif par unité de section d'aquifère, $[MT^{-1}L^{-2}]$. On aura :

$$f^D = - [D'] \text{ grad } C \quad (1.22)$$

qui s'applique sur toute la section du milieu, comme la vitesse de Darcy, mais avec un coefficient de dispersion $[D']$ qui :

- est un tenseur, supposé être symétrique du 2^{ème} ordre;
- a comme direction principale la direction du vecteur vitesse de l'écoulement (donc lié au fluide et non pas au milieu), les autres directions principales étant généralement quelconques, et orthogonales à la première;
- représente un tenseur dont les coefficients sont eux-mêmes des fonctions du module de la vitesse d'écoulement.

Si l'on exprime le tenseur dans les directions principales d'anisotropie, il se réduit à trois composantes :

$$[D'] = \begin{bmatrix} D_L & 0 & 0 \\ 0 & D_T & 0 \\ 0 & 0 & D_T \end{bmatrix} \quad (1.23)$$

D_L étant le coefficient de dispersion longitudinale (dans le sens de l'écoulement) et D_T le coefficient de dispersion transversale (dans les deux directions orthogonales à la vitesse).

La valeur de ces coefficients de dispersion varie avec la valeur du module de la vitesse de Darcy, $|V|$, ou de la vitesse microscopique moyenne de l'écoulement, $|V_e|$.

$$V = m_c V_e \quad (1.24)$$

où \mathbf{V} est le vecteur vitesse fictive de Darcy, $[L^3T^{-1}L^{-2}]$;
 \mathbf{V}_e est le vecteur vitesse effective ou réelle, $[L^3T^{-1}L^{-2}]$;
 m_c est la porosité cinématique ou partie de l'eau capable de circuler, [1].

On définit pour cela un nombre de Péclet sans dimension :

$$P_e = |\mathbf{V}_e| \sqrt{k/d_0} \quad \text{ou} \quad P_e = |\mathbf{V}_e| l/d_0 \quad (1.25)$$

avec $|\mathbf{V}_e|$ est le module de la vitesse microscopique moyenne;
 k est la perméabilité intrinsèque;
 d_0 est le coefficient de dispersion moléculaire;
 l est une longueur caractéristique du milieu poreux (diamètre moyen des grains ou des pores).

Expérimentalement, au laboratoire de l'I.F.P., O. Pfankuch a vérifié la validité de cette loi de dispersion proposée par la théorie, et a établi la relation empirique liant les coefficients de dispersion au nombre de Péclet. En fonction du nombre de Péclet on définit 5 régimes d'écoulement, et pour chacun d'eux, une relation empirique entre D_L , D_T et P_e , (de MARSILY, 1981).

Ces 5 régimes de dispersion correspondent à des répartitions variables entre les rôles joués par la diffusion moléculaire et la dispersion cinématique.

Dans le domaine des vitesses usuelles, on admet généralement les relations :

$$D_L = \alpha_L |\mathbf{V}| \quad (1.26)$$

$$D_L = \alpha_T |\mathbf{V}| \quad (1.27)$$

α_L , et α_T , qui ont la dimension d'une longueur, sont baptisés coefficient de dispersion intrinsèque, ou dispersivité.

α_L en laboratoire, sur une colonne de sable, est de l'ordre de quelques centimètres. Sur le terrain, il est de l'ordre du mètre à la centaine de mètres, en fonction du degré d'hétérogénéité de la formation. Voir Lallemand-Barrès et al, 1978.

α_T est beaucoup plus petit : entre 1/5 et 1/100 de α_L .

Le flux massique conductif, f^c , par unité de section d'aquifère, $[MT^{-1}L^{-2}]$, est obtenu en additionnant les flux diffusif, f^d , et dispersif, f^D :

$$f^c = f^d + f^D = -m [d] \text{ grad } C - [D'] \text{ grad } C \quad (1.28)$$

$$f^c = - (m [d] + [D']) \text{ grad } C \quad (1.29)$$

ou plus simplement :

$$f^c = - [D] \text{ grad } C \quad (1.30)$$

On définit le tenseur des coefficients de conduction, $[D]$, comme suit:

$$[D] = m [d] + [D'] \quad (1.31)$$

ou encore, exprimé dans les directions principales de l'écoulement :

$$[D] = m d_0 \begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{bmatrix} + |V| \begin{bmatrix} \alpha_L & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_T & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_T \end{bmatrix} \quad (1.32)$$

où $\beta = 1/(F m)$ représente le facteur de tortuosité du milieu poreux. Dans le cas où le tenseur des coefficients de conduction n'est pas dans les directions principales de l'écoulement, il se présente sous la forme générale suivante :

$$[D] = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} \\ D_{21} & D_{22} & D_{23} \\ D_{31} & D_{32} & D_{33} \end{bmatrix} \quad (1.33)$$

La conduction est donc le résultat d'un front de concentration aigu qui s'estompe lorsque les particules individuelles de polluant transitent le long de différents chemins et à différentes vitesses, et que le mouvement brownien tend à égaliser la concentration du soluté. Elle est illustrée par une expérience classique dans laquelle un traceur est continuellement introduit dans l'extrémité de gradient supérieur d'une colonne de sable de laboratoire à travers laquelle de l'eau s'écoule sous des conditions d'état permanent. La concentration du traceur est exprimée en une concentration relative C/C_0 , où C est la concentration du traceur à la sortie et C_0 , la concentration initiale à l'entrée (figure 1.3.a). Le graphe de concentration en fonction du temps à un point de l'espace particulier est connu sous le nom de courbes d'avancement (de l'anglais "breakthrough curves") (figure 1.4). Si le traceur circulait à travers la colonne sans conduction, la courbe d'avancement serait une fonction en escalier (courbe en pointillé).

Dans un schéma idéalisé (figure 1.3b), le point initial d'un traceur injecté devient un nuage de forme elliptique dont la concentration diminue du centre vers les limites de l'ellipse suivant une distribution de Gauss. Le centre du nuage représente le point initial transporté uniquement par advection.

1.3.2 Advection

Le transport advectif correspond au transport de solides dissous à la même vitesse que l'eau souterraine. Autrement dit, le flux de masse advectif est le flux de masse résultant du vecteur vitesse moyenne réelle V_e . Dans un volume infinitésimal à un point de l'aquifère, le débit spécifique d'eau souterraine à travers une face perpendiculaire à la direction x est $m_c (V_e)_x$, où m_c est la porosité cinématique [1], partie de l'eau souterraine capable de circuler, et $(V_e)_x$ est la composante de la vitesse réelle dans la direction x , [$L^3T^{-1}L^{-2}$]. Si C est la concentration du corps en solution exprimée en masse par unité de volume d'eau [ML^{-3}], alors le flux de masse advectif dans la direction x est :

$$(f^a)_x = m_c C (V_e)_x \quad (1.34)$$

Figure 1.3: (De BEAR, 1979) Dispersion longitudinale et transversale d'un traceur.

(a) Dispersion longitudinale dans une colonne de sable à travers laquelle l'eau s'écoule sous des conditions d'état permanent;

(b) Dispersion d'une source ponctuelle instantanée dans un champ d'écoulement uniforme. Les distributions de concentration longitudinale et transversale dans les ellipses de variance C_i montrent le caractère non isotrope de la dispersion cinématique.

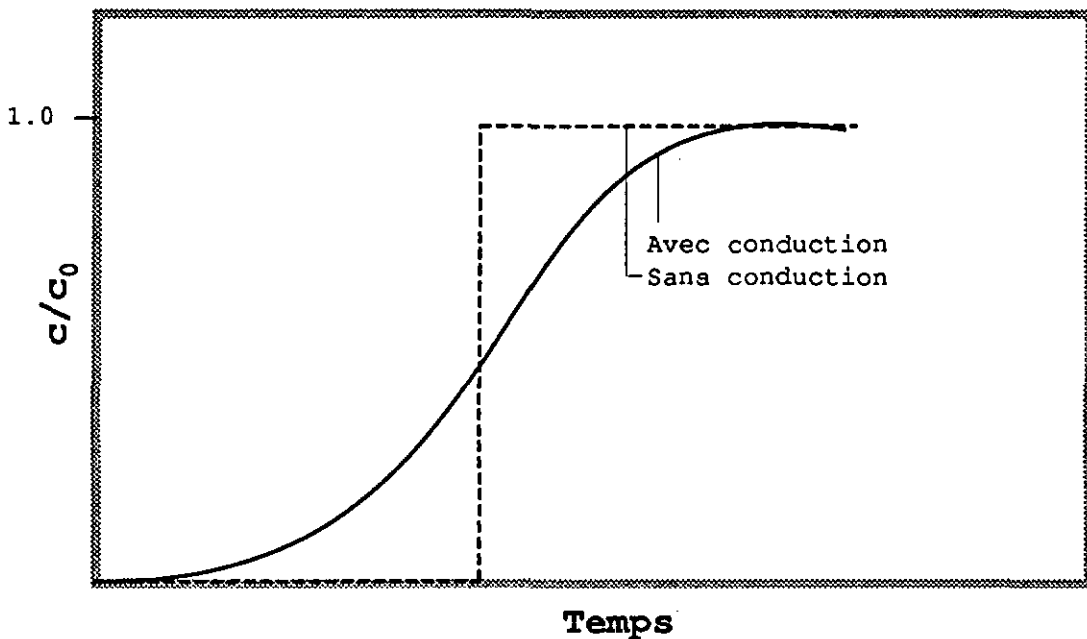
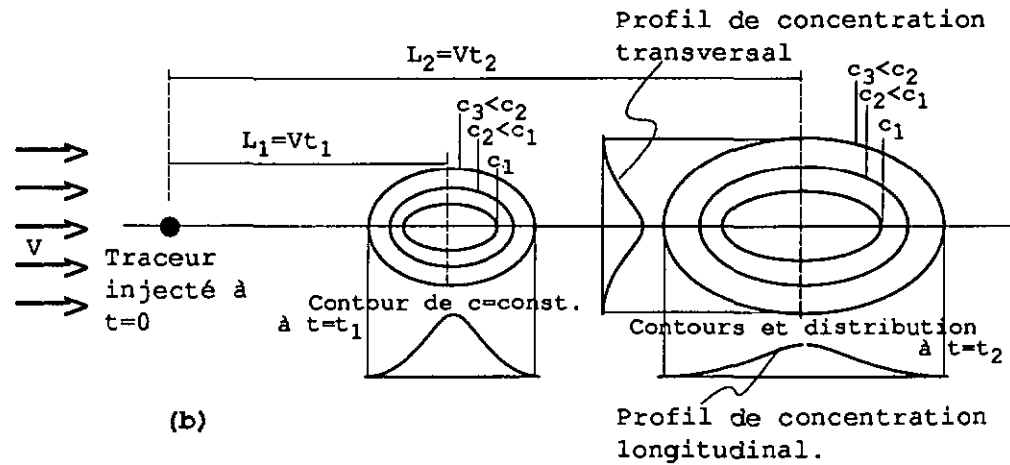
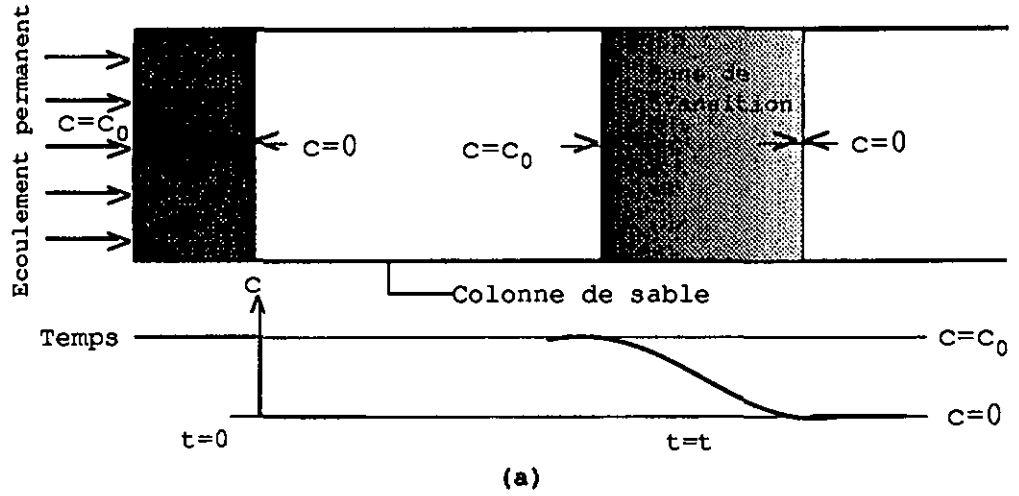


Figure 1.4: Courbes d'avancement ("Breakthrough curves") du traceur, avec et sans conduction. (De WANG and ANDERSON, 1982).

où $(f^a)_x$ est le flux de masse advectif dans la direction x par unité de surface d'aquifère, $[MT^{-1}L^{-2}]$;

m_c est la porosité cinématique, [1];

C est la concentration du corps en solution, $[ML^{-3}]$;

$(V_e)_x$ est la composante de la vitesse réelle dans la direction x, $[L^3T^{-1}L^{-2}]$.

Par analogie, les flux advectifs dans les directions y et z sont, respectivement:

$$(f^a)_y = m_c C (V_e)_y \quad (1.35)$$

$$(f^a)_z = m_c C (V_e)_z \quad (1.36)$$

où $(V_e)_y$ et $(V_e)_z$ sont les composantes du vecteur vitesse réelle dans les directions y et z.

Les équations (1.34) à (1.36) peuvent s'écrire sous la forme matricielle suivante:

$$\begin{Bmatrix} (f^a)_x \\ (f^a)_y \\ (f^a)_z \end{Bmatrix} = m_c C \begin{Bmatrix} (V_e)_x \\ (V_e)_y \\ (V_e)_z \end{Bmatrix} \quad (1.37)$$

ou encore sous la forme vectorielle suivante:

$$f^a = m_c C V_e \quad (1.38)$$

En combinant les équations (1.24) et (1.38), le flux advectif se réduit à l'expression:

$$f^a = C V \quad (1.39)$$

où V est le vecteur vitesse fictive ou vitesse de Darcy, $[L^3T^{-1}L^{-2}]$.

1.3.3 Equation du couplage conductif-advectif.

La présumée loi qui stipule que le flux de masse est proportionnel au gradient de concentration est appelée modèle Fickien. Cette loi joue le même rôle dans l'obtention de l'équation gouvernant le transport de masse conductif-advectif que celui joué par la loi de Darcy dans l'obtention de l'équation gouvernant l'écoulement souterrain. L'autre loi utilisée dans la dérivation est la continuité ou le principe de conservation de masse.

Le flux de masse total par unité de section d'aquifère, f en $[MT^{-1}L^{-2}]$, est la somme des flux conductif, f^c , et advectif, f^a :

$$f = f^c + f^a \quad (1.40)$$

$$\mathbf{f} = - [D] \text{grad } C + C \mathbf{V} \quad (1.41)$$

La continuité ou la conservation de masse requiert que la divergence du flux, qui est l'écoulement de masse net sortant par unité de volume de l'aquifère par unité de temps, soit égale à la vitesse de diminution de concentration par unité de volume de l'aquifère.

$$\text{div}(\mathbf{f}) = - m_v \partial C / \partial t \quad (1.42)$$

où m_v est la porosité volumique du milieu, [1].

La dérivée de la concentration par rapport au temps est multipliée par la porosité volumique de sorte que le côté droit de l'équation (1.43) représente la variation de masse de corps dissous par unité de volume d'aquifère plutôt que par unité de volume d'eau. En substituant l'expression du flux total, on obtient :

$$\text{div}(-[D] \text{grad } C) + \text{div}(C \mathbf{V}) + m_v \partial C / \partial t = 0 \quad (1.43)$$

L'équation (1.43) est valable si les suppositions d'absence de sources et de pertes et d'absence de réactions chimiques entre le corps dissous et le milieu poreux sont vérifiées.

Plusieurs chercheurs ont noté que l'équation gouvernant la conduction-advection que l'on vient d'établir ne simule pas avec précision le transport de polluant lorsque la distance parcourue est courte. Spécifiquement, les courbes d'avancement mesurées en laboratoire ne se superposent pas à celles prévues par la théorie quand cette forme d'équation est utilisée. Gelhar et al (1979) utilisent l'analyse stochastique pour dériver une forme révisée de l'équation conduction-advection, qui démontre que le modèle Fickien pour le transport conductif n'est pas adéquat à proximité de la source de contamination. La forme révisée de l'équation a des termes supplémentaires qui sont importants pour des trajets de courtes distances, mais qui deviennent insignifiants pour des longues distances (grandes valeurs de temps). Le transport non-Fickien est aussi discuté par Matheron et De Marsily (1980).

1.3.4 Sources, pertes et réactions chimiques.

L'équation (1.43) peut être rapidement modifiée pour tenir compte des sources et pertes et de certains genres de réactions chimiques. Pour inclure les pertes et sources il faut ajouter, au côté gauche de l'équation (1.43), le terme:

$$Q_c = C' w/b \quad (1.44)$$

où C' est la concentration du soluté dans la source ou perte de fluide, $[ML^{-3}]$;
 w est le débit d'écoulement par unité de volume d'aquifère (positif pour un flux entrant et négatif pour un flux sortant), équivalent à la vitesse de Darcy, $[L^3T^{-1}L^{-2}]$;
 b est l'épaisseur de l'aquifère, $[L]$.

Une forme généralisée du terme de réaction chimique à ajouter au côté gauche de l'équation (1.47) est:

$$Q_c = m_v \sum_{k=1}^s R_k \quad (1.45)$$

où R_k est la vitesse de production du soluté en réaction k des différentes réactions (positive pour création d'un nouveau soluté et négative pour une destruction), $[MT^{-1}L^{-3}]$;

m_v est la porosité volumique, [1].

Un important exemple est l'adsorption de soluté sur les faces de solides à l'intérieur du milieu poreux. La molécule H_2O par son caractère polaire qui l'assimile à un minuscule aimant permanent est attirée et fixée par les irrégularités électroniques de la surface des cristaux, lesquelles constituent également de minuscules dipôles. Une certaine quantité d'eau du sol est ainsi "adsorbée" par la roche. L'adsorption et la désorption agissent comme des pertes et sources, respectivement. Le procédé est habituellement suffisamment rapide pour être considéré comme une réaction d'échange d'ions dans un équilibre chimique. Le terme de réaction chimique pour une telle réaction est :

$$R = \rho_b \partial C^* / \partial t \quad (1.46)$$

où ρ_b est la densité "bulk" du matériau sec, $[ML^{-3}]$;

C^* est la concentration relative du soluté adsorbé, [1];

R est la vitesse de production de soluté, $[MT^{-1}L^{-3}]$.

Le polluant adsorbé C^* est une fonction de la concentration C du soluté. Les relations entre C^* et C représentent l'équilibre chimique du processus et sont connues comme des isothermes d'adsorption parce qu'elles sont déterminées expérimentalement en laboratoire à une température constante:

$$C^* = K_d C \quad (1.47)$$

où K_d est le coefficient de distribution.

Alors le terme de réaction chimique devient :

$$R = \rho_b K_d \partial C / \partial t \quad (1.48)$$

Le terme d'adsorption est ainsi écrit explicitement en fonction de la concentration C du soluté. Anderson (1979) discute de l'utilisation de coefficient de distribution aussi bien que des autres expressions utilisées pour quantifier l'échange d'ion.

1.3.5 Equations du schéma de la conduction-advection.

Différentes approches conceptuelles ont été faites pour représenter mathématiquement la conduction-advection.

Elles ont conduit à l'équation générale de la conduction-advection, équation (1.43).

On appelle schéma de conduction-advection le système suivant d'équations:

-l'équation de conduction-advection:

$$\text{div}(-[D] \text{grad } C) + \text{div}(C \mathbf{V}) + m_v \partial C / \partial t + Q_c = 0 \quad (1.49)$$

-l'équation de Darcy:

$$\mathbf{v} = - (\rho g [k] / \mu) \text{ grad } h \quad (1.50)$$

-l'équation d'état du mélange:

$$d = d(C) \quad (1.51)$$

$$\rho = \rho(C) \quad (1.52)$$

$$\mu = \mu(C) \quad (1.53)$$

-les conditions initiales et aux limites dépendent du problème.

$$\begin{aligned} & \text{(conditions essentielles de Dirichlet)} \\ & C = C_S(\mathbf{x}, t) \text{ sur } S_1 \end{aligned} \quad (1.54)$$

$$\begin{aligned} & \text{(conditions naturelles de Cauchy)} \\ & (-[D] \text{ grad } C + C \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} = Q_S \text{ sur } S_2 \end{aligned} \quad (1.55)$$

$$\begin{aligned} & \text{(Condition initiale)} \\ & C = C_0(\mathbf{x}, t_0) \text{ dans } V \text{ et sur } S \text{ pour } t = t_0 \end{aligned} \quad (1.56)$$

où C , la concentration en polluant, $[ML^{-3}]$;

m_s , la porosité surfacique, $[1]$;

$[D]$, le tenseur de conduction-advection, $[L^2T^{-1}]$;

\mathbf{v} , le vecteur vitesse de Darcy, $[L^3T^{-1}L^{-2}]$;

m_v , la porosité volumique, $[1]$;

ρ , la masse spécifique du mélange, $[ML^{-3}]$;

m_c , la porosité cinématique, $[1]$;

μ , la viscosité dynamique du mélange, $[ML^{-1}T^{-1}]$;

$[k]$, le tenseur de perméabilité intrinsèque, $[L^2]$;

P , la pression, $[MLT^{-2}L^{-2}]$;

g , la gravité, $[LT^{-2}]$;

\mathbf{n} , vecteur des cosinus directeur;

t , le temps, $[T]$;

d , le coefficient de diffusion moléculaire, $[L^2T^{-1}]$;

$\mathbf{x} = \langle x \ y \ z \rangle$, le vecteur des coordonnées;

V , le domaine d'étude;

S , le contour du domaine V ;

S_1 et S_2 , deux parties de S telles que:

$$S_1 \cap S_2 = \emptyset$$

$$S_1 \cup S_2 = S;$$

C_0 , fonction connue. Habituellement une concentration constante supposée à travers tout le domaine d'intérêt;

C_S , est une fonction donnée du lieu et du temps pour une portion particulière de la limite;

Q_S , fonction connue. Pour des limites imperméables, Q_S s'annule.

Il n'est pas question de résoudre un tel système directement et on cherche à le simplifier.

1.3.6 Eléments de résolution du schéma de la conduction-advection.

Fondamentalement, le schéma de la conduction-advection peut faire l'objet de deux types d'étude:

- * la masse spécifique ρ , le coefficient de diffusion moléculaire D_d et la viscosité du mélange μ varient avec la concentration: c'est le cas général;
- * La masse spécifique ρ , le coefficient de diffusion moléculaire D_d et la viscosité du mélange μ sont invariant: c'est le cas du traceur.

Les différences fondamentales entre ces deux types d'étude sont les suivantes :

- dans le cas du traceur, les équations hydrodynamiques sont indépendantes de l'équation de conduction-advection. On résout ces équations hydrodynamiques au début du problème, on reporte ensuite les vitesses obtenues en chaque point à chaque instant dans l'équation de conduction-advection que l'on résout alors;
- dans le cas général, les équations hydrodynamiques et l'équation de conduction-advection sont dépendantes, car le coefficient de diffusion D_d , la masse spécifique ρ et la viscosité du mélange μ sont fonctions de la concentration. La résolution de ces équations doit être simultanée: on se donne une distribution de concentrations, on en déduit une distribution de vitesses, puis des coefficients de conduction et une nouvelle distribution de concentrations, puis une nouvelle distribution de vitesses et l'on itère le procédé. En principe, il faut alors caler une distribution de concentrations connue. En pratique on opère de la manière suivante: au temps $t+dt$, on calcule les vitesses, puis les concentrations, en utilisant les valeurs $\rho(t)$ et $\mu(t)$; on en déduit alors $\rho'(t)$ et $\mu'(t)$ (valeurs intermédiaires de ρ et μ), et l'on itère le procédé pour chaque pas de temps, en faisant un test de convergence sur C.

On a besoin de connaître en tout point de l'espace et à chaque instant trois quantités:

- * les concentrations C en polluant: résultat désiré;
- * les vitesses du mélange: paramètres nécessaires;
- * les coefficients de conduction: paramètres nécessaires.

Remarque: Le programme TRANS3 ne résout que le cas d'un traceur.

1.4 Equation aux dérivées partielles du transport thermique.

A première vue, le transport de la chaleur en milieu poreux doit obéir à trois mécanismes distincts:

- conduction de la matrice solide;
- transport par la phase fluide;
- échange de chaleur entre les deux phases, en fonction de leur différence de température.

Le premier phénomène se traduirait par un transport de la chaleur portant sur la température T_s du solide. Le second serait semblable au mécanisme de conduction pour le fluide miscible, la température T_f du fluide jouant le rôle

de la concentration. Le troisième s'apparenterait aux mécanismes d'échange entre phase solide et liquide que l'on n'examinera pas.

Dans la pratique, sauf dans de rares exceptions, on fait l'hypothèse que la température du solide et celle du fluide s'égalisent presque instantanément, et qu'il n'existe qu'une seule température T dans le milieu poreux. Houpeurt et al (1965) ont montré en effet que cette égalisation des températures s'effectue en moins d'une minute pour un milieu de granulométrie inférieure à 1 mm, ou en moins de 2 heures pour 10 cm.

Tout ce que nous venons de dire pour le transport d'un élément en solution se transpose alors au transport de la chaleur en milieu poreux. On calculera donc une température unique pour le milieu, le transport se traduisant par :

- un phénomène d'advection, analogue à celui des éléments en solution;
- un phénomène analogue à la conduction en milieu poreux:
 - * la conduction pure dans les deux phases solide+liquide remplace la diffusion moléculaire;
 - * l'hétérogénéité de la vitesse réelle engendre une "conductivité fictive" anisotrope équivalente à la dispersion cinématique.

La conservation de la chaleur permet directement d'écrire, (de MARSILY, 1981) :

$$\text{div}(-[\lambda] \text{grad} T) + \text{div}(\rho C \mathbf{V} T) + \rho'' C'' \frac{\partial T}{\partial t} + Q_T = 0 \quad (1.57)$$

où

$[\lambda]$, tenseur de conductivité thermique équivalente, $[MLT^{-3}K^{-1}]$;

T , température, $[K]$;

ρC , capacité calorifique de l'eau, $[ML^{-1}T^{-2}K^{-1}]$;

$\rho'' C''$, capacité calorifique du milieu poreux (eau + solide), $[ML^{-1}T^{-2}K^{-1}]$,

$$\rho'' C'' = m \rho C + (1-m) \rho' C';$$

$\rho' C'$, capacité calorifique du solide dont la température $T'=T$, $[ML^{-1}T^{-2}K^{-1}]$;

m , porosité totale, $[1]$;

Q_T , terme de source ou perte, $[ML^2T^{-3}L^{-3}]$.

Le tenseur de conductivité équivalente $[\lambda]$ regroupe la conductivité isotrope du milieu poreux (eau + solide) en l'absence d'écoulement, $[\lambda_0]$, et un terme de macrodispersivité lié à l'hétérogénéité de la vitesse, fonction linéaire de cette vitesse. Nous proposons d'utiliser la vitesse de Darcy, \mathbf{V} , multipliée par la capacité calorifique volumique de l'eau, ρC , pour que le coefficient de proportionnalité ait la dimension d'une longueur. Dans les axes longitudinaux et transversaux liés à la vitesse, on aura :

$$\lambda_L = \lambda_0 + \beta_L \rho C |\mathbf{V}| \quad (1.58)$$

$$\lambda_T = \lambda_0 + \beta_T \rho C |\mathbf{V}| \quad (1.59)$$

1.5 Equation du modèle TRANS3.

On peut tenter de ramener les équations (1.14), (1.43) et (1.57) à des formes comparables, pour établir une équation généralisée de ces trois types de problèmes.

Pour l'écoulement hydrodynamique, équation (1.14), on peut écrire:

$$\text{div}(-[K] \text{grad} H) + S_S \frac{\partial H}{\partial t} + Q = 0 \quad (1.60)$$

Pour le transport chimique, l'équation (1.47) reste inchangée:

$$\text{div}(-[D] \text{grad} C) + \text{div}(C \mathbf{V}) + m_V \frac{\partial C}{\partial t} + Q_C = 0 \quad (1.61)$$

$$[D] = m [d] + |\mathbf{V}| [\alpha] \quad (1.62)$$

Pour le transport de chaleur, l'équation (1.58) peut se réécrire sous la forme:

$$\text{div}\left(-\frac{[\lambda]}{\rho C} \text{grad} T\right) + \text{div}(\mathbf{V} T) + \frac{\rho'' C''}{\rho C} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{Q_T}{\rho C} = 0 \quad (1.63)$$

avec

$$\frac{[\lambda]}{\rho C} = \frac{[\lambda_0]}{\rho C} + [\beta] |\mathbf{V}| \quad (1.64)$$

Les équations (1.60), (1.61) et (1.63) peuvent être généralisées comme suit:

$$\text{div}(-[M] \text{grad} u) + a_d \text{div}(\mathbf{V} u) + \omega \frac{\partial u}{\partial t} + f_V = 0 \quad (1.65)$$

	Hydrodynamique	Chimique	Thermique
[M] =	[K] [m/s]	[D] [m ² s ⁻¹]	$\frac{[\lambda]}{\rho C}$ [m ² s ⁻¹]
u =	H [m]	C [Kg m ⁻³]	T [°C]
a _d =	0	1	1
ω =	S _S [m ⁻¹]	m _V	$\frac{\rho'' C''}{\rho C}$
f _V =	Q [m ³ s ⁻¹]	Q _C [Kg m ⁻³] [s ⁻¹]	$\frac{Q_T}{\rho C}$ [°C s ⁻¹]

Et ce sera cette équation (1.65) que nous utiliserons dans le modèle d'éléments finis TRANS3.

2. Modèle numérique : formulation par éléments finis de l'équation du modèle TRANS3. [DHATT et TOUZOT, 1981; DIEULIN, 1980; GOBLET, 1986; KIRALY, 1985]

Nous allons définir les principaux avantages et inconvénients de certaines méthodes de résolution de l'équation de conduction-advection, afin de mettre en évidence le choix porté sur la méthode de résolution numérique par éléments finis.

L'équation de conduction-advection (1.65) possède un certain nombre de solutions analytiques, pour des conditions aux limites et des conditions initiales simples. Ces solutions sont très utilisées pour interpréter des essais de traçage, grâce à une méthode développée par SAUTY (1977).

La simulation d'un transfert de masse ou d'énergie dans un aquifère quelconque est caractérisée par une géométrie, des conditions initiales et aux limites, des historiques d'injection de contaminant et de pompage, trop complexes pour être représentée par des méthodes purement analytiques. Elle peut, cependant, être traitée par des méthodes discrètes.

On appelle méthode discrète, celle qui permet de déterminer la valeur de la variable inconnue seulement sur un nombre limité de points et pour un nombre limité de dates. D'autre part, la valeur calculée n'est plus la solution exacte de l'équation, mais seulement une valeur approchée, avec une précision que l'on cherche à optimiser. Nous allons brièvement présenter les méthodes numériques les plus importantes et expliquer les critères qui ont guidés notre choix.

2.1.1 Méthode semi-analytique.

Cette méthode a été développée récemment par ROSS et al., (1979). Elle utilise le principe suivant: l'équation de l'écoulement est résolue par une méthode quelconque; puis le domaine étudié est subdivisé en tubes de courant, eux-mêmes subdivisés en tronçons. Sur chaque tronçon, considéré comme homogène et sans échange avec ses voisins, on utilise une solution analytique dérivée de la solution unidimensionnelle. La variation de la concentration à l'entrée du tronçon n'est pas simple, aussi utilise-t-on une méthode du type convolution pour étendre la solution analytique.

Cette méthode présente les avantages suivants:

- représentation des grandes zones homogènes avec peu de tubes de courant et représentation plus fine des zones hétérogènes;
- traitement facile de certaines discontinuités;
- rapidité de calcul;
- suppression des problèmes de stabilité et de dispersion numérique.

Nous voyons plusieurs restrictions à l'emploi de cette méthode:

- elle ne s'applique que lorsque la dispersion transversale est négligeable, ou sans influence sur les échanges entre tubes de courant;
- les conditions initiales et aux limites sont soumises à des restrictions, en particulier les conditions initiales doivent être simples pour que l'on puisse utiliser les solutions analytiques;
- le problème d'écoulement est résolu indépendamment et la discrétisation en tubes de courant, est complexe et peut demander une intervention de l'utilisateur pour s'adapter aux données physiques;

- l'utilisation de ce type de technique pour simuler les transferts dans un écoulement transitoire paraît donc délicate. Cette restriction doit être tempérée par le fait que l'on suppose rarement que les écoulements sont transitoires, même lorsque la méthode de calcul s'y prête bien, pour des raisons de calculs.

Notons enfin qu'une méthode similaire dans son esprit avait déjà été développée et mise en œuvre dans plusieurs programmes par GRINGARTEN et al., (1976), pour des calculs de transferts thermiques.

2.1.2 Méthodes par particules mobiles.

Ces méthodes, de formulation assez intuitive, mettent d'abord l'accent sur le transport advectif, qu'elles décrivent toutes de la même façon. Elles traitent la dispersion séparément, et de diverses manières. Nous présenterons, comme exemples, la méthode des caractéristiques (en anglais, méthode PIC: Particles In Cell) et la méthode des particules à déplacement aléatoire (en anglais, méthode DPRW: Discrete Parcel Random Walk).

Ces deux méthodes résolvent l'équation du transport advectif de la façon suivante:

- on calcule un champ de vitesse par une méthode discrète quelconque;
- on subdivise le domaine étudié en mailles et on attribue une vitesse au centre de chaque maille;
- on affecte aux mailles sources un flux de particules, porteuses chacune d'une certaine masse ou concentration;
- à chaque pas de temps, on déplace chaque particule le long d'un vecteur, calculé comme le produit de la vitesse à l'emplacement précédent par le pas de temps.

Chacune des deux méthodes traite différemment le problème de dispersion:

- **Méthode PIC** : Chaque particule est affectée d'une concentration. A chaque pas de temps, une concentration moyenne est calculée sur chaque maille par recensement des particules présentes. Puis l'équation de la dispersion sans advection est résolue, pour créer un phénomène de mélange, par la méthode des différences finies.
Cette méthode, utilisée par de nombreux auteurs (GARDER et al., 1964), pose, entre autres, des problèmes de dispersion numérique, de conservation de masse et de convergence, que l'on ne sait pas maîtriser.
En outre, elle nécessite une discrétisation temporelle fine, donc un temps de calcul élevé.
- **Méthode DPRW** : Cette méthode est décrite par AHLSTROM et al., (1977). Les particules, affectées ici d'une masse, subissent à chaque pas de temps un mouvement supplémentaire résultant d'un tirage aléatoire, suivant une loi de Gauss anisotrope, qui simule bien le terme dispersif de l'équation du transport. Les problèmes de dispersion numérique et de conservation de la matière sont ici résolus, mais les calculs pour obtenir une précision acceptable sont volumineux, surtout si l'on veut introduire une interaction élément-matrice.
Toutefois, cette méthode connaît actuellement un succès certain et est programmée dans plusieurs codes d'usage courant (BEAR and VERRUIJT, 1987).

2.1.3 Méthode des différences finies.

Cette méthode est déjà ancienne et a fait l'objet de nombreuses publications. Nous n'en rappellerons pas ici le principe, mais simplement les principaux avantages et inconvénients.

Avantages de la méthode :

- simplicité des maillages formés de cellules carrées ou rectangulaires;
- simplicité et sens physique clair des équations (bilan des flux sur une maille).

Inconvénients de la méthode:

- représentation délicate des limites curvilignes;
- difficultés pour prendre en compte des grandeurs tensorielles (coefficient de dispersion en particulier): la méthode permet cette prise en compte, mais les équations y perdent leur caractère d'évidence physique. D'autre part, l'introduction des conditions aux limites devient très complexe;
- problème de dispersion numérique que l'on sait corriger à une dimension, mais non à 2 ou 3 dimensions;
- problème de stabilité numérique quand l'advection devient prédominante (représentation de fronts abrupts).

Les deux derniers points peuvent conduire à la nécessité d'un raffinement inacceptable du maillage. Notons que la méthode des différences finies intégrées, qui utilise des mailles de forme quelconque, résout le problème des frontières curvilignes, mais garde tous les autres inconvénients de la méthode classique, tout en perdant l'avantage considérable de la clarté des équations.

2.1.4 Méthode des éléments finis.

Elle partage avec la méthode précédente l'avantage de traiter très facilement des transferts en écoulement transitoire, ou d'introduire un couplage des équations, si nécessaire.

Elle se distingue de la méthode des différences finies par les points suivants:

- **Forme du maillage** : Les mailles sont de forme quelconque, généralement triangles, quadrangles, tétraèdres ou prismes, pouvant avoir des arêtes curvilignes. Ce qui permet une représentation aisée des frontières et des différentes formations géologiques dans le domaine étudié. De plus, on peut assembler des éléments uni-, bi- et tri-dimensionnels dans un espace tridimensionnel, afin de pouvoir tenir compte des phénomènes discrets, tels que les cours d'eau, les fractures, etc..
- **Forme de la fonction inconnue** : Au lieu d'être constante sur chaque maille, donc variable par paliers, elle peut être définie en tout point. Elle peut être continue et atteindre un degré élevé de dérivabilité et de continuité des dérivées. Ceci permet une représentation fine de fronts très abrupts, moyennant un effort de calcul important.
- **Formulation de l'équation** : La mise en forme de l'équation se fait par un mécanisme purement formel, sans intervention de considérations physiques telles que bilan de flux. Ceci permet une grande souplesse dans la forme des équations. En particulier, la prise en compte d'anisotropies n'introduit aucune complexité supplémentaire.

Le seul inconvénient de cette méthode par rapport à celle des différences finies est la lourdeur du calcul du système d'équations. Cet inconvénient disparaît à peu près totalement dès que l'on a affaire à un régime transitoire de dispersion sur un écoulement permanent, ce qui est souvent le cas.

Par contre, la méthode présente des problèmes communs avec celle des différences finies:

- **Dispersion numérique** : on corrige ce phénomène de la même manière qu'en différences finies, mais au prix d'un alourdissement des calculs.
- **Stabilité des régimes advectifs** : Comme en différences finies, il existe des méthodes pour remédier à ce problème, mais elles réduisent la précision par l'introduction d'une nouvelle dispersion numérique.
- **Taille des mailles** : C'est une conséquence du point précédent et c'est le principal reproche que l'on peut faire à ces deux méthodes. La taille des mailles n'est pas liée à la connaissance que l'on a des données, mais plutôt à des critères de stabilité et de convergence purement numériques. Ceci conduit généralement à des maillages assez fins et par conséquent à des calculs lourds.

2.1.5 Conclusion.

En fonction des critères résumés ci-dessus, il nous est apparu que, dans l'état actuel des recherches, et malgré ses limitations, la méthode des éléments finis était la plus apte à résoudre notre problème. La méthode des éléments finis était initialement conçue comme un outil d'analyse de structure pour les sciences de l'ingénieur. Mais la théorie et la formulation ont été progressivement si raffinées et si généralisées que la méthode a été appliquée avec succès dans d'autres domaines tels que l'écoulement souterrain et le transport de soluté ou de chaleur. Puisqu'il existe un grand nombre de publications décrivant en détail les techniques d'éléments finis (ZIENKIEWICZ, 1971; DESAI and ABEL, 1972; PINDER and GRAY, 1977; DHATT et TOUZOT, 1981; etc...), nous donnerons dans ce chapitre une présentation plutôt superficielle de la méthode.

D'une façon tout à fait générale, le fondement de la méthode des éléments finis est la représentation d'un domaine à étudier par un assemblage de sous-domaines appelés éléments finis (Figure 2.1). Ces éléments sont interconnectés à des joints appelés nœuds ou points nodaux. Des fonctions simples (polynômes linéaires, quadratiques ou cubiques) sont choisis pour approximer la distribution inconnue de la variable spatiale (dans notre problème, c'est la variable u , équation (1.65)) sur chaque élément fini. Si la variable u est remplacée par une approximation polynomiale connue dans l'équation différentielle gouvernant, cette dernière équation, multipliée par une fonction de pondération appropriée, peut être intégrée sur chaque élément. Cela conduit à un système de n_j équations simultanées, généralement linéaires, pour les n_j points nodaux. L'approximation polynomiale (ou fonction d'interpolation) étant connue pour chaque élément, les valeurs nodales de la fonction u sont suffisantes pour calculer la valeur approchée de u en tout point des éléments du domaine à l'étude.

2.2 Types d'éléments utilisés dans le modèle.

Des éléments uni-dimensionnels (1-D), bi-dimensionnels (2-D) et tri-dimensionnels (3-D) peuvent être assemblés pour représenter la forme de la région d'écoulement et l'hétérogénéité et/ou l'anisotropie des coefficients de conduction. Chaque élément est défini simultanément dans l'espace global par

EXEMPLE DE RÉSEAU D'ÉLÉMENTS FINIS

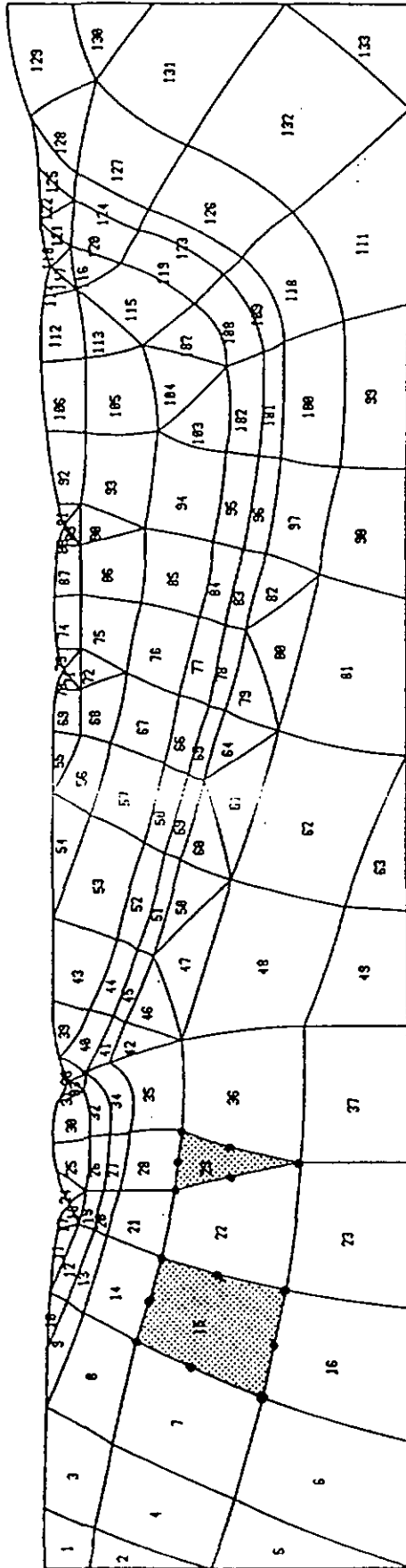


Figure 2.1 : Réseau d'éléments finis avec des éléments à 8 nœuds et à 6 nœuds, (KIRALY, L., 1985).

des coordonnées globales des points nodaux, et dans un espace local, par des coordonnées locales des nœuds (Figure 2.2), (KIRALY, 1985).

Dans l'espace local, tous les éléments ont une forme régulière et simple due au fait que les coordonnées locales normalisées $S = \langle S^1 S^2 S^3 \rangle$ et les coordonnées naturelles d'aire ou de volume $L = \langle L^1 L^2 L^3 \rangle$ prennent leurs valeurs dans les intervalles: $[-1; +1]$ et $[0; +1]$, respectivement.

2.2.1 Fonctions d'interpolation.

Par définition, chaque sommet d'élément est un point nodal ayant des coordonnées locales définies comme suit: $S = \langle \pm 1 \pm 1 \pm 1 \rangle$ ou $L = \langle 0 \text{ ou } 1 \ 0 \text{ ou } 1 \ 0 \text{ ou } 1 \rangle$. Si un élément ne possède que des nœuds sommets, il y aura alors deux points nodaux par arête et seule une interpolation linéaire des valeurs nodales peut être effectuée. Ce type d'élément est appelé "élément linéaire". En introduisant un nœud en milieu d'arête, nous pouvons créer des "éléments quadratiques" : il y aura trois points nodaux sur chaque arête, ce qui permettra une interpolation quadratique des valeurs nodales. Dans le logiciel TRANS3 d'éléments finis, nous utilisons exclusivement des éléments quadratiques (Figure 2.2), avec des fonctions d'interpolation quadratiques.

Les fonctions d'interpolation N dépendent uniquement des coordonnées locales S ou L . Ce sont des polynômes quadratiques en coordonnées locales S ou L . Nous les présentons en Annexe A. Si un élément donné a n^e points nodaux, il y aura n^e fonctions d'interpolation qui doivent satisfaire les conditions suivantes:

$$\text{- pour tout point } s_i : \quad \sum_{j=1}^{n^e} N_j(s_i) = 1$$

$$\text{- pour un point donné } i : \quad N_j(s_i) = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases}$$

(autrement dit, à un point nodal toutes les fonctions d'interpolation s'annulent, excepté une !)

La fonction continue u est la variable inconnue sur chaque élément. Si nous connaissons les valeurs nodales u_i à tous les points nodaux à un instant t donné, nous pouvons approximer u par une fonction quadratique u^* en tout point s_i de l'élément :

$$u^*(s_i, t) = \langle N_1(s_i) \ N_2(s_i) \ \dots \ N_{n^e}(s_i) \rangle \begin{Bmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ \vdots \\ u_{n^e}(t) \end{Bmatrix} = \langle N_{n^e}(s_i) \rangle (u_{n^e}(t)) \quad (2.1a)$$

De même, la connaissance des valeurs nodales, $V_{x_{n^e}}$, $V_{y_{n^e}}$ et $V_{z_{n^e}}$, des composantes de la vitesse à tous les nœuds à un instant t donné, permet d'établir une approximation V_x^* , V_y^* et V_z^* des composantes V_x , V_y et V_z de la vitesse dans les directions x , y et z , respectivement.

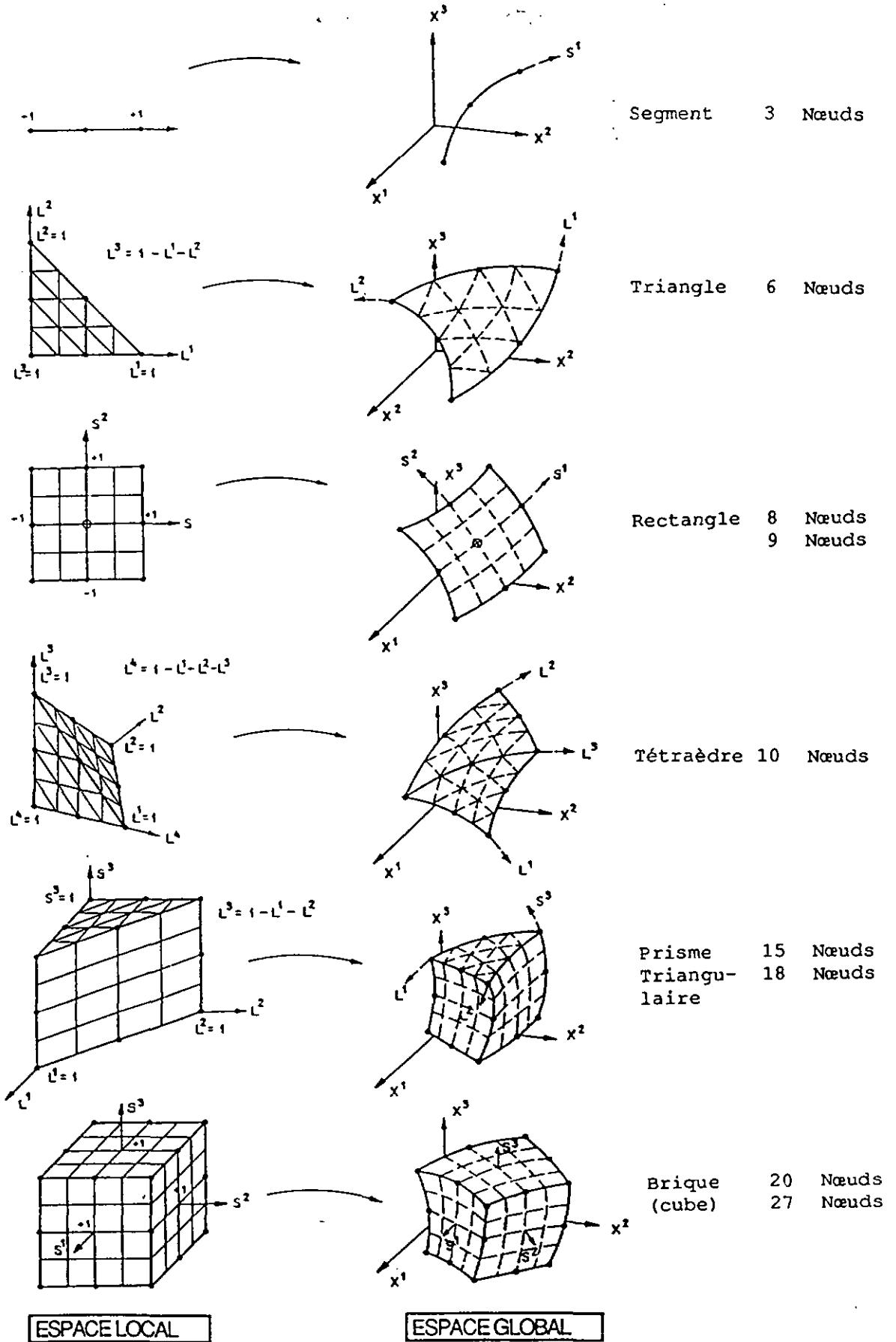


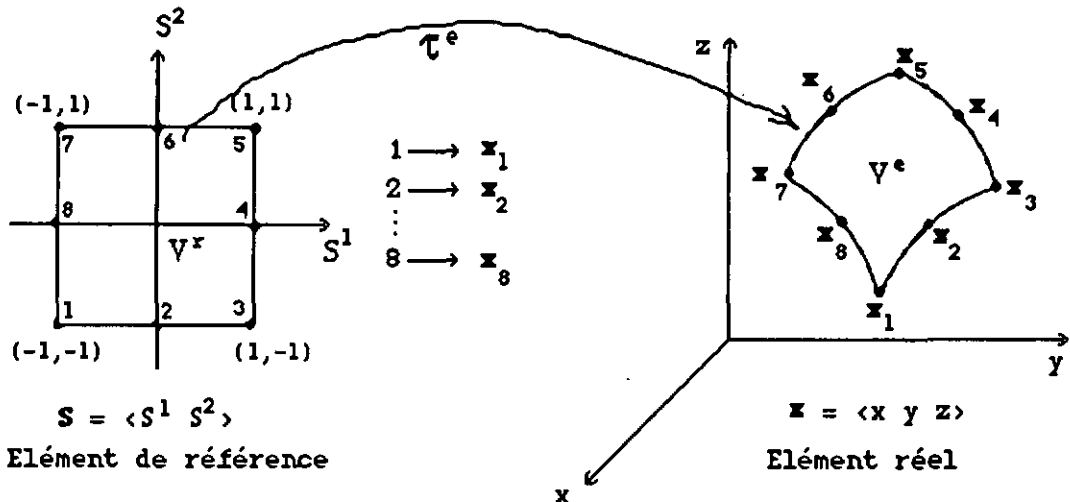
Figure 2.2. : Coordonnées globales et locales d'éléments à 1-,2- et 3- dimensions, (KIRALY, L., 1985).

$$\begin{aligned}
 V_x^*(\mathbf{s}_i, t) &= \langle N_{ne}(\mathbf{s}_i) \rangle \{V_{x_{ne}}(t)\} \\
 V_y^*(\mathbf{s}_i, t) &= \langle N_{ne}(\mathbf{s}_i) \rangle \{V_{y_{ne}}(t)\} \\
 V_z^*(\mathbf{s}_i, t) &= \langle N_{ne}(\mathbf{s}_i) \rangle \{V_{z_{ne}}(t)\}
 \end{aligned}
 \tag{2.1b}$$

2.2.2 Fonctions de transformation géométrique.

Nous devons à présent définir la forme et la taille "réelle" des éléments dans l'espace global, ou espace réel. Celui-ci est un espace tri-dimensionnel ordinaire rattaché à un système de référence cartésien orthonormé. Ce système de référence, défini par les vecteurs de la base $\mathbf{e}_i = \langle \mathbf{e}_1 \ \mathbf{e}_2 \ \mathbf{e}_3 \rangle$ et les coordonnées globales $\mathbf{x} = \langle x \ y \ z \rangle$, sera le même pour tous les éléments du modèle.

Afin de simplifier la définition analytique des éléments de forme complexe, introduisons la notion d'élément de référence. Un élément de référence V^r est un élément de forme très simple, repéré dans un espace de référence, qui peut être transformé en chaque élément réel V^e par une transformation géométrique \mathcal{T}^e . Par exemple pour le cas d'un rectangle à 8 nœuds :



La transformation \mathcal{T}^e définit les coordonnées \mathbf{x}^e de chaque point de l'élément réel à partir des coordonnées \mathbf{s} du point correspondant de l'élément de référence :

$$\mathcal{T}^e : \mathbf{s} \rightarrow \mathbf{x}^e = \mathbf{x}^e(\mathbf{s})
 \tag{2.2}$$

La transformation \mathcal{T}^e dépend de la forme et de la position de l'élément de réel, donc des coordonnées des nœuds géométriques qui le définissent. Il y a donc une transformation \mathcal{T}^e différente pour chaque élément réel :

$$\mathcal{T}^e : \mathbf{s} \rightarrow \mathbf{x}^e = \mathbf{x}^e(\mathbf{s}, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots)
 \tag{2.3}$$

où $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots$ sont les coordonnées des nœuds géométriques appartenant à l'élément V^e .

Les transformations \mathcal{T}^e doivent générer des éléments réels qui satisfont les règles de partition. Pour cela, chaque transformation \mathcal{T}^e est choisie de manière à présenter les trois propriétés suivantes :

- elle est bijective en tout point \mathbf{s} situé sur l'élément de référence ou sur sa frontière : à tout point de V^r correspond donc un point et un seul de V^e , et inversement;
- les nœuds géométriques de l'élément de référence correspondent aux nœuds géométriques de l'élément réel;
- chaque portion de frontière de l'élément de référence, définie par les nœuds géométriques de cette frontière, correspond à la portion de frontière de l'élément réel définie par les nœuds correspondants.

Soulignons qu'un même élément de référence V^r (par exemple un rectangle à 8 nœuds) se transforme en tous les éléments réels V^e de même type (quadrangles à 8 nœuds) par des transformations différentes. Nous utiliserons une transformation géométrique \mathcal{T}^e linéaire par rapport aux coordonnées géométriques $\{\mathbf{x}_{ne}\}$ des nœuds géométriques de l'élément réel V^e . De plus, les fonctions de transformation N^* sont choisies identiques pour les trois coordonnées :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}^e : \mathbf{s} &\rightarrow \mathbf{x}(\mathbf{s}) = \langle N_{ne}^*(\mathbf{s}) \rangle \{\mathbf{x}_{ne}\} \\ &y(\mathbf{s}) = \langle N_{ne}^*(\mathbf{s}) \rangle \{\mathbf{y}_{ne}\} \\ &z(\mathbf{s}) = \langle N_{ne}^*(\mathbf{s}) \rangle \{\mathbf{z}_{ne}\} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Par exemple pour un rectangle à 8 nœuds $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_8$ dans un espace tridi on a :

$$x(s^1, s^2) = N_1^*(s^1, s^2) x_1 + N_2^*(s^1, s^2) x_2 + \dots + N_8^*(s^1, s^2) x_8 = \langle N_i^*(s^1, s^2) \rangle \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ x_8 \end{Bmatrix}$$

$$y(s^1, s^2) = N_1^*(s^1, s^2) y_1 + N_2^*(s^1, s^2) y_2 + \dots + N_8^*(s^1, s^2) y_8 = \langle N_i^*(s^1, s^2) \rangle \begin{Bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ y_8 \end{Bmatrix}$$

$$z(s^1, s^2) = N_1^*(s^1, s^2) z_1 + N_2^*(s^1, s^2) z_2 + \dots + N_8^*(s^1, s^2) z_8 = \langle N_i^*(s^1, s^2) \rangle \begin{Bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ z_8 \end{Bmatrix}$$

Les fonctions N_i^* sont des polynômes en s , appelées fonctions de transformation géométrique. Nous pouvons considérer (2.4) comme une approximation nodale par sous-domaines des fonctions $x(s)$, $y(s)$ et $z(s)$. Les fonctions N_i^* doivent être telles que la transformation (2.4) satisfasse les trois propriétés énoncées précédemment dans ce paragraphe. Elles sont choisies comme étant des fonctions quadratiques afin de définir des éléments curvilignes et distordus.

Si les coordonnées globales sont connues, alors les arêtes des éléments seront des parties de courbes quadratiques (ou courbes paraboliques) passant par les points nodaux donnés. Dans la Figure 2.2 il apparaît clairement que, dans l'espace global, les axes de coordonnées locales s et L sont distordus pour donner un nouveau système de coordonnées curvilignes. L'orientation de ce système de coordonnées locales change d'un élément à un autre, et d'un point à un autre, même au sein d'un même élément.

Lorsque des éléments 1-D ou 2-D sont représentés dans un espace global 3-D, le nombre de coordonnées locales indépendantes s sera inférieur au nombre de coordonnées globales x , et la matrice de transformation, ci-dessous,

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial s^1} & \frac{\partial x}{\partial s^2} \\ \frac{\partial y}{\partial s^1} & \frac{\partial y}{\partial s^2} \\ \frac{\partial z}{\partial s^1} & \frac{\partial z}{\partial s^2} \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

ne sera pas une matrice carrée inversible. Cette observation sera importante lors du calcul du gradient de la fonction u , $\partial u/\partial x$, pour des éléments curvilignes 1-D et 2-D (voir paragraphe 2.5).

2.2.3 Éléments isoparamétriques.

Nous avons vu que les fonctions de transformation géométrique $N^*(s)$ et les fonctions d'interpolation $N(s)$ jouent un rôle important dans :

- la définition de la géométrie réelle des éléments en coordonnées cartésiennes globales (équation 2.4) et
- la définition des fonctions d'un ordre donné (linéaire, quadratique, etc...) sur les éléments réels pour évaluer la variable inconnue (équation 2.1a).

Si les fonctions de transformation géométrique et les fonctions d'interpolation sont choisies comme étant identiques sur un élément, alors cet élément est dit "isoparamétrique".

Dans le code TRANS3 d'éléments finis, nous utilisons exclusivement des éléments isoparamétriques quadratiques (figure 2.3). Nous en présentons ci-dessous la liste complète :

Dimension des éléments	Nom et coordonnées locales	Nombre de nœuds
1-D	Segment (s)	3
2-D	Triangle (L^1, L^2, L^3) avec $L^3 = 1 - L^1 - L^2$	6
2-D	Rectangle (s^1, s^2)	8
2-D	Rectangle (s^1, s^2) (Lagrange)	9
3-D	Tétraèdre (L^1, L^2, L^3, L^4) avec $L^4 = 1 - L^1 - L^2 - L^3$	10
3-D	Prisme triangulaire (L^1, L^2, L^3, s^3) avec $L^3 = 1 - L^1 - L^2$	15
3-D	Prisme triangulaire (Lagrange) (L^1, L^2, L^3, s^3) avec $L^3 = 1 - L^1 - L^2$	18
3-D	Brique (s^1, s^2, s^3)	20
3-D	Brique (s^1, s^2, s^3) (Lagrange)	27

Dans l'espace global, des éléments peuvent subir des déformations supplémentaires. Une arête ou une face d'élément peut être réduite à un "point" en attribuant le même numéro de nœud (donc les mêmes coordonnées globales) à plus d'un point nodal (KIRALY, 1985). Dans de telles situations, des précautions doivent cependant être prises pour assurer la compatibilité avec les éléments voisins (continuité C^0), (voir paragraphe 2.2.4).

2.2.4 Définitions.

a) Continuité

Si la fonction u est seule continue sur les frontières entre les éléments, l'approximation est de type C^0 (ou classe C^0). Si u et ses dérivées premières sont continues, l'approximation est de type C^1 . Si u et ses dérivées jusqu'à l'ordre α sont continues, l'approximation est de type C^α . Nous utilisons une approximation de type C^0 dans TRANS3.

b) Isoparamétrique

Un élément est dit isoparamétrique si les fonctions de transformation géométrique $N^*(\mathbf{s})$ sont identiques aux fonctions d'interpolation $N(\mathbf{s})$. Ceci implique que les nœuds géométriques soient confondus avec les nœuds d'interpolation. A partir de maintenant nous utiliserons $N(\mathbf{s})$ pour désigner les fonctions d'interpolation et de transformation géométrique.

c) Degré de liberté

Le nombre de variables nodales u_i associées à l'ensemble des nœuds d'interpolation de l'élément est appelé nombre de degré de liberté de l'élément. Dans TRANS3 nous avons une seule variable par nœud. Nous avons donc autant de degrés de liberté par élément qu'il n'y a de nœuds.

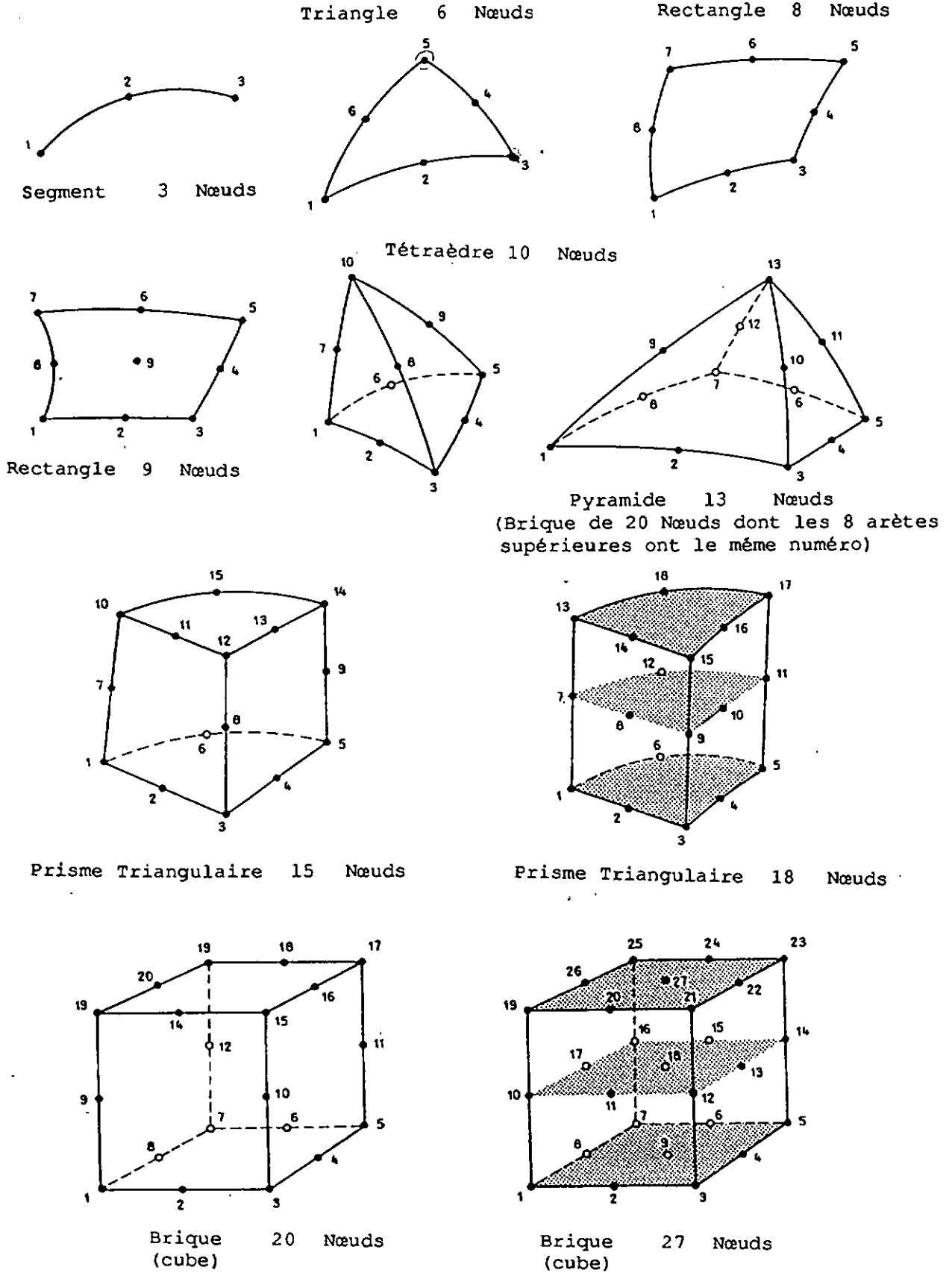


Figure 2.3 : Ordre de numérotation des nœuds, (KIRALY, L., 1985).

2.3 Formulation Intégrale : méthode des résidus pondérés.

L'équation différentielle gouvernant le transport de masse ou d'énergie résolue par TRANS3 est l'équation (1.65) que l'on réécrit ci-dessous :

$$\text{div} (-[M] \text{grad } u) + a_d \text{div} (\mathbf{V} u) + w \partial u / \partial t + f_v = 0 \quad (2.6)$$

La solution doit satisfaire les conditions initiales et les conditions aux limites suivantes :

$$u(\mathbf{x}, t_0) = u_0(\mathbf{x}) \text{ pour } t = t_0 \text{ (conditions initiales)} \quad (2.7)$$

$$u(\mathbf{x}, t) = u_s(\mathbf{x}, t) \text{ sur } S_1 \text{ (condition essentielle)} \quad (2.8)$$

$$(-[M] \text{grad } u + a_d \mathbf{V} u) \cdot \mathbf{n} = f_s \text{ sur } S_2 \text{ (condition naturelle)} \quad (2.9)$$

L'équation 2.6 peut être écrite sous la forme :

$$\mathbf{L}(u) = 0 \quad (2.10)$$

où \mathbf{L} est un opérateur différentiel définit comme suit :

$$\mathbf{L} = \text{div} (-[M] \text{grad } \cdot) + a_d \text{div} (\mathbf{V} \cdot) + w \partial \cdot / \partial t + f_v .$$

Puisque u est une fonction inconnue, nous allons l'approximer sur chaque élément par un type de polynôme connu :

$$u^*(\mathbf{s}, t) = \langle N_{ne}(\mathbf{s}) \rangle \{u_{ne}(t)\} \quad (2.11)$$

où $\langle N_{ne}(\mathbf{s}) \rangle = \langle N_1(\mathbf{s}) \dots N_{ne}(\mathbf{s}) \rangle$ sont les fonctions d'interpolation de l'élément,

$$\{u_{ne}(t)\} = \left\{ \begin{array}{l} u_1(t) \\ u_2(t) \\ \cdot \\ \cdot \\ u_{ne}(t) \end{array} \right\} \text{ sont les valeurs nodales connues de la fonction } u \text{ aux } n^e$$

nœuds de l'élément, à un instant t donné.

En remplaçant u par u^* , l'équation (2.10) ne sera pas satisfaite exactement :

$$\mathbf{L}(u^*) = \mathbf{L}(\langle N_{ne}(\mathbf{s}) \rangle \{u_{ne}(t)\}) = R \neq 0 \quad (2.12)$$

où R est un résidu, différent de zéro. Dans le but d'obtenir la "meilleure" solution approchée u^* des valeurs nodales $\{u_{ne}\}$, il faut que la fonction u^* satisfasse deux conditions :

1. la solution approchée u^* doit vérifier les conditions aux limites énoncées plus haut;

2. l'intégrale des résidus R pondérés sur un élément (et sur tout le domaine à l'étude) doit être nulle :

$$\int_V w_j \cdot \mathbf{L} (u^*) \, dV = 0 \quad (2.13)$$

où w_j , $j=1, \dots, n^e$ sont des fonctions de pondération dépendant des coordonnées \mathbf{s} ou \mathbf{x} .

Cette procédure est l'approche des "résidus pondérés" tout à fait générale. Si nous choisissons les fonctions de pondération w_j comme étant identiques aux fonctions d'interpolation N_j ($w_j = N_j$), nous obtenons la "méthode de Galerkin".

$$\int_V N_j \mathbf{L} (u^*) \, dV = 0 \quad j = 1, 2, \dots, n^e \quad (2.14)$$

ou encore :

$$\begin{aligned} \int_V N_j \operatorname{div} (-[M] \operatorname{grad} u^*) \, dV + \int_V N_j a_d \operatorname{div} (\mathbf{V} u^*) \, dV + \\ + \int_V N_j w \frac{\partial u^*}{\partial t} \, dV + \int_V N_j f_v \, dV = 0 \quad j = 1, 2, \dots, n^e \end{aligned} \quad (2.15)$$

L'équation (2.15) est la formulation intégrale ou forme intégrale que nous allons transformer.

2.4 Transformation de la forme intégrale.

a) Premier terme de l'équation (2.15)

$$T_1 = \int_V N_j \operatorname{div} (-[M] \operatorname{grad} u^*) \, dV \quad j = 1, 2, \dots, n^e$$

Ce premier terme contient des dérivées secondes de la fonction u^* . Ce qui implique que les dérivées premières de u^* doivent être continues (continuité de type C^1). L'intégration par partie de T_1 fournit une forme intégrale dite faible qui présente les avantages suivants :

- l'ordre des dérivées de u^* diminue. Il n'y a donc plus que des dérivées premières. Seule la fonction approchée u^* doit être continue. Les

conditions de dérivabilité de u^* sont moins fortes. On obtient une continuité de type C^0 ;

- certaines conditions aux limites, appelées conditions naturelles, apparaissant dans la forme faible, peuvent être substituées dans l'intégrale. Ce qui réduit les conditions imposées à la fonction u^* .

$$T_1 = \int_V N_j \operatorname{div} (-[M] \operatorname{grad} u^*) \, dV = - \int_V \operatorname{grad} N_j \cdot (-[M] \operatorname{grad} u^*) \, dV + \int_S N_j (-[M] \operatorname{grad} u^*) \cdot \mathbf{n} \, dS \quad j = 1, 2, \dots, n^e \quad (2.16)$$

Ainsi, la forme faible de T_1 comprend une intégrale de volume contenant uniquement des dérivés premières, et une intégrale de surface incorporant automatiquement une partie du flux normal à la limite S_2 (soit prescrite, soit calculée pendant la résolution).

b) Deuxième terme de l'équation (2.15)

Le deuxième terme peut être transformé comme suit :

$$T_2 = \int_V N_j a_d \operatorname{div} (\mathbf{V} u^*) \, dV = \int_V N_j a_d \mathbf{V} \cdot \operatorname{grad} u^* \, dV + \int_V N_j s_d \operatorname{div} (\mathbf{V}) u^* \, dV \quad j = 1, 2, \dots, n^e \quad (2.17a)$$

Le dernier terme de T_2 peut être remplacé par une intégrale de contour représentant une partie du flux normal f_s sur S_2 :

$$T_2 = \int_V N_j s_d \mathbf{V} \cdot \operatorname{grad} u^* \, dV + \int_S N_j a_d \mathbf{V} u^* \cdot \mathbf{n} \, dS \quad j = 1, 2, \dots, n^e \quad (2.17b)$$

En réunissant les équations (2.16) et (2.17b), on obtient :

$$T_1 + T_2 = \int_V \operatorname{grad} N_j \cdot ([M] \operatorname{grad} u^*) \, dV + \int_V N_j s_d \mathbf{V} \cdot \operatorname{grad} u^* \, dV + \int_S N_j a_d \mathbf{V} u^* \cdot \mathbf{n} \, dS$$

$$+ \int_S N_j (-[M] \text{grad } u^* + a_d \mathbf{v} u^*) \cdot \mathbf{n} \, dS \quad j = 1, 2, \dots, n^e \quad (2.18)$$

ou encore, en substituant les conditions naturelles :

$$T_1 + T_2 = \int_V \text{grad } N_j \cdot [M] \text{grad } u^* \, dV + \int_V N_j a_d \mathbf{v} \cdot \text{grad } u^* \, dV + \int_S N_j f_s \, dS \quad j = 1, 2, \dots, n^e \quad (2.19)$$

On pose
$$\text{grad } N_j = \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{Bmatrix} N_j = \begin{Bmatrix} N_{j,x} \\ N_{j,y} \\ N_{j,z} \end{Bmatrix} \quad (2.20)$$

$$\text{grad } u^* = \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{Bmatrix} \langle N_1 \ N_2 \ \dots \ N_{n^e} \rangle \begin{Bmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ \vdots \\ u_{n^e}(t) \end{Bmatrix} = [B] \begin{Bmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ \vdots \\ u_{n^e}(t) \end{Bmatrix} \quad (2.21)$$

avec
$$[B] = \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{Bmatrix} \langle N_1 \ N_2 \ \dots \ N_{n^e} \rangle = \begin{Bmatrix} \langle N_{n^e,x} \rangle \\ \langle N_{n^e,y} \rangle \\ \langle N_{n^e,z} \rangle \end{Bmatrix} \quad (2.22)$$

La matrice [B] est appelée matrice des gradients. On peut encore remplacer le vecteur vitesse par son approximation polynomiale \mathbf{v}^* (équation (2.1b)). En substituant les équations (2.20), (2.21), (2.22) et (2.1b) dans (1.19), on obtient :

$$\mathbf{v}^* \cdot \text{grad } u^* = \langle \mathbf{v}_x^* \ \mathbf{v}_y^* \ \mathbf{v}_z^* \rangle [B] \{u_{n^e}\} = \langle N_{n^e}(\mathbf{a}) \rangle [\{V_{xn^e}\} \ \{V_{yn^e}\} \ \{V_{zn^e}\}] [B] \{u_{n^e}\} \quad (2.23)$$

$$T_1 + T_2 = \int_V \langle N_{j,x} \ N_{j,y} \ N_{j,z} \rangle [M] [B] \{u_{n^e}\} \, dV +$$

$$\begin{aligned}
 & + \int_V N_j a_d \langle N_{ne}(s) \rangle [\{V_{xne}\} \{V_{yne}\} \{V_{zne}\}] [B] \{u_{ne}\} dV + \\
 & + \int_S N_j f_s dS \quad j = 1, 2, \dots, n^e \quad (2.24)
 \end{aligned}$$

On peut sortir le vecteur des valeurs nodales $\{u_{ne}\}$ de l'intégrale volumique puisque ces valeurs ne dépendent que du temps. De plus, on peut regrouper les $j=1, \dots, n^e$ expressions de T_1+T_2 sous forme matricielle :

$$\begin{aligned}
 T_1+T_2 = & \left(\int_V [B]^t [M] [B] dV \right) \{u_{ne}\} + \\
 & + (a_d \int_V \{N_{ne}\} \langle N_{ne} \rangle [\{V_{xne}\} \{V_{yne}\} \{V_{zne}\}] [B] dV) \{u_{ne}\} + \int_S \{N_{ne}\} f_s dS \quad (2.25)
 \end{aligned}$$

où $\{N_{ne}\} = \begin{Bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ \vdots \\ N_{n^e} \end{Bmatrix}$

$$[B]^t = \begin{bmatrix} \langle N_{1,x} & N_{1,y} & N_{1,z} \rangle \\ \langle N_{2,x} & N_{2,y} & N_{2,z} \rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle N_{n^e,x} & N_{n^e,y} & N_{n^e,z} \rangle \end{bmatrix} \text{ est la matrice transposée de [B].}$$

c) Troisième terme de l'équation (2.15)

$$T_3 = \int_V N_j w \frac{\partial u^*}{\partial t} dV \quad j=1, \dots, n^e = w \int_V \{N_{ne}\} \langle N_{ne} \rangle dV \left\{ \frac{\partial u_{ne}}{\partial t} \right\} \quad (2.26)$$

d) Quatrième terme de l'équation (2.15)

$$T_4 = \int_V N_j f_v dV \quad j=1, \dots, n^e = \int_V \{N_{ne}\} f_v dV \quad (2.27)$$

e) Substitution

En combinant les équations (2.15), (2.25), (2.26) et (2.27), et en supposant de plus que f_v et f_s sont constants sur un élément, on obtient :

$$\begin{aligned} & \int_V [B]^t [M] [B] dV (u_{ne}) + \\ & + a_d \int_V \{N_{ne}\} \langle N_{ne} \rangle [(V_{xne}) \{V_{yne}\} (V_{zne})] [B] dV (u_{ne}) + \\ & + w \int_V \{N_{ne}\} \langle N_{ne} \rangle dV (\partial u_{ne} / \partial t) + f_v \int_V \{N_{ne}\} dV + f_s \int_S \{N_{ne}\} dS = 0 \quad (2.28) \end{aligned}$$

On définit $NV_j = \int_V N_j dV$ comme étant le volume d'influence du $j^{\text{ième}}$ point nodal,

et $NS_j = \int_S N_j dS$ comme étant la surface d'influence du $j^{\text{ième}}$ point nodal.

La relation (2.28) est déjà un système d'équations linéaires qui peut être écrit sous la forme très simple :

$$[DMAT] \{u_{ne}\} + [CMAT] \{u_{ne}\} + [PMAT] \{\partial u_{ne} / \partial t\} + \{f_{ne}\} = 0 \quad (2.29a)$$

$$\text{où } [DMAT] = \int_V [B]^t [M] [B] dV \quad (2.29b)$$

est une matrice carrée symétrique élémentaire de dimension $(n^e \times n^e)$ du terme conductif de l'équation gouvernant le transport. On l'appelle aussi matrice de "rigidité", ou de "conductivité thermique", etc...

$$[\text{CMAT}] = a_d \int_V \{N_{ne}\} \langle N_{ne} \rangle [\{V_{xne}\} \{V_{yne}\} \{V_{zne}\}] [B] dV \quad (2.29c)$$

est une matrice carrée non symétrique élémentaire de dimension $(n^e \times n^e)$ d'advection de l'équation gouvernant.

$$[\text{PMAT}] = w \int_V \{N_{ne}\} \langle N_{ne} \rangle dV \quad (2.29d)$$

est une matrice carrée symétrique élémentaire de dimension $(n^e \times n^e)$ du terme transitoire de l'équation gouvernant. On l'appelle aussi matrice "amortissement", ou "capacité thermique", etc...

$$\{f_{ne}\} = f_v NV_{ne} + f_s NS_{ne} \quad (2.29e)$$

est un vecteur élémentaire de dimension (n^e) , qui représente le total des termes de source/perte pour le domaine d'influence de chaque nœud. On l'appelle aussi le vecteur des "solllicitations".

Les matrices $[\text{DMAT}]$ et $[\text{PMAT}]$ dépendent uniquement de la géométrie des éléments, du tenseur des coefficients de conduction $[M]$ et du coefficient de capacité volumique (d'emménagement, calorifique) w . La matrice $[\text{CMAT}]$ dépend de la géométrie des éléments et de la vitesse de l'écoulement.

Dans un modèle 3-D, f_v est généralement nul et $\{f_{ne}\}$ devient le vecteur des débits nodaux (ponctuels ou distribués) aux limites. En résolvant le système linéaire (2.29), on obtient les valeurs nodales de la fonction $\{u_{ne}\}$. Le débit nodal $\{f_{ne}\}$ est calculé aux nœuds où la fonction $\{u_{ne}\}$ est prescrite.

Pour obtenir une expression numérique correcte des matrices $[\text{DMAT}]$, $[\text{CMAT}]$ et $[\text{PMAT}]$ et du vecteur $\{f_{ne}\}$, nous devons encore résoudre les problèmes suivants :

- calcul de la matrice des gradients $[B]$;
- intégration numérique sur des éléments à arêtes courbes ou distordues.

2.5 Calcul de la matrice des gradients $[B]$

dans le système global orthonormé le gradient de la fonction u^* est défini par :

$$\text{grad } u^* = \langle \mathbf{e}_1 \ \mathbf{e}_2 \ \mathbf{e}_3 \rangle \begin{Bmatrix} \frac{\partial u^*}{\partial x} \\ \frac{\partial u^*}{\partial y} \\ \frac{\partial u^*}{\partial z} \end{Bmatrix}$$

rappelons que $u^* = \langle N(\mathbf{s}) \rangle \{u_n^e\}$. On obtient :

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial u^*}{\partial x} \\ \frac{\partial u^*}{\partial y} \\ \frac{\partial u^*}{\partial z} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \left\langle \frac{\partial N(\mathbf{s})}{\partial x} \right\rangle \{u_n^e\} \\ \left\langle \frac{\partial N(\mathbf{s})}{\partial y} \right\rangle \{u_n^e\} \\ \left\langle \frac{\partial N(\mathbf{s})}{\partial z} \right\rangle \{u_n^e\} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \langle N_{n^e,x} \rangle \\ \langle N_{n^e,y} \rangle \\ \langle N_{n^e,z} \rangle \end{Bmatrix} \{u_n^e\} = [B] \{u_n^e\} \quad (2.30)$$

Le principal problème dans l'évaluation numérique de la matrice des gradients [B], est que les coefficients $N(\mathbf{s})$ sont uniquement fonctions des coordonnées locales \mathbf{s} , mais que nous devons effectuer des dérivées partielles par rapport aux coordonnées cartésiennes globales \mathbf{x} ! Pour surmonter cette difficulté nous utilisons la dérivation en chaîne pour calculer les dérivées en \mathbf{s} d'une fonction à partir de ses dérivées en \mathbf{x} :

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial s^1} \\ \frac{\partial}{\partial s^2} \\ \frac{\partial}{\partial s^3} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial x}{\partial s^1} & \frac{\partial y}{\partial s^1} & \frac{\partial z}{\partial s^1} \\ \frac{\partial x}{\partial s^2} & \frac{\partial y}{\partial s^2} & \frac{\partial z}{\partial s^2} \\ \frac{\partial x}{\partial s^3} & \frac{\partial y}{\partial s^3} & \frac{\partial z}{\partial s^3} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{Bmatrix} \quad (2.31a)$$

Ce que nous noterons :

$$\{\partial_s\} = [J] \{\partial_x\} \quad (2.31b)$$

$$\text{avec } [J] = \begin{Bmatrix} \frac{\partial x}{\partial s^1} & \frac{\partial y}{\partial s^1} & \frac{\partial z}{\partial s^1} \\ \frac{\partial x}{\partial s^2} & \frac{\partial y}{\partial s^2} & \frac{\partial z}{\partial s^2} \\ \frac{\partial x}{\partial s^3} & \frac{\partial y}{\partial s^3} & \frac{\partial z}{\partial s^3} \end{Bmatrix} \quad (2.31c)$$

où [J] est la matrice jacobienne de la transformation géométrique. Les termes de [J] s'obtiennent aisément par dérivation de (2.4). Ainsi, les dérivées en \mathbf{x}

de la fonction s'obtiennent, à partir de ses dérivées en \mathbf{s} , par simple inversion de la matrice jacobienne :

$$\{\partial_{\mathbf{x}}\} = [J]^{-1} \{\partial_{\mathbf{s}}\} \quad (2.32)$$

C'est la matrice $[J]^{-1}$ qui est utilisée en pratique puisque nous devons exprimer les dérivées de u^* en x, y, z à partir de dérivées de u^* en s^1, s^2, s^3 . Cependant, la transformation inverse de (2.4) n'est pas connue explicitement, nous calculerons donc $[J]^{-1}$ à partir des termes de $[J]$. Nous avons supposé la transformation \mathcal{T}^e bijective, par conséquent l'inverse de $[J]$ existe en tout point de l'élément de référence.

Les termes de $[J]$ sont obtenus par dérivation par rapport à \mathbf{s} de la relation (2.4) que nous réécrivons sous la forme :

$$\langle x \ y \ z \rangle = \langle N_{n^e}(\mathbf{s}) \rangle [\{x_{n^e}\} \{y_{n^e}\} \{z_{n^e}\}] \quad (2.33)$$

$\{x_{n^e}\}, \{y_{n^e}\}, \{z_{n^e}\}$ étant les coordonnées x, y et z des nœuds géométriques de l'élément. La matrice jacobienne s'écrit :

$$[J] = \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial s^1} \\ \frac{\partial}{\partial s^2} \\ \frac{\partial}{\partial s^3} \end{Bmatrix} \langle x \ y \ z \rangle = \begin{bmatrix} \langle N_{n^e,s^1} \rangle \\ \langle N_{n^e,s^2} \rangle \\ \langle N_{n^e,s^3} \rangle \end{bmatrix} [\{x_{n^e}\} \{y_{n^e}\} \{z_{n^e}\}] \quad (2.34)$$

Elle est donc le produit de deux matrices, l'une contenant des dérivées en \mathbf{s} des fonctions de transformation géométriques, et l'autre les coordonnées des n^e nœuds géométriques de l'élément.

La matrice des gradients $[B]$ peut donc s'écrire :

$$[B] = \begin{bmatrix} \langle N_{n^e,x} \rangle \\ \langle N_{n^e,y} \rangle \\ \langle N_{n^e,z} \rangle \end{bmatrix} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{Bmatrix} \langle N_{n^e}(\mathbf{s}) \rangle \quad (2.35)$$

En substituant l'équation (2.32) dans (2.35), on obtient :

$$[B] = [J]^{-1} \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial s^1} \\ \frac{\partial}{\partial s^2} \\ \frac{\partial}{\partial s^3} \end{Bmatrix} \langle N_{ne}(s) \rangle = [J]^{-1} \begin{Bmatrix} \langle N_{n^e,s^1} \rangle \\ \langle N_{n^e,s^2} \rangle \\ \langle N_{n^e,s^3} \rangle \end{Bmatrix} \quad (2.36)$$

La matrice des gradients [B] dépend uniquement de la géométrie des éléments !

Cette méthode marche bien lorsque le nombre de coordonnées locales indépendantes s est le même que celui des coordonnées cartésiennes x (e.g. des éléments 3-D dans un espace 3-D), c'est-à-dire lorsque [J] est une matrice carrée inversible.

Quand des éléments 1-D ou 2-D sont représentés dans un espace global 3-D, le nombre de coordonnées locales indépendantes s sera inférieur au nombre de coordonnées globales x , et la matrice de transformation jacobienne ne sera plus une matrice carrée inversible. L'équation (2.26) ne pourra alors pas être utilisée pour calculer la matrice des gradients [B]. Nous proposons une méthode plus générale (KIRALY, 1979, 1985) qui peut être appliquée à des éléments 1-D, 2-D et 3-D représentés dans un espace global 3-D.

Cette méthode est basée sur la représentation bien connue des gradients en coordonnées curvilignes (KLINGBELL, 1966; TEICHMANN, 1964). Elle est illustrée par la figure 2.4. Afin d'en faciliter la compréhension, nous exposerons cette méthode pour le cas d'un élément 2-D dans un espace 3-D. Son application à des éléments 1-D et 3-D dans l'espace 3-D s'en déduit sans problème.

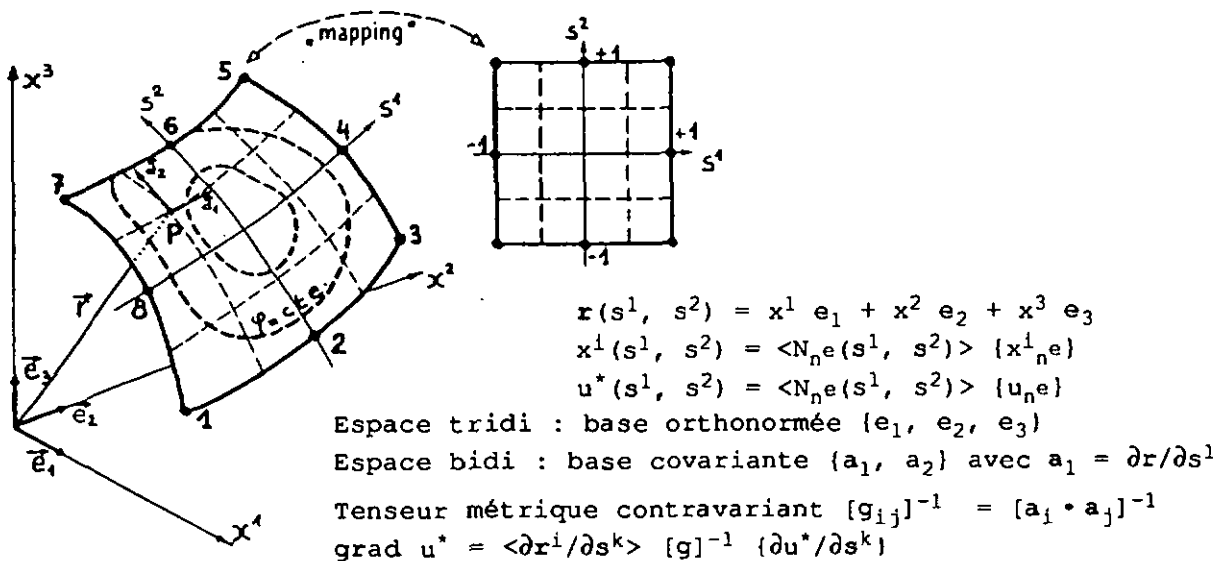


Figure 2.4 : Représentation des gradients en coordonnées curvilinaires, (de KIRALY, 1985)

Dans le système de coordonnées locales curvilignes, nous exprimons le vecteur gradient (à tout point a de l'élément) par les vecteurs de la base covariante $\{a\}$ et les composantes contravariantes du gradient, $\{JL\}$:

$$\text{grad } u^* = \langle a_1 \ a_2 \rangle \begin{Bmatrix} JL^1 \\ JL^2 \end{Bmatrix} \quad (2.37)$$

Notons que les vecteurs de la base covariante a_1 et a_2 sont tangents aux lignes des coordonnées curvilignes et que leurs orientations varient d'un point à un autre. Ils sont définis par :

$$\begin{Bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial r}{\partial s^1} \\ \frac{\partial r}{\partial s^2} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \left\langle \frac{\partial x}{\partial s^1} \ \frac{\partial y}{\partial s^1} \ \frac{\partial z}{\partial s^1} \right\rangle \\ \left\langle \frac{\partial x}{\partial s^2} \ \frac{\partial y}{\partial s^2} \ \frac{\partial z}{\partial s^2} \right\rangle \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \langle N_{n^e, s^1} \rangle \\ \langle N_{n^e, s^2} \rangle \end{Bmatrix} [(x_{ne}) \ (y_{ne}) \ (z_{ne})] \begin{Bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{Bmatrix} \quad (2.38)$$

Les vecteurs de la base covariante a_1 et a_2 sont non seulement calculés facilement par l'équation (2.38), mais encore exprimés directement dans le système global de coordonnées.

Les composantes contravariantes du gradient sont presque aussi faciles à obtenir :

$$\begin{Bmatrix} JL^1 \\ JL^2 \end{Bmatrix} = [g]^{-1} \begin{Bmatrix} \frac{\partial u^*}{\partial s^1} \\ \frac{\partial u^*}{\partial s^2} \end{Bmatrix} = [g]^{-1} \begin{Bmatrix} \langle N_{n^e, s^1} \rangle \\ \langle N_{n^e, s^2} \rangle \end{Bmatrix} (u_{ne}) \quad (2.39)$$

où $\frac{\partial u^*}{\partial s}$ sont les composantes covariantes du gradient. Puisque nous avons besoin des composantes contravariantes JL , nous devons multiplier $\frac{\partial u^*}{\partial s}$ par le tenseur métrique contravariant $[g]^{-1}$. La matrice carrée $[g]^{-1}$ est construite en utilisant les vecteurs de la base covariante :

$$[g] = \begin{bmatrix} a_1 \cdot a_1 & a_1 \cdot a_2 \\ a_2 \cdot a_1 & a_2 \cdot a_2 \end{bmatrix} \quad (2.40)$$

où $[g]$ est le tenseur métrique covariant (une matrice carrée symétrique, donc inversible). En remplaçant les valeurs de $\{a\}$ (équation (2.38)) et de $\{JL\}$ (équation (2.39)) dans l'équation (2.37), nous avons :

$$\mathbf{grad} u^* = \langle \mathbf{e}_1 \ \mathbf{e}_2 \ \mathbf{e}_3 \rangle \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial s^1} & \frac{\partial x}{\partial s^2} \\ \frac{\partial y}{\partial s^1} & \frac{\partial y}{\partial s^2} \\ \frac{\partial z}{\partial s^1} & \frac{\partial z}{\partial s^2} \end{bmatrix} [\mathbf{g}]^{-1} \begin{bmatrix} \langle N_{n,s,1}^e \rangle \\ \langle N_{n,s,2}^e \rangle \end{bmatrix} \{u_{ne}\} \quad (2.41)$$

La matrice des gradients [B] s'exprime comme suit :

$$[\mathbf{B}] = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial s^1} & \frac{\partial x}{\partial s^2} \\ \frac{\partial y}{\partial s^1} & \frac{\partial y}{\partial s^2} \\ \frac{\partial z}{\partial s^1} & \frac{\partial z}{\partial s^2} \end{bmatrix} [\mathbf{g}]^{-1} \begin{bmatrix} \langle N_{n,s,1}^e \rangle \\ \langle N_{n,s,2}^e \rangle \end{bmatrix} = [\mathbf{J}]^t [\mathbf{g}]^{-1} \begin{bmatrix} \langle N_{n,s,1}^e \rangle \\ \langle N_{n,s,2}^e \rangle \end{bmatrix} \quad (2.42)$$

où $[\mathbf{J}]^t$ est la matrice jacobienne transposée. Le seul travail supplémentaire à effectuer par rapport à l'équation (2.36) ("méthode standard") est le calcul de $[\mathbf{g}]$ et $[\mathbf{g}]^{-1}$. Mais ce travail est largement compensé par le gain sur la généralisation du calcul du gradient. Pour l'élément à 8 nœuds de la figure 2.3, la matrice des gradients [B] est :

$$[\mathbf{B}]_{3 \times 8} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial s^1} & \frac{\partial x}{\partial s^2} \\ \frac{\partial y}{\partial s^1} & \frac{\partial y}{\partial s^2} \\ \frac{\partial z}{\partial s^1} & \frac{\partial z}{\partial s^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial s^1} & \frac{\partial N_2}{\partial s^1} & \dots & \frac{\partial N_8}{\partial s^1} \\ \frac{\partial N_1}{\partial s^2} & \frac{\partial N_2}{\partial s^2} & \dots & \frac{\partial N_8}{\partial s^2} \end{bmatrix}$$

$$\text{avec } g_{11} = \left(\frac{\partial x}{\partial s^1}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial s^1}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial s^1}\right)^2$$

$$g_{22} = \left(\frac{\partial x}{\partial s^2}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial s^2}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial s^2}\right)^2$$

$$g_{12} = g_{21} = \frac{\partial x}{\partial s^1} \frac{\partial x}{\partial s^2} + \frac{\partial y}{\partial s^1} \frac{\partial y}{\partial s^2} + \frac{\partial z}{\partial s^1} \frac{\partial z}{\partial s^2}$$

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial s^1} & \frac{\partial x}{\partial s^2} \\ \frac{\partial y}{\partial s^1} & \frac{\partial y}{\partial s^2} \\ \frac{\partial z}{\partial s^1} & \frac{\partial z}{\partial s^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_8 \\ y_1 & y_2 & \dots & y_8 \\ z_1 & z_2 & \dots & z_8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial s^1} & \frac{\partial N_1}{\partial s^2} \\ \frac{\partial N_2}{\partial s^1} & \frac{\partial N_2}{\partial s^2} \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \frac{\partial N_8}{\partial s^1} & \frac{\partial N_8}{\partial s^2} \end{bmatrix}$$

De nouveau, la valeur numérique de [B] peut être calculée à tout point a d'un élément si l'on connaît les dérivées $\partial N/\partial s$ et les coordonnées globales $\{x_{ne}\}$ des points nodaux (i.e. la géométrie des éléments).

Dès que la valeur de la matrice des gradients est déterminée nous pouvons évaluer les expressions des matrices [DMAT] et [CMAT] de l'équation (2.29). Notre prochain problème est d'effectuer les intégrales sur les éléments curvilignes.

2.6 Intégration numérique sur des éléments curvilignes

Les expressions (2.29b), (2.29c), (2.29d) et (2.29e) doivent être intégrées sur des éléments réels curvilignes distordus. Puisque les bornes d'intégration seraient trop compliquées si elles étaient exprimées en coordonnées cartésiennes \mathbf{x} , les intégrales seront calculées dans le système des coordonnées locales. Dans ce système, non seulement les arêtes ou les faces des éléments sont parallèles aux lignes des coordonnées ou surfaces de coordonnées locales, mais encore les bornes d'intégration sont simplement (-1 et +1) ou (0 et +1).

Si nous intégrons dans le système local, les quantités infinitésimales dL (longueur pour un élément 1-D), dS (surface pour un élément 2-D) et dV (volume pour un élément 3-D) doivent être exprimées par le tenseur métrique covariant $[g]$, donné par l'équation (2.40) (ou les vecteurs de la base covariante $\{\mathbf{a}\}$ donnés par l'équation (2.38)) et les différentielles ds des coordonnées locales contravariantes. En gardant à l'esprit que tous les éléments 1-D, 2-D et 3-D sont représentés dans un espace global 3-D, nous avons :

$$\text{élément 1-D :} \quad dL = (\det([g]))^{1/2} ds^1 \quad (\text{ou : } |\mathbf{a}_1| ds^1)$$

$$\text{élément 2-D :} \quad dS = (\det([g]))^{1/2} ds^1 ds^2 \quad (\text{ou : } |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2| ds^1 ds^2)$$

$$\text{élément 3-D :} \quad dV = (\det([g]))^{1/2} ds^1 ds^2 ds^3$$

$$(\text{ou : } |(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3| ds^1 ds^2 ds^3)$$

$$(\text{ou : } \det([J]) ds^1 ds^2 ds^3)$$

avec $[J]$ étant la matrice jacobienne donnée par l'équation (2.31c). Lorsque le nombre de coordonnées locales \mathbf{s} est le même que le nombre de coordonnées globales \mathbf{x} , le déterminant de la matrice jacobienne $[J]$ peut être utilisé pour exprimer dV . Cependant l'utilisation du tenseur métrique $[g]$ nous permet d'écrire une expression beaucoup plus générale pour les intégrales dans le système de coordonnées locales :

$$[DMAT] = \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} [B]^t [M] [B] (\det([g]))^{1/2} ds^1 ds^2 ds^3 \quad (2.43)$$

$$[CMAT] = \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \{N_{ne}\} \langle N_{ne} \rangle \{V_{xne} \} \{V_{yne} \} \{V_{zne} \} [B] (\det([g]))^{1/2} ds^1 ds^2 ds^3 \quad (2.44)$$

$$[PMAT] = w \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \{N_{ne}\} \langle N_{ne} \rangle (\det([g]))^{1/2} ds^1 ds^2 ds^3 \quad (2.45)$$

$$\{f_{ne}\} = f_v \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \{N_{ne}\} (\det([g]))^{1/2} ds^1 ds^2 ds^3 + \\ + f_s \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \{N_{ne}\} (\det([g]))^{1/2} ds^1 ds^2 \quad (2.46)$$

Les intégrales simples, doubles et triples seront appliquées à des éléments 1-D, 2-D et 3-D en dépit du fait que tous les éléments sont représentés dans un espace global 3-D.

Alors que les bornes d'intégration sont simples, les formes explicites des intégrands ne le sont pas. A l'exception des éléments les plus simples (triangles ou tétraèdres arêtes rectilignes), l'intégration algébrique défie notre habileté mathématique et nous devons faire recours à l'intégration numérique.

Ceci n'est pas une sévère pénalité et représente l'avantage que des programmes généraux, non liés à un élément particulier, peuvent être écrits pour diverses classes de problèmes. On trouve des détails sur la technique d'intégration numérique dans ZIENCKIEWICZ (1971), DHATT et TOUZOT (1984), BIBBY (1979), et dans tous les ouvrages standard d'analyse numérique (SCHEID, 1968).

Dans TRANS3 nous appliquons la très populaire méthode d'intégration de GAUSS-LEGENDRE. Cette méthode pourrait mieux être expliquée en considérant l'intégrale d'une fonction $G(s)$ quelconque sur un domaine unidimensionnel :

$$I = \int_{-1}^{+1} G(s) ds \quad (2.47)$$

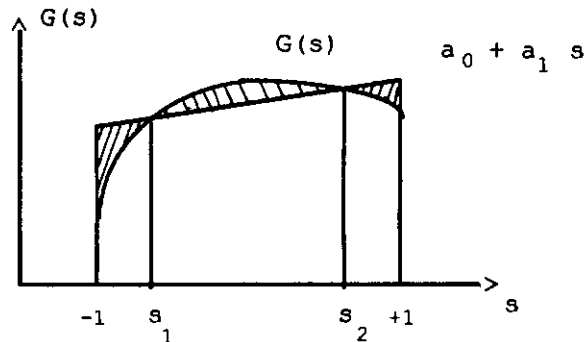
Si on approxime $G(s)$ par l'équation d'une droite :

$$G(s) = a_0 + a_1 s \quad (2.48)$$

on peut trouver des coefficients a_0 et a_1 de sorte que :

$$I = \int_{-1}^{+1} a_0 + a_1 s ds = \int_{-1}^{+1} G(s) ds \quad (2.49)$$

l'équation (2.49) signifie que les surfaces hachurées au-dessus et en-dessous de la droite du diagramme ci-après sont égales. On pourrait donc évaluer l'intégrale (2.47) par un "calcul numérique" de $G(s)$ aux deux points discrets de coordonnées s_1 et s_2 , appelés "points d'intégration" ou "points de Gauss", et ensuite par une somme pondérée de ces deux valeurs :



$$\int_{-1}^{+1} G(s) ds = \sum_{i=1}^2 W_i G(s_i) \quad (2.50)$$

où W_i est le coefficient de pondération du $i^{\text{ème}}$ point d'intégration. On peut montrer que $s_1 = -1/\sqrt{3}$, $s_2 = 1/\sqrt{3}$, $W_1 = W_2 = 1$ donnent la valeur exacte de l'intégrale I . Ceci est la formule de quadrature de Gauss pour 2 points et elle est exacte pour tout polynôme de degré inférieur ou égal à 3.

2.6.1 Intégration numérique sur des domaines rectangulaires ou prismatiques

Si le nombre de points de Gauss est n_i dans l'intervalle $[-1, +1]$, le résultat sera "exact" pour tout polynôme de degré inférieur ou égal à $(2n_i - 1)$. L'erreur est alors de l'ordre de $O(\Delta^{2n})$, où Δ représente la distance entre deux points. Ainsi avec deux points de Gauss on peut intégrer un polynôme jusqu'au degré 3 et avec 3 points de Gauss, jusqu'au degré 5. Dans TRANS3 nous utilisons 3 points de Gauss dans chaque direction de coordonnée locale.

La méthode la plus simple pour calculer une intégrale double de la forme :

$$I = \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} G(s^1, s^2) ds^1 ds^2 \quad (2.51)$$

consiste à évaluer d'abord la première intégrale en supposant s^2 constant, soit :

$$\int_{-1}^{+1} G(s^1, s^2) ds^1 = \sum_{j=1}^n W_j G(s_j^1, s^2) = H(s^2) \quad (2.52)$$

où n est le nombre de points de Gauss.

En calculant ensuite, de la même manière, la seconde intégrale, on a :

$$\begin{aligned} I &= \int_{-1}^{+1} H(s^2) ds^2 = \sum_{i=1}^n W_i H(s_i^2) \\ &= \sum_{i=1}^n W_i \sum_{j=1}^n W_j G(s_j^1, s_i^2) \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n W_i W_j G(s_j^1, s_i^2) \end{aligned} \quad (2.53)$$

De même, pour un prisme droit, nous obtenons :

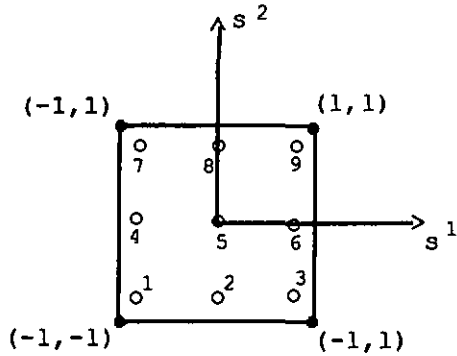
$$\begin{aligned} I &= \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} G(s^1, s^2, s^3) ds^1 ds^2 ds^3 \\ &= \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n W_i W_j W_k G(s_i^1, s_j^2, s_k^3) \end{aligned} \quad (2.54)$$

Il est intéressant de remarquer que la sommation multiple peut être, en fait, interprétée comme une sommation simple portant sur n^2 points pour un carré et n^3 points pour un cube. Nous présentons les neuf points d'échantillonnage qui conduisent à l'intégration exacte de polynômes jusqu'au degré 5 dans chaque direction. Les coordonnées locales des points de Gauss et leurs coefficients de pondération dans chaque direction sont donc :

$$s_1 = - (3/5)^{1/2} \quad W_1 = 5/9$$

$$s_2 = 0.0 \quad w_2 = 8/9$$

$$s_3 = + (3/5)^{1/2} \quad w_3 = 5/9$$

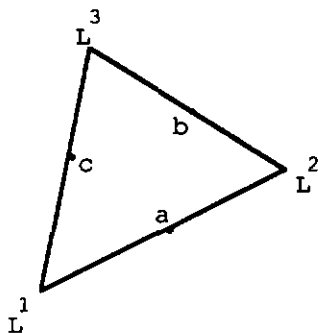


2.6.2 Intégration numérique sur des domaines triangulaires et tétraédriques

Sur des domaines triangulaires les intégrales s'expriment, en fonction des coordonnées d'aire, sous la forme :

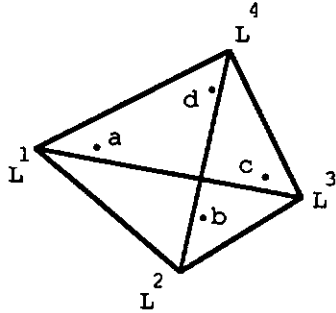
$$I = \int_0^1 \int_0^{1-L^1} G(L^1 L^2 L^3) dL^1 dL^2 \quad (2.55)$$

On pourrait de nouveau utiliser n points de Gauss et parvenir à une sommation de même type que celles définies au paragraphe précédent. Cependant, les bornes d'intégration font maintenant intervenir la variable elle-même et il est commode de choisir une autre distribution des points pour la seconde intégrale. On a recours à une expression de la formule de Gauss dans laquelle W est une fonction linéaire. Il est malgré tout nettement préférable (et aussi plus élégant) d'employer des formules spéciales dans lesquelles aucune des coordonnées naturelles L^i ne joue un rôle particulier. Par exemple pour l'intégration exacte de polynômes jusqu'au degré 3, on a les points de Gauss et les coefficients de pondération suivants :



triangle à 3 points de Gauss

	L^1	L^2	L^3	W	
a	1/2	1/2	0	1/3	
b	0	1/2	1/2	1/3	$R = O(\Delta^3)$
c	1/2	0	1/2	1/3	



tétraèdre à 4 points de Gauss

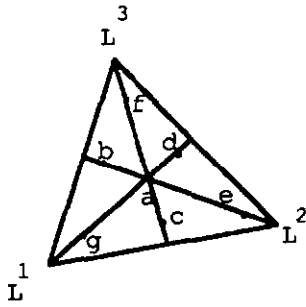
	L^1	L^2	L^3	L^4	W	
a	α	β	β	β	1/4	
b	β	α	β	β	1/4	
c	β	β	α	β	1/4	$R = O(\Delta^3)$
d	β	β	β	α	1/4	

$$\alpha = 0.585\ 410\ 20$$

$$\beta = 0.138\ 196\ 60$$

où R est l'ordre de l'erreur.

Dans TRANS3 nous effectuons, pour les triangles et tétraèdres aussi, des intégrations exactes jusqu'au degré 5. Pour cela nous utilisons 7 points de Gauss pour un triangle et 15 points pour un tétraèdre. Les coordonnées de ces points d'intégration sont définies en coordonnées de surface ou de volume. L'erreur est alors de l'ordre de $O(\Delta^6)$, où Δ représente la distance entre deux points. nous présentons les 7 points d'échantillonnage qui conduisent à l'intégration exacte de polynômes jusqu'au degré 5 sur un triangle.



triangle à 7 points de Gauss

	L^1	L^2	L^3	w
a	1/3	1/3	1/3	0.22500 00000
b	α_1	β_1	β_1) 0.13239 41527
c	β_1	α_1	β_1	
d	β_1	β_1	α_1	
e	α_2	β_2	β_2) 0.12593 91805
f	β_2	α_2	β_2	
g	β_2	β_2	α_2	

avec $\alpha_1 = 0.05971\ 58717$ $\alpha_2 = 0.79742\ 69853$
 $\beta_1 = 0.47014\ 20641$ $\beta_2 = 0.10128\ 65073$

2.6.3 conclusion

Ainsi, nous obtenons les matrices élémentaires [DMAT], [CMAT], [PMAT] et $\{f_{n,e}\}$ par calcul des valeurs numériques des intégrants dans les équations (2.29b) à (2.29e) à chaque point d'intégration et ensuite en formant la somme pondérée de ces valeurs numériques pour tous les points de Gauss d'un élément. Dès que les matrices élémentaires sont évaluées, nous pouvons former l'équation (2.29a).

Ecrive sous une autre forme, on aura :

$$(DMAT_{ij} + CMAT_{ij}) u_j + PMAT_{ij} \partial u_j / \partial t + f_j = 0 \quad (2.56)$$

S'il y a n^e points nodaux dans un élément, il y aura n^e équations linéaires formées. Chacune d'entre elles représente l'équation de continuité pondérée (2.6), intégrée sur le domaine d'influence (longueur, surface ou volume) du point nodal d'un élément donnée. Puisque la plupart des point nodaux sont communs à plusieurs éléments, l'équation complète du $j^{i\text{ème}}$ nœud doit contenir la somme de toutes les contributions élémentaires possibles. En additionnant les contributions élémentaires à chaque équation nous obtenons, finalement, le système de N équations linéaires à N inconnues (2.57), qui représente la formulation par éléments finis de l'équation (2.6) sur tout le domaine à l'étude :

$$\left[\sum_{LM=1}^{NLM} [DMAT]^{LM} + [CMAT]^{LM} \right] \{u_N\} + \left[\sum_{LM=1}^{NLM} [PMAT]^{LM} \right] \{\partial u_N / \partial t\} = \left[\sum_{LM=1}^{NLM} \{f_{ne}\}^{LM} \right] \quad (2.57)$$

où N est le nombre total de nœuds du domaine complet;
 NLM est le nombre d'éléments du domaine entier.

L'équation (2.57) est un système non stationnaire. Il nous reste encore à discrétiser le terme transitoire avant de résoudre le système d'équations linéaires.

2.7 Résolution du système non stationnaire

L'équation (2.57) est un système d'équation différentielles en temps t , du premier ordre, que nous pouvons réécrire sous la forme :

$$[K(t)] \{u(t)\} + [C] \{\partial u(t) / \partial t\} = \{F(t)\} \quad \text{pour } t > t_0 \quad (2.58a)$$

avec $\{u(t_0)\} = \{u_0\}$ pour $t = t_0$ (conditions initiales)
 $\{u(\mathbf{x}, t)\} = \{u_s(t)\}$ sur S_1 (conditions aux limites)

$$\text{où } [K(t)] = \left[\sum_{LM=1}^{NLM} [DMAT]^{LM} + [CMAT(t)]^{LM} \right] \quad (2.58b)$$

$$[C] = \left[\sum_{LM=1}^{NLM} [PMAT]^{LM} \right] \quad (2.58c)$$

$$\{F(t)\} = \left[\sum_{LM=1}^{NLM} \{f_{ne}(t)\}^{LM} \right] \quad (2.58d)$$

$[DMAT]$ est la matrice de rigidité ou de conductivité thermique ou chimique;

$[CMAT]$ est la matrice d'advection, qui dépend du temps à cause du terme de vitesse;

$[C]$ est la matrice amortissement ou de capacité thermique;

$\{F\}$ est le vecteur des sollicitations;

$\{u\}$ est le vecteur solution cherché.

Dans un système linéaire, $[K]$, $[C]$ et $\{F\}$ sont indépendants de $\{u\}$ et de ses dérivées. Résoudre le système (2.58a) consiste à trouver un ensemble de fonctions $\{u(t)\}$ qui satisfont (2.58a) à tout instant t ainsi que les conditions initiales imposées à $t = t_0$. Nous présentons ici une méthode directe, celle d'Euler.

Les méthodes d'intégration directes consistent à construire numériquement à partir de $\{u_0\}$, une suite de valeurs de la solution aux instants successifs $t_0 + \Delta t$, $t_0 + 2\Delta t$, ..., $t_0 + n\Delta t$.

$$\{u_{t_0}\} \rightarrow \{u_{t_0 + \Delta t}\} \rightarrow \{u_{t_0 + 2\Delta t}\} \rightarrow \dots \rightarrow \{u_{t_0 + n\Delta t}\} \quad (2.59)$$

Ces méthodes utilisent des approximations des dérivées $\{\partial u / \partial t\}$ de type différences finies. Comme c'est le cas pour la méthode d'Euler.

Il est également possible d'utiliser une approximation par éléments finis pour discrétiser l'équation différentielle en t , ZIENCKIEWICZ, 1977.

2.7.1 Méthode d'Euler

Le système différentiel du premier ordre qui nous intéresse peut être écrit sous la forme :

$$\{\partial u / \partial t\} = [C]^{-1} (\{F_t\} - [K] \{u_t\}) \quad \text{pour } t > t_0 \quad (2.60)$$

$$\{u_{t_0}\} = \{u_0\}$$

Discretisons $\{\partial u_t / \partial t\}$ par la formule de différences finies :

$$\{\partial u_t / \partial t\} \approx 1/\Delta t (\{u_{t+\Delta t}\} - \{u_t\}) \quad (2.61)$$

Cette méthode consiste à écrire (2.60) à l'instant $t + \alpha \Delta t$, avec $0 \leq \alpha \leq 1$. La formule d'Euler est alors :

$$\begin{aligned} 1/\Delta t (\{u_{t+\Delta t}\} - \{u_t\}) &= [C]^{-1} (\{\alpha \{F_{t+\Delta t}\} + (1-\alpha) \{F_t\}\} - \\ &\quad - [K] (\{\alpha \{u_{t+\Delta t}\} + (1-\alpha) \{u_t\}\})) \end{aligned} \quad (2.62)$$

$$\begin{aligned} \{u_{t+\Delta t}\} &= \{u_t\} + \Delta t [C]^{-1} (\{\alpha \{F_{t+\Delta t}\} + (1-\alpha) \{F_t\}\} - \\ &\quad - [K] (\{\alpha \{u_{t+\Delta t}\} + (1-\alpha) \{u_t\}\})) \end{aligned} \quad (2.63)$$

Nous retrouvons la méthode d'Euler explicite lorsque $\alpha = 0$, équation (2.64), et la méthode implicite lorsque $\alpha = 1$, équation (2.65):

- pour $\alpha = 0$, (2.63) devient :

$$\{u_{t+\Delta t}\} = \{u_t\} + \Delta t [C]^{-1} (\{F_t\} - [K] \{u_t\}) \quad (2.64)$$

Cette formule de récurrence est dite explicite car le deuxième terme de droite de l'égalité ne fait pas intervenir l'inconnue $\{u_{t+\Delta t}\}$. Nous obtenons donc ainsi une expression explicite de $\{u_{t+\Delta t}\}$ en fonction de $\{u_t\}$ qui permet de construire successivement les termes de (2.59).

- pour $\alpha = 1$, (2.63) devient :

$$\{u_{t+\Delta t}\} = \{u_t\} + \Delta t [C]^{-1} (\{F_{t+\Delta t}\} - [K] \{u_{t+\Delta t}\}) \quad (2.65)$$

Dans ce cas le deuxième terme de droite de l'égalité fait intervenir le vecteur inconnu $\{u_{t+\Delta t}\}$. C'est pourquoi cette formule de récurrence est dite implicite.

2.7.2 Stabilité de la méthode d'Euler

L'expression (2.62) peut se mettre sous la forme :

$$\{u_{t+\Delta t}\} = [B] (\alpha \{F_{t+\Delta t}\} + (1-\alpha) \{F_t\}) + [A] \{u_t\} \quad (2.66a)$$

$$[B] = [K^*]^{-1} \quad (2.66b)$$

$$[A] = [K^*]^{-1} ([C]^{-1} - (1-\alpha) \Delta t [K]) \quad (2.66c)$$

$$[K^*] = [C] + \alpha \Delta t [K] \quad (2.66d)$$

Cet algorithme n'est stable que si Δt est inférieur à une valeur critique Δt_c . Pour que $\{u_{t_0+n\Delta t}\}$ soit borné lorsque n tend vers l'infini, il faut que le rayon spectral $\rho(A)$ de la matrice A soit inférieur ou égal à un. Le rayon spectral est défini par :

$$\rho(A) = \max |\lambda_i| \leq 1 \quad (2.67)$$

où les λ_i sont les valeurs propres de $[A]$. Si les l_i sont les valeurs propres de $[C]^{-1} [K]$, alors les valeurs propres λ_i sont :

$$\lambda_i = (1 - 2\alpha) \Delta t l_i - 1 \quad (2.68)$$

La condition de stabilité s'écrit finalement, en supposant $[C]$ et $[K]$ définies positives, ($l_i > 0$) :

$$(1 - 2\alpha) \Delta t l_{\max} \leq 2 \quad (2.69)$$

où l_{\max} est la plus grande des valeurs propres de $[C]^{-1} [K]$. La valeur critique Δt_c à ne pas dépasser pour assurer la stabilité est :

$$\Delta t \leq 2/(1 - 2\alpha) l_{\max} \equiv \Delta t_c \quad (2.70)$$

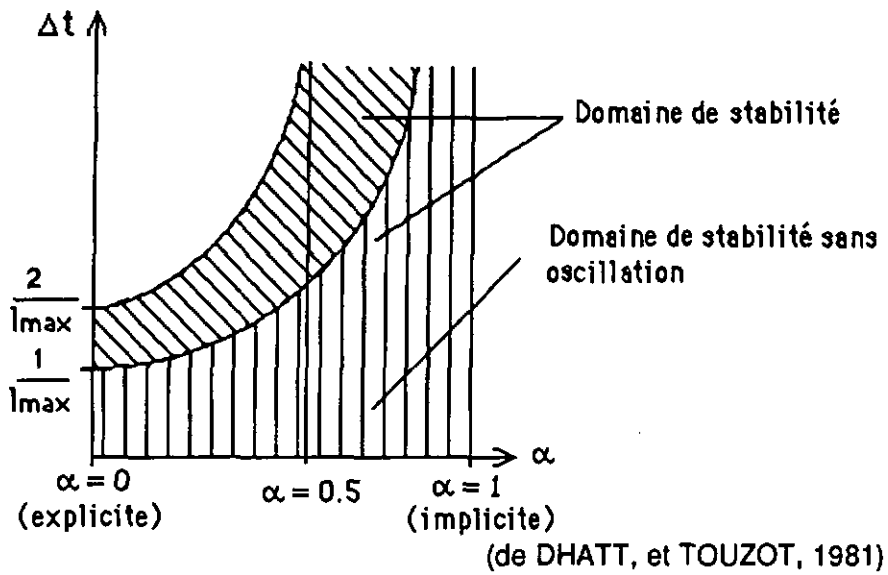
Le domaine de stabilité sans oscillation est défini par :

$$(1 - \alpha) \Delta t l_{\max} < 1 \quad (2.71)$$

ou encore :

$$\Delta t l_{\max} < 1/(1 - \alpha) l_{\max} \quad (2.72)$$

La condition de stabilité (équation (2.69)) est toujours vérifiée lorsque $\alpha \geq 0.5$. Les domaines de stabilité (équation (2.70)) et de stabilité sans oscillation (équation (2.72)) peuvent être représentés sous forme graphique :



2.7.3 Méthode de Crank-Nicholson

Lorsque $\alpha = 0.5$ nous obtenons une stabilité inconditionnelle. Ceci donne un algorithme très utilisé, appelé algorithme de Crank-Nicholson. En substituant $\alpha = 1/2$ dans l'équation (2.63), on obtient :

$$\{u_{t+\Delta t}\} = \{u_t\} + \Delta t [C]^{-1} (1/2 \{F_{t+\Delta t} + F_t\} - [K] 1/2 \{u_{t+\Delta t} + u_t\}) \quad (2.73)$$

L'équation (2.73) peut être réorganisée pour remplacer l'inversion de [C] par des résolutions successives de systèmes linéaires :

$$[C] \{u_{t+\Delta t} - u_t\} = \Delta t 1/2 \{F_{t+\Delta t} + F_t\} - \Delta t [K] 1/2 \{u_{t+\Delta t} + u_t\} \quad (2.74)$$

Posons :

$$\{u_{t+\Delta t/2}\} = 1/2 \{u_{t+\Delta t} + u_t\} \quad (2.75)$$

$$\{F_{t+\Delta t/2}\} = 1/2 \{F_{t+\Delta t} + F_t\} \quad (2.76)$$

L'équation (2.74) peut s'écrire en tenant compte de (2.75) et (2.76) :

$$[C] \{u_{t+\Delta t} - u_t\} = \Delta t \{F_{t+\Delta t/2}\} - \Delta t [K] \{u_{t+\Delta t/2}\} \quad (2.77)$$

En divisant par 2 de part et d'autre de l'égalité et en modifiant le terme de droite, on obtient :

$$[C] \{1/2(u_{t+\Delta t} + u_t) - u_t\} = \Delta t/2 \{F_{t+\Delta t/2}\} - \Delta t/2 [K] \{u_{t+\Delta t/2}\} \quad (2.78)$$

ou encore :

$$[\Delta t/2 [K] + [C]] \{u_{t+\Delta t/2}\} = [C] \{u_t\} + \Delta t/2 \{F_{t+\Delta t/2}\} \quad (2.79)$$

ou plus simplement :

$$[A] \{x\} = \{F\} \quad (2.80)$$

$$\text{où } [A] = \Delta t/2 [K] + [C] \quad (2.81)$$

$$\{x\} = \{u_{t+\Delta t/2}\} \quad (2.82)$$

$$\{F\} = [C] \{u_t\} + \Delta t/2 \{F_{t+\Delta t/2}\} \quad (2.83)$$

La méthode de résolution du système d'équation (2.80) peut se résumer comme suit :

1. Au temps $t = t_0$ on évalue la condition initiale $[C] \{u_{t_0}\}$ que l'on ajoute aux termes de source/perte $\{F\}$, et $[CMAT(t_0)]$ que l'on inclus dans $[A]$.
2. On évalue la partie de $\Delta t/2 \{F_{t_0+\Delta t/2}\}$ qui correspond aux alimentations distribuées que l'on ajoute encore à $\{F\}$.
3. On résoud le système d'équation (2.80) par la méthode frontale (voir chapitre suivant), et on obtient des vecteurs $\{x\}$ et $\{F\}$.
4. On calcule $\{u_{t_0+\Delta t}\} = 2 \{x\} - \{u_{t_0}\}$
 $\{F_{t_0+\Delta t}\} = 2/\Delta t (2 \{F\} - \{F_{t_0}\})$
5. on pose $\{u_{t_1}\} = \{u_{t_0+\Delta t}\}$
 $\{F_{t_1}\} = \{F_{t_0+\Delta t}\}$
6. au temps $t = t_1$, on évalue $[C] \{u_{t_1}\}$ et $\Delta t/2 \{F_{t_1+\Delta t/2}\}$ que l'on place dans le vecteur $\{F\}$ et $[CMAT(t_1)]$ que l'on inclus dans $[A]$.
7. On résoud le système d'équations (2.80) et on obtient les vecteurs $\{x\}$ et $\{F\}$.
8. On calcule $\{u_{t_1+\Delta t}\} = 2 \{x\} - \{u_{t_1}\} = \{u_{t_0+2\Delta t}\}$
 $\{F_{t_1+\Delta t}\} = 2/\Delta t (2 \{F\} - \{F_{t_1}\}) = \{F_{t_0+2\Delta t}\}$
9. on pose $\{u_{t_2}\} = \{u_{t_1+\Delta t}\}$
 $\{F_{t_2}\} = \{F_{t_1+\Delta t}\}$

Ainsi de suite jusqu'à l'obtention du dernier terme de la récurrence $\{u_{t_0+n\Delta t}\}$. Le calcul de $[CMAT]$ au début de chaque pas de temps est lié au fait que le champ de vitesse évolue dans le temps. cette évolution n'étant pas forcément aussi fréquente que le nombre de pas de temps, le calcul des vitesses se fera à des moments dictés par l'utilisateur du logiciel TRANS3.

La méthode de calcul du champ des vitesses à partir des valeurs nodales du potentiel est abordé dans le prochain paragraphe.

La résolution proprement dite du système d'équations (2.80) pour chaque pas de temps est abordée dans le prochain chapitre traitant de la résolution frontale.

2.8 Calcul des vitesses nodales

Utilisant la loi de Darcy, les composantes de la vitesse dans la direction principale de l'écoulement peuvent s'écrire :

$$v_x = - K_{xx} \partial h / \partial x \quad (2.84a)$$

$$v_y = - K_{yy} \partial h / \partial y \quad (2.84b)$$

$$V_z = - K_{zz} \partial h / \partial z \quad (2.84c)$$

où V_x , V_y et V_z sont les flux de Darcy dans les directions x , y et z ;
 h est la charge hydraulique;
 K_{xx} , K_{yy} et K_{zz} sont les composantes principales du tenseur des perméabilités.

Pour obtenir des fonctions de vitesse continues sur les éléments et aux nœuds, nous utilisons la formulation par éléments finis de Galerkin des équations (2.84a), (2.84b) et (2.84c). Ce concept a été utilisé par HADJI-DJAFARI et WIGGERT (1976), MARIÑO (1977, 1978), et MARIÑO et MATANGA (1978). Les solutions approchées h^* de la charge hydraulique et V_x^* , V_y^* , V_z^* du vecteur vitesse sur un élément à n^e nœuds, s'écrivent :

$$h^*(s, t) = \langle N_{ne}(s) \rangle \{h_{ne}(t)\} \quad (2.85a)$$

$$V_x^*(s, t) = \langle N_{ne}(s) \rangle \{V_{xne}(t)\} \quad (2.85b)$$

$$V_y^*(s, t) = \langle N_{ne}(s) \rangle \{V_{yne}(t)\} \quad (2.85c)$$

$$V_z^*(s, t) = \langle N_{ne}(s) \rangle \{V_{zne}(t)\} \quad (2.85d)$$

où $\{h_{ne}(t)\}$, $\{V_{xne}(t)\}$, $\{V_{yne}(t)\}$ et $\{V_{zne}(t)\}$ sont les valeurs nodales, dépendantes du temps, de la charge hydraulique (connue) et des vecteurs vitesse (à calculer); $\langle N_{ne}(s) \rangle$ sont les fonctions d'interpolation nodales en coordonnées locales.

Soit l'opérateur différentiel \mathbf{L} défini par la relation suivante :

$$\mathbf{L} (V_x, h) = V_x + K_{xx} \partial h / \partial x = 0 \quad (2.86)$$

On pose que les résidus résultant des substitutions des équations (2.85) dans l'équation (2.86) sont orthogonaux aux fonctions d'interpolation N . Ce qui donne la forme intégrale de la méthode des résidus pondérés de Galerkin :

$$\int_V N_j \mathbf{L} (V_x^*, h^*) dV = 0 \quad j = 1, 2, \dots, n^e \quad (2.87a)$$

$$\int_V N_j \mathbf{L} (V_y^*, h^*) dV = 0 \quad j = 1, 2, \dots, n^e \quad (2.87b)$$

$$\int_V N_j \mathbf{L} (V_z^*, h^*) dV = 0 \quad j = 1, 2, \dots, n^e \quad (2.87c)$$

En transformant les équations (2.87) et en additionnant les contributions élémentaires à chaque équation, nous obtenons les trois systèmes d'équations :

$$[P] \{V_{xn}\} = \{E_{xn}\} \quad (2.88a)$$

$$[P] \{V_{yn}\} = \{E_{yn}\} \quad (2.88b)$$

$$[P] \{V_{zn}\} = \{E_{zn}\} \quad (2.88c)$$

où n est le nombre total de nœuds dans le domaine étudié;

$$[P] = \sum_{LM=1}^{NLM} \int_V \{N_{ne}\} \langle N_{ne} \rangle dV \quad (2.89a)$$

$$\{E_{xn}\} = - \sum_{LM=1}^{NLM} \int_V K_{xx} \{N_{ne}\} \langle N_{,x} \rangle dV \{h_n(t)\} \quad (2.89b)$$

$$\{E_{yn}\} = - \sum_{LM=1}^{NLM} \int_V K_{yy} \{N_{ne}\} \langle N_{,y} \rangle dV \{h_n(t)\} \quad (2.89c)$$

$$\{E_{zn}\} = - \sum_{LM=1}^{NLM} \int_V K_{zz} \{N_{ne}\} \langle N_{,z} \rangle dV \{h_n(t)\} \quad (2.89d)$$

avec $\langle N_{,x} \rangle$, $\langle N_{,y} \rangle$, $\langle N_{,z} \rangle$ sont les dérivées des fonctions d'interpolation par rapport à x , y et z , respectivement, (voir paragraphe 2.5).

Les intégrales dans les équations (2.89) s'effectuent par intégration numérique (voir paragraphe 2.6).

Les systèmes d'équations (2.88) sont de la même forme que l'équation (2.80) :

$$[A] \{x\} = \{F\} \quad (2.90)$$

où $[A] = [P]$

$$\{x\} = \{V_{xn}\}, \{x\} = \{V_{yn}\} \text{ ou } \{x\} = \{V_{zn}\}$$

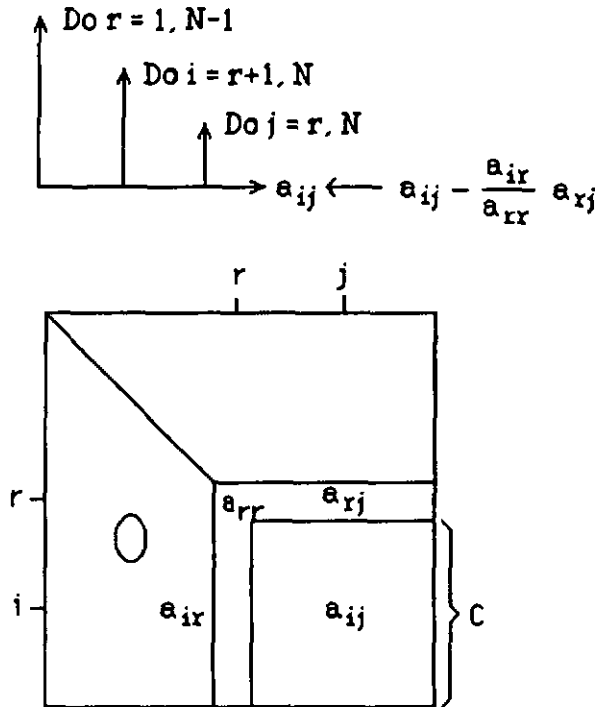
$$\{F\} = \{E_{xn}\}, \{F\} = \{E_{yn}\} \text{ ou } \{F\} = \{E_{zn}\}$$

Ces systèmes sont aussi résolus par la méthode frontale, (voir chapitre suivant).

3. Algorithme FRONT

3.1. Idée principale de l'élimination de Gauss

Soit A, une matrice NxN qui admet l'algorithme d'élimination de Gauss simple. L'algorithme de Gauss transforme cette matrice en une matrice triangulaire supérieure. Il comprend N-1 pas. Cet algorithme s'écrit:



Plaçons-nous au début du $r^{\text{ième}}$ pas d'élimination. La figure représente la matrice à ce moment-là. Pour ce $r^{\text{ième}}$ pas, il est essentiel de connaître les éléments a_{ir} , a_{rj} , a_{rr} , c'est-à-dire les $r^{\text{ièmes}}$ ligne et colonne de A modifiées par les $(r-1)$ premiers pas. Pour la sous-matrice C de dimension $(N-r) \times (N-r)$, il est seulement nécessaire de connaître les soustractions successives qui interviennent dans les $(r-1)$ premiers pas, mais pas la valeur initiale. En temps voulu, il suffira d'ajouter la valeur initiale.

3.2. Problème et notation

De façon grossière, on peut formuler la discrétisation par éléments finis d'un problème différentiel linéaire avec conditions aux limites de la manière suivante:

Soient E_1, \dots, E_M un ensemble d'éléments finis tels que :

$$* \bigcup_{k=1}^M E_k = \Omega$$

* x_1, \dots, x_N l'ensemble des variables attachées à tous ces éléments.

A chaque élément E_k , on associe :

- 1/ un ensemble de variables; notons par $LVB^{(k)} := \{i/x_i \text{ est attachée à } E_k\}$, l'ensemble des indices des variables attachées à E_k ;
- 2/ une matrice $A^k = (a_{ij}^{(k)})_{i,j \in LVB^{(k)}}$ et un vecteur $f^{(k)} = (f_j^{(k)})_{j \in LVB^{(k)}}$

Le problème d'éléments finis prend la forme suivante : résoudre un système

$$A \mathbf{x} = \mathbf{f}$$

où la matrice, d'ordre $N \times N$, A est défini par :

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^M a_{ij}^{(k)}, \text{ avec } a_{ij}^{(k)} = 0 \text{ si } \{i,j\} \not\subset LVB^{(k)}$$

\mathbf{x} dénote le vecteur des variables $\begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{bmatrix}$ et \mathbf{f} le vecteur $\begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_N \end{bmatrix}$ défini par :

$$f_j = \sum_{k=1}^M f_j^{(k)}, \text{ avec } f_j^{(k)} = 0 \text{ si } j \notin LVB^{(k)}$$

Remarques :

1. on supposera, dans ce qui suit, qu'on a déjà tenu compte des conditions aux limites dans les sous-matrices $A^{(k)}$ et sous-vecteur $f^{(k)}$;
2. La matrice A n'est pas nécessairement symétrique. On constate que :

$$a_{ij} \neq 0 \text{ (en général) si il existe } k \text{ tel que } \{i,j\} \subset LVB^{(k)} \\ = 0 \text{ sinon.}$$

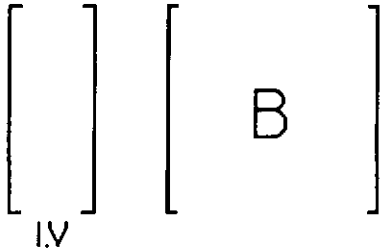
Ainsi la matrice A est en général creuse, ce qui signifie qu'elle contient beaucoup de zéros. On utilise ce fait pour résoudre des systèmes très grands dans un temps raisonnable. Plusieurs algorithmes existent. L'algorithme "BANDE" est, parmi les algorithmes efficaces, le plus simple du point de vue de la programmation. Le but de cet exposé est de présenter un algorithme plus récent, l'algorithme "FRONT".

3.3. Algorithme "FRONT"

Pour l'algorithme BANDE (Kirsly, 1985), l'élimination des variables s'effectue dans le même ordre que l'assemblage, ce qui est très restrictif. Dans l'algorithme FRONT, il s'agit d'une autre convention. On assemble la matrice A élément par élément en éliminant les variables dès que possible. Plus précisément, soient $A^{(k)}$, $k = 1, \dots, M$, les matrices par élément, qui sont les plus petites unités pour les variables liées. L'algorithme comprend M pas.

A chaque pas:

- on assemble une matrice $A^{(k)}$ dans une matrice de travail B;
- après l'assemblage de la matrice $A^{(k)}$, on élimine toutes les variables possibles en tenant compte de l'idée du FRONT exposée auparavant.



Identificateurs de variables qui interviennent dans la matrice de travail B. (L'ordre des variables ne correspond plus à leur numérotation.)

Examinons à quel moment l'élimination d'une variable x_r est possible. Lors de l'élimination de la variable x_r , selon que la valeur x_r ou f_r soit donnée, on aura des transformations différentes des termes a_{ij} ($i \neq r$) de la matrice A et des termes f_i du vecteur f .

- si f_r est imposé on aura les transformations suivantes:

$$a_{ij} \leftarrow a_{ij} - \frac{a_{ir}}{a_{rr}} a_{rj} \quad (i \neq r) \quad i=1, N \quad j=1, N$$

$$f_i \leftarrow f_i - \frac{a_{ir}}{a_{rr}} f_r \quad (i \neq r) \quad i=1, N$$

- si x_r est imposé on aura les transformations suivantes:

$$a_{ij} \leftarrow \text{Inchangés}$$

$$f_i \leftarrow f_i - a_{ir} x_r \quad (i \neq r) \quad i=1, N$$

Pour savoir laquelle des deux valeurs est imposée, il faut donner un code d'imposition pour chaque noeud du réseau d'éléments finis. Les spécifications de ce code d'imposition sont données dans le tableau ci-dessous.

Code d'imposition	Spécifications
-1	x_r est imposé et il faut calculer f_r
1 ou 0	f_r est imposé et il faut calculer x_r

D'après l'idée du front, les termes de soustraction doivent être sommés complètement.

$$a_{ij} \leftarrow a_{ij} - \frac{a_{ir}}{a_{rr}} a_{rj} = \sum_{k=1}^M a_{ij}^{(k)} - \underbrace{\left(\sum_{k=1}^M a_{ir}^{(k)} \right) \cdot \left(\sum_{k=1}^M a_{rj}^{(k)} \right) \cdot \left(\sum_{k=1}^M a_{rr}^{(k)} \right)^{-1}}_{\text{Somme sur } k \text{ telle que } r \in \text{LVB}^{(k)}}$$

L'élimination de x_r est donc possible quand toutes les matrices $A^{(k)}$, avec $r \in \text{LVB}^{(k)}$ sont assemblées (pour les autres k , $a_{rj}^{(k)} := 0$).

Autrement dit il faut assembler les matrices des éléments E_k . De plus, ce code doit signaler si c'est la première fois qu'une variable apparaît afin de lui donner une place dans le vecteur identificateur IV. Les spécifications de ce code d'apparition sont données dans le tableau ci-dessous. Elles sont consignées dans le vecteur $\text{ICODE}^{(k)}$, des codes d'imposition de l'élément k .

Code d'apparition	Spécification
n	1 ^{ère} de n apparitions. Il faut placer la variable dans le vecteur IV.
0	Dernière apparition. Elimination de cette variable. Elle est enlevée de IV.
-1	Apparition intermédiaire.
1	Cas spécial: 1 ^{ère} et dernière apparition.

Ce code peut être soit donné avec chaque matrice $A^{(k)}$, soit calculé dans un programme auxiliaire. Dans ce qui suit nous allons présenter trois algorithmes.

- Le premier permet d'évaluer le code d'apparition de chaque variable d'un élément et de le stocker sur bande magnétique.
- Le second effectue l'assemblage des matrices élémentaires et l'élimination des variables ainsi que le stockage des équations sur bande magnétique. Suivant la valeur du code d'imposition, on procédera ou non à l'élimination de Gauss sur la matrice de travail.
- Le troisième algorithme, intitulé substitution inverse, lira les équations stockées sur bande dans le sens inverse afin de calculer la valeur des variables en commençant par la dernière qui fut éliminée et stockée.

3.3.1 Algorithme code d'apparition

A. Evaluation du nombre total d'apparition de chaque noeud

1. Initialisations

Opérations

Commentaire des opérations

ID ← {0}

;ID = vecteur compteur du nombre d'apparitions

k ← 1

;total de tous les nœuds du réseau.

2. Lire LM, KR, LVB^(k)

;k = compteur des éléments

;LM = numéro de l'élément

;KR = nombre de noeuds que contient l'élément LM

;LVB^(k) = vecteur des noeuds de l'élément LM

3. Initialisation

i ← 1

; Compteur des nœuds de LM

4. Placer LVB_i^(k) dans la variable NIC

NIC ← LVB_i^(k)

; Numéro du i^{ème} nœud de LVB^(k)

5. Incrémenter ID_{NIC} de 1

ID_{NIC} ← ID_{NIC} + 1

6. Si i < KR : i ← i + 1 goto 4.

Sinon continue

; Le nombre d'apparitions de tous les nœuds de LM
; a été ajouté au nombre d'apparitions antérieures
; et stocké dans le vecteur ID.

7. Si k < M : k ← k + 1 goto 2. ; M = nombre total d'éléments.

Sinon continue

; tous les éléments sont traités.
; on aura donc par exemple :
; ID₆ = 3 i.e. le noeud n° 6 apparaît 3 fois dans
; l'ensemble des vecteurs LVB^(k); ID₉ = 0 i.e. le
; noeud n° 9 n'appartient pas au réseau; ID₁₁ = 1
; i.e. le noeud n° 11 n'apparaît qu'une seule
; fois.

B. Construction du vecteur code d'apparition de chaque élément

8. Initialisation

MXLONG " 0

;Largeur du front ou nombre maximum de variables
;actives. (Voir définition dans les remarques du
;paragraphe 3.3.2).

LONG ← 0

;LONG = nombre de variables actives.

```

IV ← {0} ;IV = vecteur identification des variables actives
k ← 1 ;Compteur des éléments.

9. lire LM, KR, LVB(k)

i ← 1 ; Compteur des nœuds de LM.

10. Placer LVBi(k) dans NIC et IDNIC dans IDK

NIC ← LVBi(k)
IDK ← IDNIC

11. Placer dans ICODEi(k) le code approprié, placer NIC dans IV et noter la
place de IV qui lui est attribuée dans LVBIVi(k). Mettre à jour la largeur
du front.

11.1 Si IDK > 1 :
    ICODEi(k) ← IDK ;1ère de IDK apparitions
    IDNIC ← - IDK + 1 ;Initialisation pour le contrôle des apparitions
    ;intermédiaires.
    ;recherche d'une place libre dans IV.
    L ← 1 ;Compteur indiquant la place dans IV.

11.1.1 Si IVL = 0 :
    IVL ← LVBi(k)
    LVBIVi(k) ← L
    LONG ← MAX(LONG, L)
    MXLONG ← MAX(MXLONG, LONG)
    goto 11.1.2

Sinon :
    L ← L+1
    goto 11.1.1

11.1.2 Si i < KR :
    i ← i+1 goto 10

Sinon :
    goto 12.

11.2 Si IDK = 1 :
    ICODEi(k) ← 1 ;1ère et dernière apparition
    ;Recherche d'une place libre dans IV
    L ← 1

```


11.2.1 Si $IV_L = 0$:

$IV_L \leftarrow LVB_i^{(k)}$
 $LVBIV_i^{(k)} \leftarrow L$
 $LONG \leftarrow \text{MAX}(LONG, L)$
 $MXLONG \leftarrow \text{MAX}(MXLONG, LONG)$
 goto 11.2.2

Sinon :

$L \leftarrow L+1$
 goto 11.2.1

11.2.2 Si $i < KR$:

$i \leftarrow i+1$
 goto 10

Sinon :

goto 12.

11.3 Si $IDK = -1$:

$ICODE_1^{(k)} \leftarrow 0$;Dernière apparition.
 ;Recherche de la place occupée par $LVB_i^{(k)}$ dans **IV**.
 $L \leftarrow 1$

11.3.1 Si $IV_L = LVB_i^{(k)}$:

$LVBIV_i^{(k)} \leftarrow L$
 goto 11.3.2

Sinon :

$L \leftarrow L+1$
 goto 11.3.1

11.3.2 Si $i < KR$:

$i \leftarrow i+1$
 goto 10

Sinon :

goto 12.

11.4 Si $IDK < -1$:

$ICODE_1^{(k)} \leftarrow -1$;Apparition intermédiaire.
 $ID_{NIC} \leftarrow IDK + 1$
 ;Recherche de la place occupée par $LVB_i^{(k)}$ dans **IV**.
 $L \leftarrow 1$

11.4.1 Si $IV_L = LVB_i^{(k)}$:

$LVBIV_i^{(k)} \leftarrow L$
 goto 11.4.2

Sinon :

L ← L+1
goto 11.4.1

11.4.2 Si $i < KR$:

i ← i+1 goto 10
Sinon continue

12. Ecrire sur bande LM, KR, $LVB^{(k)}$, $LVBIV^{(k)}$, $ICODE^{(k)}$, LONG

; Le vecteur $ICODE^{(k)}$ des codes d'apparition
; des nœuds de l'élément LM est complet. On
; peut alors l'écrire sur bande magnétique et
; passer à l'élément suivant.

13. Avant de traiter l'élément suivant il faut libérer dans **IV** les places occupées par les variables qui, à ce stade, peuvent être éliminées. On rajustera aussi la longueur du vecteur **IV**.

i ← 1

13.1 Si $ICODE_i^{(k)} = 1$ ou 0 :

L ← $LVBIV_i^{(k)}$
 IV_L ← 0

13.1.1 Si (LONG = L et $k < M$) :

LONG ← L-1
L ← LONG
Si $IV_L = 0$:
goto 13.1.1

13.1.2 Sinon : continue

13.2 Si $i < KR$:

i ← i+1
goto 13.1

13.3 Sinon : continue

;Fin de l'élimination des variables dans **IV**.

14 Si $k < M$:

;M = nombre maximum d'éléments.

k ← k+1
goto 9

Sinon : FIN de l'algorithme code d'apparition.

3.3.2. Algorithme de l'élimination

A ce stade, on suppose que l'on a lu le vecteur **KO** des codes d'imposition, qui associe à chaque variable la valeur 1, 0 ou -1. Ce vecteur est une donnée du problème.

1. Initialisations

k ← 1 ;compteur des éléments
IV ← {0} ;vecteur identificateur

B ← [0] ;matrice de travail
 RHS ← {0} ;vecteur de travail contenant les f_i

2. Lire LM, KR, $LVB^{(k)}$, $LVBIV^{(k)}$, $ICODE^{(k)}$, LONG, $A^{(k)}$, $f^{(k)}$; les données de E_k
 ; $LBVIV^{(k)}$ donne la position des variables de E_k dans IV et dans B

3. Assemblage de $A^{(k)}$ et $f^{(k)}$. Les termes de $A^{(k)}$ et $f^{(k)}$, vont se placer selon le vecteur $LVBIV^{(k)}$. Pour $a_{ij}^{(k)}$ coefficient de $A^{(k)}$, et $f_i^{(k)}$ coefficient de $f^{(k)}$, on a :

$$\left. \begin{aligned} m &:= LVBI V_i^{(k)} & n &:= LVBI V_j^{(k)} \\ B_{mn} &\leftarrow B_{mn} + a_{ij}^{(k)} \\ RHS_m &\leftarrow RHS_m + f_i^{(k)} \\ IV_m &\leftarrow LVBI V_i^{(k)} \end{aligned} \right\} (i = 1, KR; j = 1, KR)$$

4. Elimination

$i \leftarrow 1$

4.1 Si $ICODE_i^{(k)} = 0$ ou 1:

$r := LVBI V_i^{(k)}$

;La variable qui se trouve dans IV_r peut être éliminée après
 ;réduction de B et RHS selon la valeur du code d'imposition.

Si $KO_{IV_r} = 1$ ou 0 ; f_{IV_r} est imposé, l'élimination de Gauss est
 ;appliquée à B et RHS.

$$B_{st} \leftarrow B_{st} - \frac{B_{sr} \cdot B_{rt}}{B_{rr}} \quad (s \neq r) \quad s = 1, LONG \quad t = 1, LONG$$

$$RHS_s \leftarrow RHS_s - \frac{B_{sr} \cdot RHS_r}{B_{rr}} \quad (s \neq r) \quad s = 1, LONG$$

goto 4.1.1

Si $KO_{IV_r} = -1$; x_{IV_r} est imposé, pas d'élimination de Gauss,
 ;seuls les termes de RHS sont modifiés.

$$RHS_s \leftarrow RHS_s - B_{sr} \cdot x_{IV_r} \quad (s \neq r) \quad s = 1, LONG$$

4.1.1 Pour la substitution, l'équation de cette variable IV_r est mise sur bande magnétique et les coefficients correspondants de B et RHS sont mis à zéro.

;Ecrire sur Bande :

LONG, r, IV_r , KO_{IV_r} , (B_{rt} , t=1, LONG), RHS_r

;libérer la position r.

(B_{rt} , t = 1, LONG), (B_{sr} , s = 1, LONG), LONG, RHS_r , $IV_r \leftarrow 0$

4.2 Sinon : continue

4.3 Si $i < KR$:

$i \leftarrow i + 1$
goto 4.1

Sinon : continue

5. Si $k < M$:

$k \leftarrow k + 1$
goto 2 ; $M = \text{total d'éléments à traiter}$

Sinon : Toutes les variables sont éliminées. Les équations correspondantes sont écrites sur bande magnétique dans l'ordre d'élimination. On peut alors commencer la substitution.

FIN de l'algorithme élimination.

Remarques :

1. La numérotation des variables n'a aucune influence sur cet algorithme et ne sert qu'à leur identification.

2. A chaque moment de l'élimination, Ω est coupé en deux parties:

$\Omega_1 = UE_k$; E_k représentant un élément assemblé.

$\Omega_2 = UE_1$; E_1 n'étant pas encore assemblé.

$\Omega_1 \cap \Omega_2$ est appelé "front des variables actives" qui se déplacent au cours de l'élimination. Au début de l'élimination, $\Omega_1 = 0$, à la fin $\Omega_1 = \Omega$.

3. Au début du $k^{\text{ième}}$ pas, notons $\Omega_1 \cap \Omega_2$ le front des variables actives et définissons :

$f_k := \text{nombre de variables associées à } (\Omega_1 \cap \Omega_2)UE_k.$

Le nombre maximum de variables actives au cours de l'élimination est donc

$f := \max_{(k = 1, \dots, M)} f_k$ que l'on appelle "largeur du front"

f dépend essentiellement de la numérotation des éléments comme nous le verrons dans le paragraphe 3.5. Dans ce qui précède, nous l'avons noté MXLONG.

3.3.3 Algorithme de substitution inverse.

L'algorithme comprend N pas, c'est à dire un pas par variable. La bande magnétique, écrite pendant l'élimination, est lue à l'envers. Pour calculer la valeur d'une variable x_n , il faut avoir les valeurs des variables qui étaient placées dans le vecteur **IV** au moment de l'élimination de x_n .

Le vecteur **IV** gouvernera donc l'élimination en marche arrière. Pour ce faire, on met chaque variable à la place qu'elle occupait dans le vecteur **IV** pendant l'élimination. Les valeurs des variables dans **IV** sont placées dans un vecteur **VAL** de dimension égale à la largeur du front (**MXLONG**).

1. Initialisations

$k \leftarrow N$;compteur des variables à calculer
IV \leftarrow {0}
VAL \leftarrow {0} ;vecteur de travail
BM \leftarrow {0}

2. Lire la kième équation de la bande

LONG, r , **IV_r**, **KO_{IV_r}**, (**B_{rs}**, $s = 1, \text{LONG}$), **RHSM**

3. Placer **B_{rs}** dans **BM_s** .

(**BM_s** \leftarrow **B_{rs}**, $s = 1, \text{LONG}$)

4. Effectuer le produit scalaire $\vec{\text{BM}} \cdot \vec{\text{VAL}}$ sans y inclure le produit **BM_r**.**VAL_r** et placer ce résultat dans la variable **SUM**

$$\text{SUM} \leftarrow \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq r}}^{\text{LONG}} \text{BM}_i \cdot \text{VAL}_i$$

5. Si **KO_{IV_r}** = 1 ou 0 ;**f_{IV_r}** est imposé.

$$x_{\text{IV}_r} \leftarrow \frac{\text{RHSM} - \text{SUM}}{\text{BM}_r}$$

VAL_r \leftarrow x_{IV_r}

Sinon :

KO_{IV_r} = -1 ; x_{IV_r} est imposé.

VAL_r \leftarrow x_{IV_r}

f_{IV_r} \leftarrow **SUM** + **BM_r**.**VAL_r** - **RHSM**

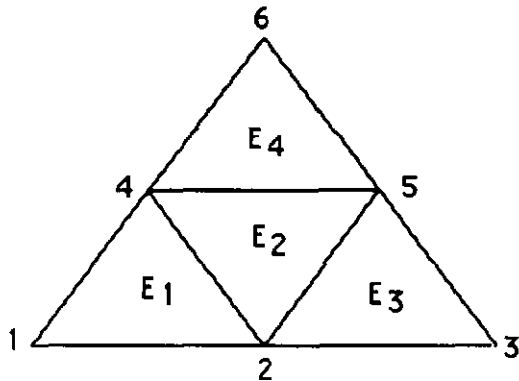
6. $k \leftarrow k-1$

Si $k > 0$:
 goto 2

Sinon : substitution terminée. Imprimer les résultats.
 FIN de l'algorithme substitution inverse.

Donnons un exemple complet afin de préciser les idées.

3.4. Exemple complet.



On suppose pour simplifier, que tous les éléments E_k possèdent la même matrice $A^{(k)}$

$$A^{(k)} = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 3 \end{bmatrix} \quad k = 1, 2, 3, 4$$

et le même second membre $f^{(k)}$

$$f^{(k)} = \begin{bmatrix} 5 \\ 5 \\ 5 \end{bmatrix} \quad k = 1, 2, 4$$

sauf pour l'élément E_3 dont le second membre possèdera une inconnue attachée au nœud n° 3.

$$f^{(3)} = \begin{bmatrix} 5 \\ - \\ 5 \end{bmatrix} \quad \text{on imposera } x_3 = 1$$

Le vecteur code d'imposition est : $KO = \langle 1 \ 1 \ -1 \ 1 \ 1 \ 1 \rangle$

Le tableau ci dessous donne sous forme synthétique les valeurs de LM, KR et LVB de chaque élément:

LM	KR	LVB
1	3	1 2 4
2	3	2 5 4
3	3	2 3 5
4	3	4 5 6

3.4.1 Algorithme code d'apparition.

A. Evaluation du nombre total d'apparition de chaque nœud

1. Lecture du premier élément :

$$k \leftarrow 1 \quad LM \leftarrow 1 \quad KR \leftarrow 3 \quad LVB^{(1)} \leftarrow \langle 1, 2, 4 \rangle$$

$$i \leftarrow 1 \quad NIC \leftarrow 1 \quad ID_1 \leftarrow ID_1 + 1 \quad ; ID_1 = 1$$

$$i \leftarrow 2 \quad NIC \leftarrow 2 \quad ID_2 \leftarrow ID_2 + 1 \quad ; ID_2 = 1$$

$$i \leftarrow 3 \quad NIC \leftarrow 4 \quad ID_4 \leftarrow ID_4 + 1 \quad ; ID_4 = 1$$

2. Lecture du deuxième élément :

```

k ← 2  LM ← 2  KR ← 3  LVB(2) ← <2,5,4>
  i ← 1      NIC ← 2      ID2 ← ID2+ 1      ; ID2=2
  i ← 2      NIC ← 5      ID5 ← ID5+ 1      ; ID5=1
  i ← 3      NIC ← 4      ID4 ← ID4+ 1      ; ID4=2

```

3. Lecture du troisième élément :

```

k ← 3  LM ← 3  KR ← 3  LVB(3) ← <2,3,5>
  i ← 1      NIC ← 2      ID2 ← ID2+ 1      ; ID2=3
  i ← 2      NIC ← 3      ID3 ← ID3+ 1      ; ID3=1
  i ← 3      NIC ← 5      ID5 ← ID5+ 1      ; ID5=2

```

4. Lecture du quatrième élément :

```

k ← 4  LM ← 4  KR ← 3  LVB(4) ← <4,5,6>
  i ← 1      NIC ← 4      ID4 ← ID4+ 1      ; ID4=3
  i ← 2      NIC ← 5      ID5 ← ID5+ 1      ; ID5=3
  i ← 3      NIC ← 6      ID6 ← ID6+ 1      ; ID6=1

```

Le vecteur code d'apparition total de chaque nœud est:

```
ID = < 1 3 1 3 3 1>
```

B. Construction du vecteur code d'apparition de chaque élément

1. Lecture du premier élément

```

k ← 1      LM ← 1      KR ← 3      LVB(1) ← <1,2,4>

  i ← 1      NIC ← 1      IDK ← ID1
  IDK = 1 : ICODE1(1) ← 1      ; 1ère et dernière apparition

  ; Recherche d'une place libre dans IV
  L ← 1      IV1 = 0      ; IV1 est libre
  IV1 ← 1      ; On y place LVB1(1)
  LVBIV1(1) ← 1      ; Noter cette place dans LVBIV1(1)
  LONG ← 1      ; Nombre de variables actives
  MXLONG ← 1      ; Largeur du front mise à jour

  i ← 2      NIC ← 2      IDK ← ID2
  IDK = 3 : ICODE2(1) ← 3      ; 1ère de trois apparitions
  ID2 ← -IDK + 1      ; ID2 = -3 + 1 = -2

  ; Recherche d'une place libre dans IV
  L ← 1      IV1 = 1      ; IV1 est occupée
  L ← 2      IV2 = 0      ; IV2 est libre
  IV2 ← 2      ; On y place LVB2(1)

```

```

LVBIV2(1) ← 2 ; Noter cette place dans LVBIV2(1)
LONG ← 2
MXLONG ← 2

i ← 3      NIC ← 4  IDK ← ID4
IDK = 3 : ICODE3(1) " 3 ; 1ère de trois apparitions
ID4 ← -IDK + 1 ; ID4 = -3 + 1 = -2

; Recherche d'une place libre dans IV
L ← 1      IV1 = 1 ; IV1 est occupée
L ← 2      IV2 = 2 ; IV2 est occupée
L ← 3      IV3 = 0 ; IV3 est libre
            IV3 ← 4 ; On y place LVB3(1)
LVBIV3(1) ← 3 ; Noter cette place dans LVBIV3(1)
LONG ← 3
MXLONG ← 3

; Ecrire sur bande: LM = 1, KR = 3, LVB(1) = <1,2,4>,
LVBIV(1) = <1,2,3> ICODE(1) = <1,3,3>, LONG = 3

; Elimination des variables de IV
i ← 1,      ICODE1(1) = 1 ; LVB1(1) peut être éliminée
L ← LVBIV1(1) ; L = 1 Noter la place de IV qu'elle occupe
IV1 ← 0 ; IV1 est éliminée
i ← 2,      ICODE2(1) = 3 ; LVB2(1) ne peut pas être éliminée
i ← 3,      ICODE3(1) = 3 ; LVB3(1) ne peut pas être éliminée

```

2. Lecture du deuxième élément

```

k ← 2      LM ← 2      KR ← 3      LVB(2) ← <2,5,4>

i ← 1      NIC ← 2  IDK ← ID2
IDK = -2 : ICODE1(2) " -1 ; apparition intermédiaire
ID2 ← IDK + 1 ; ID2 = -2 + 1 = -1

; Recherche de la place occupée par LVB1(2) dans IV
L ← 1      IV1 = 0 ; LVB1(2) n'est pas dans IV1
L ← 2      IV2 = 2 ; LVB1(2) est dans IV2
            LVBIV1(2) ← 2 ; noter cette place dans LVBIV1(2)

i ← 2      NIC ← 5  IDK ← ID5
IDK = 3 : ICODE2(2) ← 3 ; 1ère de trois apparitions

; Recherche d'une place libre dans IV
L ← 1      IV1 = 0 ; IV1 est libre

```



```

IV1 ← 5 ; On y place LVB2(2)
LVBIV2(2) ← 1 ; Noter cette place dans LVBIV2(2)
LONG ← 3

i ← 3 NIC ← 4 IDK ← ID4
IDK = -2 : ICODE3(2) ← -1 ; apparition intermédiaire
ID4 ← IDK + 1 ; ID4 = -2 + 1 = -1

; Recherche de la place occupée par LVB3(2) dans IV
L ← 1 IV1 = 5 ; LVB3(2) n'est pas dans IV1
L ← 2 IV2 = 2 ; LVB3(2) n'est pas dans IV2
L ← 3 IV3 = 4 ; LVB3(2) est dans IV3
LVBIV3(2) ← 3 ; noter cette place dans LVBIV3(2)

; Ecrire sur bande: LM = 2, KR = 3, LVB(2) = <2,5,4>,
LVBIV(2) = <2,1,3> ICODE(2) = <-1,3,-1>, LONG = 3

; Elimination des variables de IV

i ← 1, ICODE1(2) = -1 ; LVB1(2) ne peut pas être éliminée
i ← 2, ICODE2(2) = 3 ; LVB2(2) ne peut pas être éliminée
i ← 3, ICODE3(2) = -1 ; LVB3(2) ne peut pas être éliminée

```

3. Lecture du troisième élément

```

k ← 3 LM ← 3 KR ← 3 LVB(3) ← <2,3,5>

i ← 1 NIC ← 2 IDK ← ID2
IDK = -1 : ICODE1(3) = 0 ; dernière apparition

; Recherche de la place occupée par LVB1(3) dans IV
L ← 1 IV1 = 5 ; LVB1(3) n'est pas dans IV1
L ← 2 IV2 = 2 ; LVB1(3) est dans IV2
LVBIV1(3) ← 2 ; noter cette place dans LVBIV1(3)

i ← 2 NIC ← 3 IDK ← ID3
IDK = 1 : ICODE2(3) ← 1 ; 1ère et dernière apparition
; Recherche d'une place libre dans IV
L ← 1 IV1 = 5 ; IV1 est occupée
L ← 2 IV2 = 2 ; IV2 est occupée
L ← 3 IV3 = 4 ; IV3 est occupée
L ← 4 IV4 = 0 ; IV4 est libre
IV4 ← 3 ; On y place LVB2(3)
LVBIV2(3) ← 4 ; Noter cette place dans LVBIV2(3)

```

```

LONG ← 4
MXLONG ← 4           ; Largeur du front

i ← 3      NIC ← 5   IDK ← ID5
IDK ← -2 : ICODE3(3) ← -1 ; apparition intermédiaire
ID5 ← IDK + 1      ; ID5 = -2 + 1 = -1

; Recherche de la place occupée par LVB3(3) dans IV
L ← 1      IV1 = 5           ; LVB3(3) est dans IV1
          LVBIV3(3) " 1      ; Noter cette place dans LVBIV3(3)

; Ecrire sur bande: LM = 3, KR = 3, LVB(3) = <2,3,5>,
          LVBIV(3) = <2,4,1>      ICODE(3) = <0,1,-1>, LONG = 4

; Elimination des variables de IV

i ← 1,      ICODE1(3) = 0           ; LVB1(3) peut être éliminée
          L ← LVBIV1(3) ; L = 2      ; Noter la place de IV qu'elle occupe
          IV2 ← 0           ; IV2 est éliminée

i ← 2,      ICODE2(3) = 1           ; LVB2(3) peut être éliminée
          L ← LVBIV2(3) ; L = 4      ; Noter la place de IV qu'elle occupe
          IV4 ← 0           ; IV4 est éliminée
          LONG ← 4 - 1 = 3

i ← 3,      ICODE3(3) = -1          ; LVB3(3) ne peut pas être éliminée

```

4. Lecture du quatrième élément

```

k ← 4      LM ← 4      KR ← 3      LVB(4) ← <4,5,6>

i ← 1      NIC ← 4   IDK ← ID4
IDK = -1 : ICODE1(4) ← 0      ; dernière apparition

; Recherche de la place occupée par LVB1(4) dans IV
L ← 1      IV1 = 5           ; LVB1(4) n'est pas dans IV1
L ← 2      IV2 = 0           ; LVB1(4) n'est pas dans IV2
L ← 3      IV3 = 4           ; LVB1(4) est dans IV4
          LVBIV1(4) ← 2      ; noter cette place dans LVBIV1(4)

i ← 2      NIC ← 5   IDK ← ID5
IDK = -1 : ICODE2(4) ← 0      ; dernière apparition

; Recherche de la place occupée par LVB2(4) dans IV
L ← 1      IV1 = 5           ; LVB2(4) est dans IV1

```

```

LVBIV2(4) ← 1 ; noter cette place dans LVBIV2(4)

i ← 3    NIC ← 6    IDK ← ID6
IDK = 1 ; ICODE3(4) ← 1 ; 1ère et dernière apparition

; Recherche d'une place libre dans IV
L ← 1    IV1 = 5 ; IV1 est occupée
L ← 2    IV2 = 0 ; IV2 est libre
          IV2 ← 6 ; On y place LVB3(4)
          LVBIV3(4) ← 2 ; Noter cette place dans LVBIV3(4)
          LONG ← 3
          MXLONG ← 4 ; Largeur du front

; Ecrire sur bande: LM = 4, KR = 3, LVB(4) = <4,5,6>,
          LVBIV(4) = <3,1,2>    ICODE(4) = <0,0,1>, LONG = 3

; Elimination des variables de IV
i ← 1,    ICODE1(4) = 0 ; LVB1(4) peut être éliminée
          L ← LVBIV1(4) ; L = 3 ; Noter la place de IV qu'elle occupe
          IV3 ← 0 ; IV3 est éliminée

i ← 2,    ICODE2(4) = 0 ; LVB2(4) peut être éliminée
          L ← LVBIV2(4) ; L = 1 ; Noter la place de IV qu'elle occupe
          IV1 ← 0 ; IV1 est éliminée

i ← 3,    ICODE3(4) = 1 ; LVB3(4) peut être éliminée
          L ← LVBIV3(4) ; L = 2 ; Noter la place de IV qu'elle occupe
          IV2 ← 0 ; IV2 est éliminée
    
```

LM	KR	LYB	LVBIV	ICODE	LONG
1	3	1 2 4	1 2 3	1 3 3	3
2	3	2 5 4	2 1 3	-1 3 -1	3
3	3	2 3 5	2 4 1	0 1 -1	4
4	3	4 5 6	3 1 2	0 0 1	3

Ce tableau récapitulatif met fin à l'algorithme code d'apparition.

3.4.2 Assemblage et élimination.

Rappel: KO = < 1, 1, -1, 1, 1, 1 >

1. Lecture du premier élément

```

k ← 1    LM ← 1    KR ← 3    LVB(1) ← <1,2,4>
          LVBIV(1) ← <1,2,3>    LONG = 3    ICODE(1) ← <1,3,3>
    
```

$$A^{(1)} = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 3 \end{bmatrix} \quad f^{(1)} = \begin{bmatrix} 5 \\ 5 \\ 5 \end{bmatrix}$$

a) Assemblage de E_1 .

IV	B	RHS
$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 3 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 5 \\ 5 \\ 5 \end{bmatrix}$

↖ Vecteur des variables actives

b) Elimination

ICODE₁⁽¹⁾ = 1 ; donc x_1 peut être éliminée.
 KO₁ = 1 ; donc élimination de Gauss sur B et RHS.

; Ecrire sur bande l'équation de x_1 .

LONG = 3, r = 1, IV₁ = 1, KO₁ = 1, B₁ = < 3 1 1 >, RHS₁ = 5

; La réduction donne:

IV	B	RHS
$\begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 4 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & \text{---} \\ & 2\frac{2}{3} & \frac{2}{3} \\ & \frac{2}{3} & 2\frac{2}{3} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \text{---} \\ 3\frac{1}{3} \\ 3\frac{1}{3} \end{bmatrix}$

2. Lecture du deuxième élément

k ← 2 LM ← 2 KR ← 3 LVB⁽²⁾ ← <2,5,4>

LVBIV⁽²⁾ ← <2,1,3> LONG ← 3 ICODE⁽²⁾ ← <-1,3,-1>

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 3 \end{bmatrix} \quad f^{(2)} = \begin{bmatrix} 5 \\ 5 \\ 5 \end{bmatrix}$$

a). Assemblage de E_2 .

$$\begin{array}{c|cc} \text{IV} & & \text{RHS} \\ \hline \begin{bmatrix} 5 \\ 2 \\ 4 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 1 & 5\frac{2}{3} & 1\frac{2}{3} \\ 1 & 1\frac{2}{3} & 5\frac{2}{3} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 5 \\ 8\frac{1}{3} \\ 8\frac{1}{3} \end{bmatrix} \end{array}$$

b) Elimination: Pas d'élimination.

3. Lecture du troisième élément

$k \leftarrow 3$ $LM \leftarrow 3$ $KR \leftarrow 3$ $LVB^{(3)} \leftarrow \langle 2, 3, 5 \rangle$
 $LVBIV^{(3)} \leftarrow \langle 2, 4, 1 \rangle$ $LONG \leftarrow 4$ $ICODE^{(3)} \leftarrow \langle 0, 1, -1 \rangle$

$$A^{(3)} = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 3 \end{bmatrix} \quad f^{(3)} = \begin{bmatrix} 5 \\ - \\ 5 \end{bmatrix} \leftarrow \text{Valeur à calculer}$$

a) Assemblage de E_3 : Pour assembler la nouvelle variable x_3 , il faut agrandir la matrice B et le vecteur RHS.

$$\begin{array}{c|cc} \text{IV} & & \text{RHS} \\ \hline \begin{bmatrix} 5 \\ 2 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 6 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & 8\frac{2}{3} & 1\frac{2}{3} & 1 \\ 1 & 1\frac{2}{3} & 5\frac{2}{3} & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 3 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 10 \\ 13\frac{1}{3} \\ 8\frac{1}{3} \\ 0 \end{bmatrix} \end{array}$$

b) Elimination.

$ICODE_1^{(3)} = 0$; On peut éliminer x_2
 $KO_2 = 1$; donc élimination de Gauss sur B et RHS.

; Ecrire sur bande l'équation de x_2 :

$LONG = 4$, $r = 2$, $IV_2 = 2$, $KO_2 = 1$, $B_2 = \langle 2, 8\frac{2}{3}, 1\frac{2}{3}, 1 \rangle$, $RHS_2 = 13\frac{1}{3}$

; La réduction donne :

$$\begin{array}{c} \text{IV} \\ \left[\begin{array}{c} 5 \\ 0 \\ 4 \\ 3 \end{array} \right] \end{array} \left[\begin{array}{c|cc} & & \\ \hline 5.5385 & & \\ \hline & 0 & \\ \hline 0.6154 & & \\ \hline 0.7653 & & \end{array} \right] \begin{array}{c} \text{B} \\ \left[\begin{array}{cc} 0.6154 & 0.7693 \\ 5.3462 & -0.1923 \\ -0.1923 & 2.8846 \end{array} \right] \end{array} \left[\begin{array}{c} \text{RHS} \\ \left[\begin{array}{c} 6.9231 \\ \hline \\ 5.7692 \\ -1.5385 \end{array} \right] \end{array} \right]$$

$\text{ICODE}_2^{(3)} = 1$; On peut éliminer x_3
 $\text{KO}_3 = -1$; donc pas d'élimination de Gauss sur B et RHS. Seuls
 ; les termes de RHS subissent une soustraction du produit
 ; $((B_{S,4} \cdot x_3), S = 1, 3)$

; Ecrire sur bande l'équation de x_3 :
 $\text{LONG} = 4, r = 4, \text{IV}_4 = 3, \text{KO}_3 = -1, \mathbf{B}_4 = \langle 0.7653 \quad 0 \quad -0.1923 \quad 2.8846 \rangle,$
 $\text{RHS}_4 = -1.5385$

; La réduction donne :

$$\begin{array}{c} \text{IV} \\ \left[\begin{array}{c} 5 \\ 0 \\ 4 \\ 0 \end{array} \right] \end{array} \left[\begin{array}{c|cc} & & \\ \hline 5.5385 & & \\ \hline & 0 & \\ \hline 0.6154 & & \\ \hline & & 0 \end{array} \right] \begin{array}{c} \text{B} \\ \left[\begin{array}{cc} 0.6154 & \\ 5.3462 & \end{array} \right] \end{array} \left[\begin{array}{c} \text{RHS} \\ \left[\begin{array}{c} 6.9231 \\ \hline \\ 5.7692 \\ \hline \end{array} \right] \end{array} \right]$$

4. Lecture du quatrième élément

$k \leftarrow 4 \quad \text{LM} \leftarrow 4 \quad \text{KR} \leftarrow 3 \quad \text{LVB}^{(4)} \leftarrow \langle 4, 5, 6 \rangle$
 $\text{LVBIV}^{(4)} \leftarrow \langle 3, 1, 2 \rangle \quad \text{LONG} \leftarrow 3 \quad \text{ICODE}^{(4)} \leftarrow \langle 0, 0, 1 \rangle$

$$\mathbf{A}^{(4)} = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 3 \end{bmatrix} \quad \mathbf{f}^{(4)} = \begin{bmatrix} 5 \\ 5 \\ 5 \end{bmatrix}$$

a) Assemblage de E_4 .

$$\begin{array}{c} \text{IV} \\ \left[\begin{array}{c} 5 \\ 6 \\ 4 \end{array} \right] \end{array} \left[\begin{array}{c|cc} & & \\ \hline 8.5385 & 1 & 1.6154 \\ \hline & 1 & 3 \\ \hline 1.6154 & 1 & 8.3462 \end{array} \right] \begin{array}{c} \text{B} \\ \left[\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ 3 & 1 \\ 1 & 8.3462 \end{array} \right] \end{array} \left[\begin{array}{c} \text{RHS} \\ \left[\begin{array}{c} 11.1538 \\ 5 \\ 10.9615 \end{array} \right] \end{array} \right]$$

b) Elimination

ICODE₁⁽⁴⁾ = 0 ; On peut éliminer x₄
 KO₄ = 1 ; donc élimination de Gauss sur B et RHS.

; Ecrire sur bande l'équation de x₄:

LONG = 3, r = 3, IV₃ = 4, KO₄ = 1, B₃ = <1.6154 1 8.3462>
 RHS₃ = 10.9615

; La réduction donne:

$$\begin{array}{c} \text{IV} \\ \left[\begin{array}{c} 5 \\ 6 \\ - \end{array} \right] \end{array} \begin{array}{c} \text{B} \\ \left[\begin{array}{cc|c} 8.2258 & 0.8065 & \\ \hline 0.8065 & 2.8802 & \\ \hline & & 0 \end{array} \right] \end{array} \begin{array}{c} \text{RHS} \\ \left[\begin{array}{c} 9.0322 \\ 3.6866 \\ - \end{array} \right] \end{array}$$

ICODE₂⁽⁴⁾ = 0 ; On peut éliminer x₅
 KO₅ = 1 ; donc élimination de Gauss sur B et RHS.

; Ecrire sur bande l'équation de x₅:

LONG = 3, r = 1, IV₁ = 5, KO₅ = 1, B₁ = <8.2258 0.8065 0>
 RHS₁ = 9.0322

; La réduction donne :

$$\begin{array}{c} \text{IV} \\ \left[\begin{array}{c} - \\ 6 \\ - \end{array} \right] \end{array} \begin{array}{c} \text{B} \\ \left[\begin{array}{cc|c} 0 & & \\ \hline & 2.8011 & \\ \hline & & 0 \end{array} \right] \end{array} \begin{array}{c} \text{RHS} \\ \left[\begin{array}{c} - \\ 2.8010 \\ - \end{array} \right] \end{array}$$

ICODE₃⁽⁴⁾ = 1 ; On peut éliminer x₆
 KO₆ = 1.

; Ecrire sur bande l'équation de x₆:

LONG = 3, r = 2, IV₂ = 6, KO₆ = 1, B₂ = <0 2.8011 0>
 RHS₂ = 2.8010

Fin de l'algorithme assemblage et élimination.

3.4.3 Substitution inverse

1. Lecture de la sixième équation

k ← 6, LONG ← 3, r ← 2, IV₂ ← 6, KO₆ ← 1, BM ← <0 2.8011 0>,
 RHSM ← 2.8010.

$$\begin{array}{c} \text{IV} \\ \left[\begin{array}{c} - \\ 6 \\ - \end{array} \right] \end{array} : \begin{array}{c} \text{BM} \\ \left[\begin{array}{ccc} 0 & 2.8011 & 0 \end{array} \right] \end{array} \begin{array}{c} \text{VAL} \\ \left[\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \end{array} = \begin{array}{c} \text{RHSM} \\ 2.8010 \end{array}$$

$$\text{SUM} \leftarrow 0 \quad (\text{BM}_1 \cdot \text{VAL}_1 + \text{BM}_3 \cdot \text{VAL}_3 = 0)$$

$$x_6 \leftarrow 1 \quad \left(\frac{\text{RHSM} - \text{SUM}}{\text{BM}_2} = \frac{2.8010 - 0}{2.8011} = 1 \right)$$

$$\text{VAL}_2 \leftarrow 1$$

2. Lecture de la cinquième équation

$k \leftarrow 5$, $\text{LONG} \leftarrow 3$, $r \leftarrow 1$, $\text{IV}_1 \leftarrow 5$, $\text{KO}_5 \leftarrow 1$, $\text{BM} \leftarrow \langle 8.2258 \quad 0.8065 \quad 0 \rangle$,
 $\text{RHSM} \leftarrow 9.0322$

$$\begin{array}{c} \text{IV} \\ \left[\begin{array}{c} 5 \\ 6 \\ - \end{array} \right] \end{array} : \begin{array}{c} \text{BM} \\ \left[\begin{array}{ccc} 8.2258 & 0.8065 & 0 \end{array} \right] \end{array} \begin{array}{c} \text{VAL} \\ \left[\begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right] \end{array} = \begin{array}{c} \text{RHSM} \\ 9.0322 \end{array}$$

$$\text{SUM} \leftarrow 0.8065 \quad (\text{BM}_2 \cdot \text{VAL}_2 + \text{BM}_3 \cdot \text{VAL}_3 = 0.8065)$$

$$x_5 \leftarrow 1 \quad \left(\frac{\text{RHSM} - \text{SUM}}{\text{BM}_1} = \frac{9.0322 - 0.8065}{8.2258} = 1 \right)$$

$$\text{VAL}_1 \leftarrow 1$$

3. Lecture de la quatrième équation

$k \leftarrow 4$, $\text{LONG} \leftarrow 3$, $r \leftarrow 3$, $\text{IV}_4 \leftarrow 4$, $\text{KO}_3 \leftarrow 1$, $\text{BM} \leftarrow \langle 1.6154 \quad 1 \quad 8.3462 \rangle$,
 $\text{RHSM} \leftarrow 10.9615$

$$\begin{array}{c} \text{IV} \\ \left[\begin{array}{c} 5 \\ 6 \\ 4 \end{array} \right] \end{array} : \begin{array}{c} \text{BM} \\ \left[\begin{array}{ccc} 1.6154 & 1 & 8.3462 \end{array} \right] \end{array} \begin{array}{c} \text{VAL} \\ \left[\begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right] \end{array} = \begin{array}{c} \text{RHSM} \\ 10.9615 \end{array}$$

$$\text{SUM} \leftarrow 2.6154 \quad (\text{BM}_1 \cdot \text{VAL}_1 + \text{BM}_2 \cdot \text{VAL}_2 = 1.6154 + 1 = 2.6154)$$

$$x_4 \leftarrow 1 \quad \left(\frac{\text{RHSM} - \text{SUM}}{\text{BM}_3} = \frac{10.9615 - 2.6154}{8.3462} \right)$$

$$\text{VAL}_3 \leftarrow 1$$

4. Lecture de la troisième équation

$k \leftarrow 3$, $LONG \leftarrow 4$, $r \leftarrow 4$, $IV_4 \leftarrow 3$, $KO_3 \leftarrow -1$,

$BM \leftarrow \langle 0.7653 \quad 0 \quad -0.1923 \quad 2.8842 \rangle$, $RHSM \leftarrow -1.5385$

$$\begin{array}{c} IV \\ \left[\begin{array}{c} 5 \\ - \\ 4 \\ 3 \end{array} \right] \end{array} : \begin{array}{c} BM \\ \left[\begin{array}{cccc} 0.7653 & 0 & -0.1923 & 2.8842 \end{array} \right] \end{array} \begin{array}{c} VAL \\ \left[\begin{array}{c} 1 \\ - \\ 1 \\ 0 \end{array} \right] \end{array} = -1.5385$$

$$SUM \leftarrow 0.573 \quad (BM_1 \cdot VAL_1 + BM_2 \cdot VAL_2 + BM_3 \cdot VAL_3 = 0.7653 + 0 - 0.1923)$$

$$VAL_4 \leftarrow 1 \quad (x_3 = 1)$$

$$f_3 \leftarrow 5 \quad (SUM + BM_4 \cdot VAL_4 - RHSM = 0.573 + 2.8842 + 1.5385)$$

5. Lecture de la deuxième équation

$k \leftarrow 2$, $LONG \leftarrow 4$, $r \leftarrow 2$, $IV_2 \leftarrow 2$, $KO_2 \leftarrow 1$, $BM \leftarrow \langle 2 \quad 8^{2/3} \quad 1^{2/3} \quad 1 \rangle$

$RHSM \leftarrow 13^{1/3}$

$$\begin{array}{c} IV \\ \left[\begin{array}{c} 5 \\ 2 \\ 4 \\ 3 \end{array} \right] \end{array} : \begin{array}{c} BM \\ \left[\begin{array}{cccc} 2 & 8^{2/3} & 1^{2/3} & 1 \end{array} \right] \end{array} \begin{array}{c} VAL \\ \left[\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{array} \right] \end{array} = 13^{1/3}$$

$$SUM \leftarrow 4^{2/3} \quad (BM_1 \cdot VAL_1 + BM_3 \cdot VAL_3 + BM_4 \cdot VAL_4 = 2 + 1^{2/3} + 1)$$

$$x_2 \leftarrow 1 \quad \left(\frac{RHSM - SUM}{BM_2} = \frac{13^{1/3} - 4^{2/3}}{8^{2/3}} \right)$$

$$VAL_4 \leftarrow 1$$

6. Lecture de la première équation

$k \leftarrow 1$, $LONG \leftarrow 3$, $r \leftarrow 1$, $IV_1 \leftarrow 1$, $KO_1 \leftarrow 1$, $BM \leftarrow \langle 3 \quad 1 \quad 1 \rangle$,

$RHSM \leftarrow 5$

$$\begin{array}{c} IV \\ \left[\begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ 4 \end{array} \right] \end{array} : \begin{array}{c} BM \\ \left[\begin{array}{ccc} 3 & 1 & 1 \end{array} \right] \end{array} \begin{array}{c} VAL \\ \left[\begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ 1 \end{array} \right] \end{array} = 5$$

$$\begin{array}{l} \text{SUM} \longleftarrow 2 \\ x_1 \longleftarrow 1 \end{array} \quad \left(\begin{array}{l} \text{BM}_2 \cdot \text{VAL}_2 + \text{BM}_3 \cdot \text{VAL}_3 = 1 + 1 \\ \frac{\text{RHSM} - \text{SUM}}{\text{BM}_1} = \frac{5 - 2}{3} \end{array} \right)$$

En résumé, le problème d'éléments finis que nous avons résolu s'écrit de la forme matricielle suivante:

$$A \mathbf{x} = \mathbf{f}$$

soit:

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 & 1 & \emptyset \\ 1 & 9 & 1 & 2 & 2 \\ 0 & 1 & 3 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 9 & 2 & 1 \\ \emptyset & 2 & 1 & 2 & 9 & 1 \\ \emptyset & 0 & 1 & 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 15 \\ 5 \\ 15 \\ 15 \\ 5 \end{bmatrix}$$

3.5. Algorithme "BANDE"

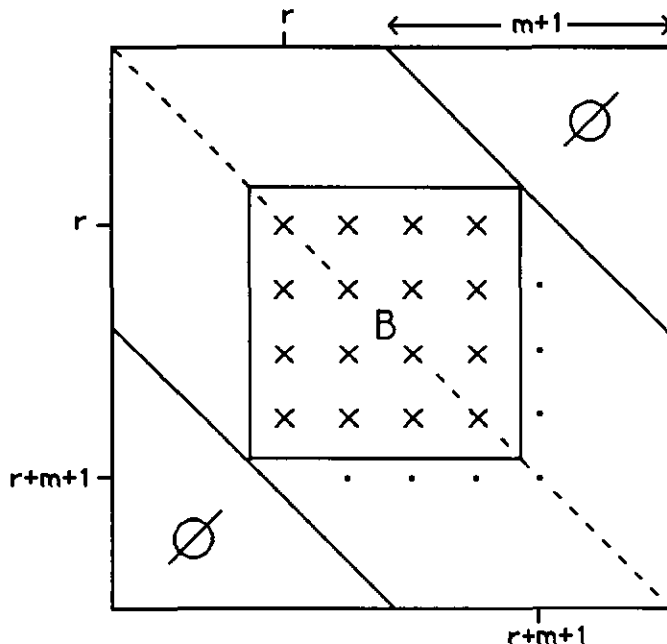
Le point essentiel de l'algorithme BANDE consiste à numéroter les variables de façon que les coefficients non nuls de A se situent dans une bande aussi étroite que possible.

Notons m le nombre de codiagonales supérieures dans cette bande;

$$\text{On a : } m = \max \{ |i - j|; \{i, j\} \in \text{LVB}^{(k)} \}$$

(Définition habituelle: m est tel que $a_{ij} = 0$ pour $|i - j| > m$)

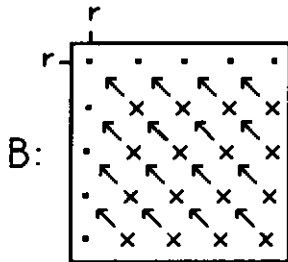
La matrice A d'ordre N×N prend ainsi l'allure donnée dans la figure ci-dessous.



L'algorithme comprend N-1 pas. Les zéros de part et d'autre de la bande ne sont jamais modifiés.

Considérons le $r^{\text{ième}}$ pas d'élimination. Seuls les termes du carré B de la figure précédente sont touchés par l'élimination. A chaque pas, le contenu du carré B sera modifié comme suit :

1. On élimine la variable x_r en réduisant les termes de B.
2. On n'a plus besoin des ligne et colonne r ; on écrit la $r^{\text{ième}}$ ligne sur bande magnétique et on déplace les autres termes de la matrice B comme indiqué dans la figure ci-dessous :



3. On lit la colonne et la ligne $(r + m + 1)$ et on les place aux dernières ligne et colonne de B qui ont été libérées.

Après ces modifications, on est prêt pour le $(r + 1)^{\text{ième}}$ pas d'élimination.

Exemple : Premier pas d'élimination pour l'exemple donné ci-dessus:
 $m=3$

1. Elimination de x_1 .

$$B = \begin{array}{c} \overbrace{\hspace{2cm}}^{m+1} \\ \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 3 & 1 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 9 & 1 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 3 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 9 \\ \hline \end{array} \end{array} \qquad \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 3 & 1 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 8\frac{2}{3} & 1 & 1\frac{2}{3} \\ \hline 0 & 1 & 3 & 0 \\ \hline 1 & 1\frac{2}{3} & 0 & 8\frac{2}{3} \\ \hline \end{array}$$

2. L'équation " $3x_1 + 1x_2 + 0x_3 + 1x_4$ " est écrite sur la bande magnétique. Les autres termes sont déplacés.

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 8\frac{2}{3} & 1 & 1\frac{2}{3} & \cdot \\ \hline 1 & 3 & 0 & \cdot \\ \hline 1\frac{2}{3} & 0 & 8\frac{2}{3} & \cdot \\ \hline \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \hline \end{array}$$

3. On assemble les ligne et colonne suivantes.

$8\frac{2}{3}$	1	$1\frac{2}{3}$	2
1	3	0	1
$1\frac{2}{3}$	0	$8\frac{2}{3}$	2
2	1	2	9

La qualité d'un tel algorithme se mesure essentiellement au nombre de places mémoire et d'opérations (On ne prend en compte que les multiplications et les divisions).

Pour l'algorithme BANDE, on trouve les estimations suivantes:

	Matrice symétrique	Matrice non symétrique
nombre de places mémoire	$\frac{1}{2} \cdot (m + 1)(m + 2)$	$\frac{1}{2} \cdot (m + 1)^2$
nombre d'opérations	$\frac{1}{2} \cdot (m + 1)^2 \cdot N$	

3.6. Comparaison des algorithmes "BANDE" et "FRONT"

Rappelons les notations:

N : Nombre de variables,

m : Largeur de bande,

f : Largeur de front.

On a trouvé les estimations suivantes:

		BANDE	FRONT
nombre de places mémoire	mat. sym.	$\doteq \frac{1}{2} \cdot (m + 1)(m + 2)$	$\frac{1}{2} f \cdot (f + 1)$
	mat. non sym	$\doteq \frac{1}{2} \cdot (m + 1)^2$	f^2
nombre d'opérations	mat. sym.	$\doteq \frac{1}{2} \cdot (m + 1)^2 \cdot N$	$\frac{1}{2} f^2 \cdot N$
	mat. non sym		

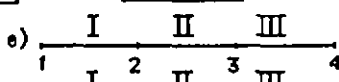
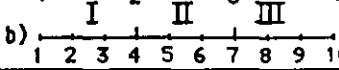
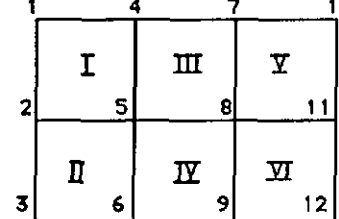
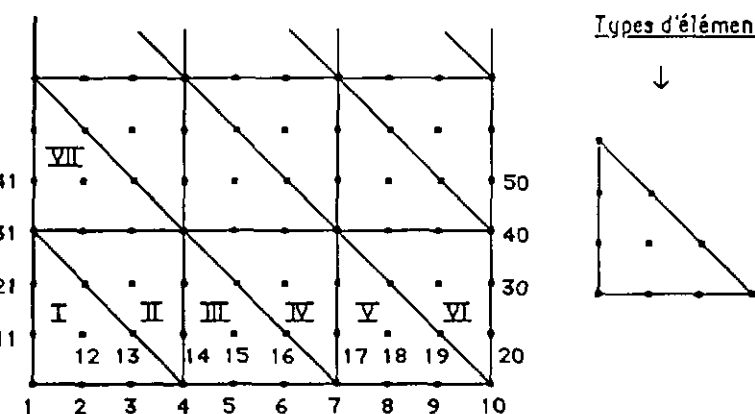
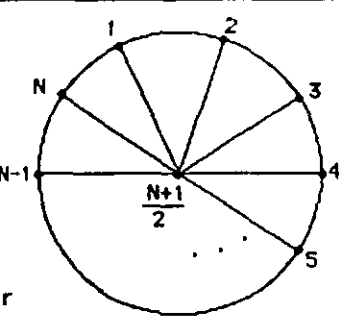
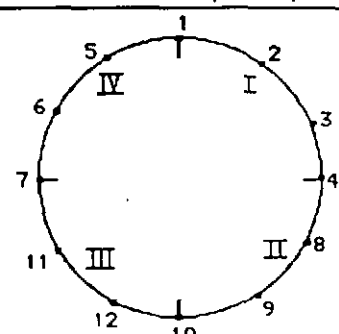
On peut donc comparer directement (m + 1) et f sur les exemples 1 à 5 suivants.

Remarques:

- a) Les exemples 1a, 1b et 2 présentent des structures non "branchées" composées d'éléments de type simple. Ceci est un cas idéal pour l'algorithme BANDE.

Néanmoins, le front n'a pas de désavantages au point de vue place mémoire et opérations.

3. Modèle numérique : algorithme front

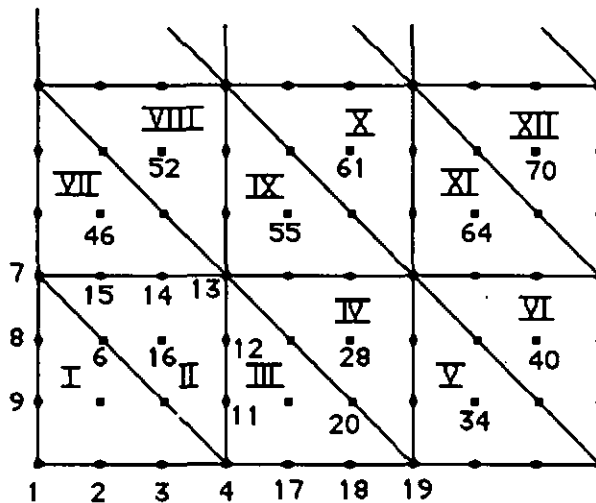
EXEMPLES		Structures	$m + 1$	f
1)	<p>a) </p> <p>b) </p>	<p>← numéro des éléments</p> <p>← numéro des variables</p>	2	2
2)			5	5
3)			31	16!
4)	 <p>N impair</p> <p>Numérotation des éléments quelconque !</p>		$\frac{N+1}{2}$	2
5)			7	5

b) Les exemples 3, 4 et 5 montrent les 3 grands avantages du front pour les structures qui sont branchées (ex.4) ou composées d'éléments de types compliqués (Les variables ne sont pas attachées uniquement au sommet des éléments).

1. Le front est beaucoup plus efficace.
2. La numérotation des éléments, essentielle pour le FRONT, est plus simple et naturelle que la numérotation des variables, importante pour la BANDE.
3. Une mauvaise numérotation des éléments de l'algorithme FRONT n'est pas aussi désastreuse qu'une mauvaise numérotation des variables pour l'algorithme BANDE.

Illustrons les trois points ci-dessus:

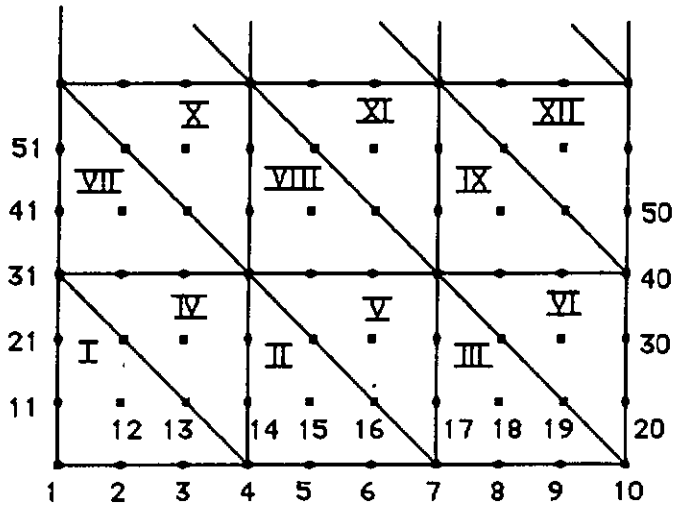
1. Voir l'exemple 3: $f = 1/2 (m + 1)$
Le nombre de places mémoire et le nombre d'opérations sont approximativement proportionnels à $(m + 1)^2$ (pour la BANDE) et f^2 (pour le FRONT), d'où une réduction de place et de travail de 75%.
2. Voir exemple 5.
3. Numérotions à nouveau l'exemple 3 dans un ordre différent, les variables puis les éléments.
a) Modification des numéros de variables. (f reste inchangé)



$$m+1 = 55 - 13 + 1 = 43$$

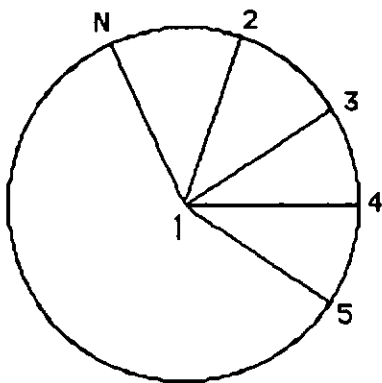
ancienne valeur 31
f = 16

b) Modification des numéros des éléments. ($m + 1$ reste inchangé)



$f = 19$
 ancienne valeur 16
 $m + 1 = 31$

ou encore l'exemple 4 :

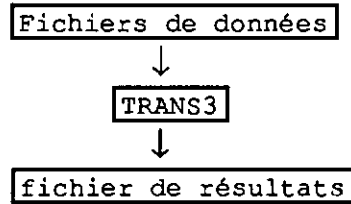


$m + 1 = N$, c'est à dire qu'on a une matrice
 "pleine" à résoudre, tandis que pour n'importe
 quelle numérotation des éléments on a $f = 2$.

La conclusion de cette comparaison est triviale et justifie suffisamment le choix porté sur la solution frontale.

4. Présentation de TRANS3

Le programme TRANS3 n'est pas interactif. Il accepte uniquement des fichiers de données préparés au préalable par l'utilisateur, et il rétrocède un fichier de résultats dont le contenu peut varier avec le type de simulation effectuée.



Il permet de simuler un écoulement hydrodynamique et un transport de masse ou d'énergie dans un milieu poreux saturé, homogène ou non, isotrope ou non, en état permanent ou transitoire. Il est possible de faire varier les conditions aux limites et certains autres paramètres. Selon le cas simulé, les fichiers de données et de résultats se présentent différemment en nombre et en forme (par exemple le nombre de mots-clés obligatoires).

Avant de présenter TRANS3, nous allons définir la structure des différents fichiers d'entrée et de sortie pour chacun des cas de simulation possibles.

4.1 Fichiers de données et de résultats

Les différents fichiers de données requis pour exécuter TRANS3 sont les suivants : le fichier des éléments, le fichier des coordonnées, le fichier des paramètres, le fichier des potentiels et le fichier des conditions initiales.

4.1.1. Fichier des éléments

Il permet de définir la géométrie du modèle, c'est-à-dire la topologie des éléments (liste des points nodaux qui composent un élément). La structure du fichier des éléments est illustrée par la figure 4.1.

La première ligne (ou enregistrement) contient le nom donné au fichier des éléments (par exemple TEST.ELE). L'enregistrement suivant est composé du mot-clé ELEMENT, localisé dans les 15 premières colonnes. Des lignes de commentaires peuvent au besoin précéder ce mot-clé, mais ne devraient pas le contenir. Chaque enregistrement suivant le mot-clé est composé, sur plusieurs lignes, des variables entières suivantes :

LM, NQ, ND, KR, NAR, (LVB(k), k =1, KR)

où LM = numéro de l'élément;
 NQ = nombre indiquant à quelle classe d'alimentation distribuée appartient l'élément;
 ND = nombre indiquant à quelle classe de perméabilité ou de conductivité appartient l'élément;
 KR = nombre de points nodaux de l'élément;
 NAR = nombre d'arêtes de l'élément;
 LVB(K) = numéro des nœuds ("nom des variables") des KR points nodaux.

L'ordre de numérotation des nœuds est très important (figure 2.3). Il commence toujours à un nœud sommet de la base et tourne dans le sens anti-horaire en allant vers le haut.

Figure 4.1 : Structure du fichier des éléments.

```
TEST.ELE
(lignes de commentaire ne contenant pas le mot-clé ELEMENTS
{...
ELEMENTS
IM1 NO1 ND1 KR1 NAR1 (LVB1(k), k=1, KR1)
IM2 NO2 ND2 KR2 NAR2 (LVB2(k), k=1, KR2)
...
...
IMMXLM NOMXLM NDMXLM KRMXLM NARMXLM (LVBMXLM(k), k=1, KRMXLM)
EOF/
```

EXEMPLE4_1.ELE

Legende :

- colonne 1 : elm
- colonne 2 : mad
- colonne 3 : mpa
- colonne 4 : kr
- colonne 5 : ar
- colonnes suivantes : lvabl

ELEMENTS

5	1	1	8	4	1	2	3	7	11	10	9	6
1	2	2	20	12	4001	4002	4003	4007	4011	4010	4009	4006
					2001	2003	2011	2009	1	2	3	7
					11	10	9	6				
6	1	1	8	4	3	4	5	8	13	12	11	7
2	2	2	20	12	4003	4004	4005	4008	4013	4012	4011	4007
					2003	2005	2013	2011	3	4	5	8
					13	12	11	7				
7	1	1	8	4	9	10	11	15	19	18	17	14
3	2	2	20	12	4009	4010	4011	4015	4019	4018	4017	4014
					2009	2011	2019	2017	9	10	11	15
					19	18	17	14				
8	1	1	8	4	11	12	13	16	21	20	19	15
4	2	2	20	12	4011	4012	4013	4016	4021	4020	4019	4015
					2011	2013	2021	2019	11	12	13	16
					21	20	19	15				

Figure 4.2 : Structure du fichier des coordonnées.

```

TEST.XYZ
(Lignes de commentaire ne contenant pas le mot-clé COORDONEES
(...)
COORDONEES
/FACX,FACY,FACZ
NODE1 X(NODE1) Y(NODE1) Z(NODE1)
NODE1 X(NODE1) Y(NODE1) Z(NODE1)
...
...
NODEM X(NODEM) Y(NODEM) Z(NODEM)
EOF/
    
```

EXEMPLE4_1.XYZ

Legende :

- colonne 1 : nic (numero des noeuds)
- colonne 2 : x[nic]
- colonne 3 : y[nic]
- colonne 4 : z[nic]

COORDONEES

	1.0	1.0	1.0	/FACX,FACY,FACZ				
1	0.000	0.000	1.000					
2	0.500	0.000	1.000					
3	1.000	0.000	1.000					
4	1.500	0.000	1.000					
5	2.000	0.000	1.000					
6	0.000	0.500	1.000					
7	1.000	0.500	1.000					
8	2.000	0.500	1.000					
9	0.000	1.000	1.000					
10	0.500	1.000	1.000					
11	1.000	1.000	1.000					
12	1.500	1.000	1.000					
13	2.000	1.000	1.000					
14	0.000	1.500	1.000					
15	1.000	1.500	1.000					
16	2.000	1.500	1.000					
17	0.000	2.000	1.000					
18	0.500	2.000	1.000					
19	1.000	2.000	1.000					
20	1.500	2.000	1.000					
21	2.000	2.000	1.000					
2001	0.000	0.000	0.500					
2003	1.000	0.000	0.500					
2005	2.000	0.000	0.500					
2009	0.000	1.000	0.500					
2011	1.000	1.000	0.500					
2013	2.000	1.000	0.500					
2017	0.000	2.000	0.500					
2019	1.000	2.000	0.500					
2021	2.000	2.000	0.500					
4001	0.000	0.000	0.000					
4002	0.500	0.000	0.000					
4003	1.000	0.000	0.000					
4004	1.500	0.000	0.000					
4005	2.000	0.000	0.000					
4006	0.000	0.500	0.000					
4007	1.000	0.500	0.000		4015	1.000	1.500	0.000
4008	2.000	0.500	0.000		4016	2.000	1.500	0.000
4009	0.000	1.000	0.000		4017	0.000	2.000	0.000
4010	0.500	1.000	0.000		4018	0.500	2.000	0.000
4011	1.000	1.000	0.000		4019	1.000	2.000	0.000
4012	1.500	1.000	0.000		4020	1.500	2.000	0.000
4013	2.000	1.000	0.000		4021	2.000	2.000	0.000
4014	0.000	1.500	0.000					

Les classes d'alimentation distribuée, NQ, et de perméabilité ou conduction, ND, reflètent la structure hydrogéologique qualitative du modèle. C'est-à-dire qu'elles indiquent si un élément donné appartient à un aquifère donné, à un aquitard donné, à un faciès lithologique donné, à une zone de faille donnée, etc... Les valeurs de chacune de ces classes sont consignées dans le fichier des paramètres. Plusieurs éléments peuvent donc appartenir à la même classe. La limite du nombre total de classes est fixée à (IV2 = 30). Celle du nombre total de nœuds est (IV3 = 10'000). Les numéros des nœuds ne sont pas nécessairement successifs mais le numéro le plus élevé ne peut dépasser (IV1 = 20'000). En cas de besoin, il est possible de changer ces limites dans le programme source, en modifiant la valeur des variables IV1, IV2 et IV3. Il ne faut, cependant, pas dépasser la capacité de la mémoire virtuelle de l'ordinateur, lors de la compilation et de l'édition de lien pour obtenir la version exécutable.

4.1.2. Fichier des coordonnées

La structure du fichier des coordonnées est plus simple (figure 4.2). La première ligne contient le nom du fichier (par exemple TEST.XYZ). Le mot-clé recherché est COORDONNEES. Il doit se trouver dans les 15 premières colonnes de l'enregistrement auquel il appartient. Il peut être précédé d'autant de lignes de commentaires que l'on désire, sans pour autant contenir le mot-clé COORDONNEES. Le premier enregistrement suivant ce mot-clé contient les constantes FACX, FACY et FACZ qui sont des facteurs d'échelle transformant les coordonnées x, y et z, respectivement. Il est d'usage de prendre FACX = 1000, FACY = 1000 et FACZ = 1, et d'exprimer x et y en kilomètres et z en mètres.

Les enregistrements qui suivent ces facteurs d'échelle ont la forme :

```
NODE, X(NODE), Y(NODE), Z(NODE)
```

où NODE est le numéro du nœud et X, Y, Z ses coordonnées globales.

4.1.3 Fichiers des paramètres

La structure du fichier des paramètres est montrée à la figure 4.3.

La première ligne contient le nom du fichier des paramètres. Le fichier contient au plus 5 groupes de données. Chaque mot-clé peut être précédé d'autant de lignes de commentaire que nécessaire. Le nombre de groupes obligatoire et la valeur à donner à certaines variables, dépendent du cas de simulation à effectuer. Nous allons examiner en détail ces différentes possibilités. Les parties de mots-clés suivants : PERMEABILITE, CONDUCTION, ALIMENTATIONS, INCREMENT, VITESSES, CONDITIONS, doivent se trouver dans les 15 premières colonnes de l'enregistrement auquel ils appartiennent.

4.1.3.1 Simulation hydrodynamique

Les groupes obligatoires sont ceux contenant les mots-clés suivants :

```
PERMEABILITES ET POROSITES
ALIMENTATIONS DISTRIBUEES
INCREMENT TEMPOREL
CONDITIONS NODALES
```

a) PERMEABILITES ET POROSITES

Les valeurs de perméabilité, en [m/s], et de porosité ou coefficient d'emmagasinement, [1], doivent être définies pour chaque classe annoncée dans

le fichier des éléments. Les enregistrements suivant le mot-clé PERMEABILITES, peuvent contenir 1 ou 6 valeurs de perméabilité, chacun étant terminé par un slash, "/" :

CAS1 : définition isotrope de la perméabilité

```
PERMEABILITES ET POROSITE
ND K1/
NDPOR(ND)
```

CAS2 : définition anisotrope de la perméabilité

```
PERMEABILITES ET POROSITE
ND K1 K2 K3 K4 K5 K6/
NDPOR(ND)
```

où ND est le nombre indiquant la classe de perméabilité. Pour la première ligne, la perméabilité est considérée comme étant isotrope; c'est-à-dire qu'il y a uniquement une valeur pour la ND^{ème} classe :

$$K = \begin{bmatrix} k_1 & 0 & 0 \\ 0 & k_1 & 0 \\ 0 & 0 & k_1 \end{bmatrix}$$

Dans le second cas, les 6 valeurs représentent la partie triangulaire supérieure de la matrice du tenseur de perméabilité pour un élément 3-D, colonne par colonne :

$$K = \begin{bmatrix} k_1 & k_2 & k_4 \\ . & k_3 & k_5 \\ \text{sym.} & & k_6 \end{bmatrix}$$

La variable POR correspond à la valeur de la porosité pour un aquifère phréatique, ou à celle du coefficient d'emménagement pour un aquifère captif. Cette variable n'est prise en compte dans les calculs, que pour une simulation hydrodynamique transitoire. Pour un état permanent, elle est ignorée lors des calculs, mais elle doit néanmoins figurer dans le fichier des paramètres, sinon il y aura une erreur de lecture. On ne favorise pas la variation de la perméabilité, de la conduction ou de la porosité dans le temps.

b) ALIMENTATIONS DISTRIBUEES

L'alimentation distribuée, notée ALD (donnée en $[m^3S^{-1}m^{-2}]$ pour une face d'élément 2-D), doit être définie pour chaque classe annoncée dans le fichier des éléments. Lorsque l'on simule un état transitoire, il peut arriver que l'on veuille tenir compte de la variation de la valeur de l'alimentation distribuée sur la durée de la simulation.

La variable NLEC indique le nombre de fois que l'on désire voir l'alimentation distribuée changer, et ILEC(1), ILEC(2), ..., ILEC(NLEC) sont les intervalles de temps (multiples de IDT) séparant chacun des changements du début de la simulation transitoire ($t_0 = 0$). ILEC(1) est toujours nul.

Figure 4.3 : Structure du fichier des paramètres.

```

TEST.PAR
{lignes de commentaire
(...)
(PERMEABILITES ET POROSITE) ou {CONDUCTION ET POROSITE}
ND1 PER(1,ND1) PER(2,ND1) ... PER(6,ND1)
POR(ND1)
ND2 PER(1,ND2) PER(2,ND2) ... PER(6,ND2)
POR(ND2)
...
...
NDMXND PER(1,NDMXND) PER(2,NDMXND) ... PER(6,NDMXND)
POR(NDMXND)
{lignes de commentaire
(...)
ALIMENTATIONS DISTRIBUEES
NLEC ILEC(1) ILEC(2) ... ILEC(NLEC)
NQ1 ALD(1,NQ1) ALD(2,NQ1) ... ALD(NLEC,NQ1)
NQ2 ALD(1,NQ2) ALD(2,NQ2) ... ALD(NLEC,NQ2)
...
...
NQMXNQ ALD(1,NQMXNQ) ALD(2,NQMXNQ) ... ALD(NLEC,NQMXNQ)
{lignes de commentaire
(...)
INCREMENT TEMPOREL
IDT ITPRINT ITMAX
{lignes de commentaire
(...)
VITESSES
NVIT VIX VYI VZV
{lignes de commentaire
(...)
CONDITIONS NODALES
NODE1 KODE(NODE1) VAL(1,NODE1) VAL(2,NODE1) ... VAL(NLEC,NODE1)
NODE1 KODE(NODE1) VAL(1,NODE1) VAL(2,NODE1) ... VAL(NLEC,NODE1)
...
...
NODETOT KODE(NODETOT) VAL(1,NODETOT) VAL(2,NODETOT) ... VAL(NLEC,NODETOT)
EOF/

```

```

EXEMPLEA_1.PAR
PERMEABILITES ET POROSITES
  1  0.0 /
  1  1.0E-4
  2  1.0E-2 /
  2  1.0E-4
ALIMENTATIONS DISTRIBUEES
  1 /
  1  0.0D+00/
  2  0.0D+00/
INCREMENT TEMPOREL
  0  0  0
CONDITIONS NODALES
  1  -1  2.000          17  -1  1.980
  2  -1  2.000          18  -1  1.980
  3  -1  2.000          19  -1  1.980
  4  -1  2.000          20  -1  1.980
  5  -1  2.000          21  -1  1.980
2001 -1  2.000          2017 -1  1.980
2003 -1  2.000          2019 -1  1.980
2005 -1  2.000          2021 -1  1.980
4001 -1  2.000          4017 -1  1.980
4002 -1  2.000          4018 -1  1.980
4003 -1  2.000          4019 -1  1.980
4004 -1  2.000          4020 -1  1.980
4005 -1  2.000          4021 -1  1.980

```

Exemples :

1- NLEC = 1 signifie que l'alimentation distribuée est constante sur toute la période transitoire.

```
ALIMENTATIONS DISTRIBUEES
```

```
1 /
NQ ALD(1,NQ)
```

2- NLEC = 4 signifie que l'alimentation distribuée doit changer 4 fois.

```
ALIMENTATIONS DISTRIBUEES
```

```
4 ILEC(1) ILEC(2) ILEC(3) ILEC(4)
NQ ALD(1,NQ) ALD(2,NQ) ALD(3,NQ) ALD(4,NQ)
```

Pour un cas de simulation d'état permanent, on aura :

```
ALIMENTATIONS DISTRIBUEES
```

```
1 /
NQ ALD(1,NQ)
```

c) INCREMENT TEMPOREL

Le mot-clé INCREMENT est suivi d'un enregistrement contenant trois variables entières IDT, ITPRINT, ITMAX;

où IDT est un nombre entier représentant le pas de temps constant de l'évolution transitoire, [j];

ITPRINT est un nombre entier représentant l'intervalle constant séparant chaque impression de résultats calculés dans le fichier de résultats (multiple de IDT), [j];

ITMAX est un nombre entier représentant le temps de la durée totale de simulation (multiple de IDT), [j].

Si ITMAX n'est pas un multiple de ITPRINT, le dernier pas de temps est tout de même imprimé dans le fichier de résultats.

Pour simuler un cas transitoire, il suffit que IDT soit non nul. Un fichier de conditions initiales sera alors requis.

Exemple : Considérons le cas suivant :

```
INCREMENT TEMPOREL
```

```
5      25  75
```

il correspond à une simulation transitoire sur 75 jours avec un pas de temps de 5 jours. Dans le fichier de résultats, il y aura trois impressions de résultats calculés à $t = 25$ jours, $t = 50$ jours et $t = 75$ jours. Ces impressions sont dictées par la valeur ITPRINT = 25 qui permet d'imprimer à tous les 25 jours.

Pour simuler un état permanent, il suffit d'annuler la variable IDT (IDT = 0); ITPRINT et ITMAX peuvent alors être quelconques, ou remplacés par un slash, "/".

d) CONDITIONS NODALES

Chaque enregistrement suivant le mot-clé CONDITIONS NODALES, comprend le numéro du nœud (NODE, où l'on impose une condition limite), un code (KODE, indiquant si l'on impose le potentiel en [m], KODE = -1, ou si l'on impose le débit nodal en [m^3s^{-1}], KODE = 0 ou 1), et la valeur imposée (VAL qui est, selon la valeur de KODE, un débit ou un potentiel). Tous les nœuds ne figurant pas dans cette liste de conditions nodales se voient automatiquement attribuer une condition de débit nul imposé, KODE = 0 et VAL = 0. La condition de débit représente une différence algébrique entre le flux arrivant et celui partant du nœud. C'est la divergence ou bilan du flux appliqué à chaque nœud. Tous les nœuds intérieurs au domaine ne subissant ni pompage, ni injection, et ceux situés sur une frontière imperméable, ont forcément un bilan de flux nul, (i.e. KODE = 0 et VAL = 0). IL n'est donc pas nécessaire de les faire apparaître dans la liste des conditions nodales puisque toutes les variables du programme sont automatiquement initialisées à zéro par le compilateur FORTRAN.

Pour un cas transitoire avec changement de conditions aux limites, le procédé est le même que celui présenté pour l'alimentation distribuée.

4.1.3.2 Simulation d'un transport de masse ou d'énergie

Les groupes obligatoires de mots-clés sont :

```

CONDUCTION ET POROSITE
ALIMENTATIONS DISTRIBUEES
INCREMENT TEMPOREL
VITESSES
CONDITIONS NODALES

```

a) CONDUCTION ET POROSITE

Les valeurs de conduction (D en [m^2s^{-1}] pour le chimique, et $\lambda/\rho C$ en [m^2s^{-1}], pour le thermique) et de porosité (m , [1], pour le chimique, et $\rho^*C/\rho C$, [1], pour le thermique) doivent être définies pour chaque classe annoncée dans le fichier des éléments. Cette définition est similaire à celle présentée précédemment pour la perméabilité et porosité, (figure 4.3).

b) ALIMENTATIONS DISTRIBUEES

L'alimentation distribuée ALD, est le flux de concentration, Q_C , du polluant chimique rapporté à une unité de surface, exprimé en [$\text{kg m}^{-3}\text{s}^{-1}\text{m}^{-2}$] ou en [$\text{g m}^{-3}\text{s}^{-1}\text{m}^{-2}$] ou le flux thermique par unité de capacité calorifique, $Q_T/\rho C$, rapporté à une unité de surface, exprimé en [$^{\circ}\text{C s}^{-1}\text{m}^{-2}$].

La structure des données est la même que celle décrite dans le paragraphe (b) du cas hydrodynamique.

c) INCREMENT TEMPOREL

Voir (c) du cas hydrodynamique.

d) VITESSES

Le mot-clé VITESSE est suivi d'un enregistrement contenant 4 variables NVIT, VXX, VYY, VZZ. NVIT est un code qui permet de préciser si l'on veut calculer le

champ des vitesses à partir d'une distribution de potentiels connus à tous les nœuds du domaine (NVIT = 0), ou si l'on préfère des vitesses uniformes sur tout le domaine (NVIT = 1).

Dans le cas où NVIT = 1, il s'agit d'imposer un champ de vitesse constant dans l'espace et dans chaque direction x, y et z; auquel cas, il faut donner les valeurs VXX, VYY, VZZ. Dans le cas où NVIT = 0, les valeurs de VXX VYY et VZZ doivent être nulles. Si elles ne le sont pas, cela n'aura aucune incidence sur les calculs, elles seront tout simplement ignorées. Elles peuvent être remplacées par un slash, "/". Un fichier de potentiel est alors requis.

e) CONDITIONS NODALES

Voir (d) du cas hydrodynamique et remplacer le mot potentiel en [m], par concentration [kg m⁻³] ou [g m⁻³] ou par température en [°C]. Le débit sera soit Q_c en [kg m⁻³s⁻¹m⁻²] ou en [g m⁻³s⁻¹m⁻²] pour le chimique, soit Q_T/ρC en [°C s⁻¹], pour le thermique.

4.1.4 Fichier des potentiels

Ce fichier est requis lorsque la variable NVIT du fichier des paramètres est nulle (NVIT = 0). Sa structure est identique à celle d'un fichier de résultats d'une simulation en état permanent, sauf que la variable C(NODE) est remplacée par C(1,NODE), C(2,NODE) ... C(NLEC,NODE). Il sera ainsi possible de recalculer le champ de vitesses à chaque changement des conditions hydrodynamiques régi par NLEC. Les mots-clés PERMEABILITE et RESULTATS CALCULES doivent être suivis d'une ligne d'astérisques les soulignant, sinon une erreur surviendra lors de la lecture. Le nombre de classes de perméabilité doit être égal au nombre de classes de conduction. La première ligne du fichier contient le nom de celui-ci (par exemple TEST.POT), (Figure 4.4).

4.1.5 Fichier des conditions initiales

Ce fichier est requis lorsque la variable IDT du fichier des paramètres est non nulle (IDT ≠ 0). Sa structure est identique à celle d'un fichier de résultats d'une simulation en état permanent. Le mot-clé RESULTATS CALCULES doit être suivi d'une ligne d'astérisques le soulignant, sinon une condition d'erreur surviendra lors de la lecture. La première ligne du fichier contient le nom de celui-ci (par exemple TEST.INI).

4.2.6 Fichier des résultats

La structure du fichier de sortie est différente selon que l'on simule un écoulement hydrodynamique permanent ou transitoire (Figure 4.5), ou un transport de masse ou d'énergie permanent, ou transitoire (Figure 4.6).

La sortie commence par un écho des noms des fichiers d'entrée et sortie avec les paramètres de contrôle imprimés immédiatement après l'achèvement de l'élimination symbolique. Ces paramètres de contrôle sont :

MMNIC : le plus petit numéro de nœud;

MXMIC : le numéro de nœud le plus élevé;

MXNQ : nombre total de classes d'alimentation distribuées présentes dans le fichier des éléments;

Figure 4.4 : Structure du fichier des potentiels ou des conditions initiales.

```

EXEMPLE4_1.POT ou EXEMPLE4_1.INI
*****
* "TRANS3" - MOELE A ELEMENTS FINIS *
* TRANSPORT CONDUCTIF/ADVECTIF PERMANENT OU TRAN- *
* SITOIRE - TRIDI . *
* CENTRE D'HYDROGEOLOGIE (UNIVERSITE DE NEUCHATEL) *
* VERSION DU 09-04-1989 *
*****

FICHIERS DES DONNEES:
*****
EXEMPLE4_1.ELE
EXEMPLE4_1.XYZ
EXEMPLE4_1.PAR

PARAMETRES DE CONTROLE:
*****
MNIC= 1 MNIC= 4021 MNQ= 2 MXND= 2
MXLM= 8 MNODE= 51 MXLONG= 25

VALEURS DES CLASSES DE PERMEABILITE ET DE POROSITE
*****
1 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00
0.00000E+00 0.00000E+00
0.00000E+00

1 0.100000E-03
2 0.10000E-01 0.00000E+00 0.00000E+00
0.10000E-01 0.00000E+00
0.10000E-01

2 0.100000E-03

ALIMENTATIONS DISTRIBUEES
*****
1 0.000000E+00
2 0.000000E+00

CONDITIONS NODALES
*****
1 1 -1 0.200000E+01
2 2 -1 0.200000E+01
3 3 -1 0.200000E+01
4 4 -1 0.200000E+01
5 5 -1 0.200000E+01
6 2001 -1 0.200000E+01
7 2003 -1 0.200000E+01
8 2005 -1 0.200000E+01
9 4001 -1 0.200000E+01
10 4002 -1 0.200000E+01
11 4003 -1 0.200000E+01
12 4004 -1 0.200000E+01
13 4005 -1 0.200000E+01
14 17 -1 0.198000E+01
15 18 -1 0.198000E+01
16 19 -1 0.198000E+01
17 20 -1 0.198000E+01
18 21 -1 0.198000E+01
19 2017 -1 0.198000E+01
20 2019 -1 0.198000E+01
21 2021 -1 0.198000E+01
22 4017 -1 0.198000E+01
23 4018 -1 0.198000E+01
24 4019 -1 0.198000E+01
25 4020 -1 0.198000E+01
26 4021 -1 0.198000E+01

INCREMENT TEMPOREL, TPRINT, TMAX
*****
0 0 0

```

```

!RESULTATS CALCULES!
*****
  1 -1  2.000 -0.8333333E-05    2 -1  2.000  0.3333333E-04    3 -1  2.000 -0.1666667E-04
  4 -1  2.000  0.3333333E-04    5 -1  2.000 -0.8333333E-05    6  0  1.995  0.0000000E+00
  7  0  1.995  0.0000000E+00    8  0  1.995  0.0000000E+00    9  0  1.990  0.0000000E+00
 10  0  1.990  0.0000000E+00   11  0  1.990  0.0000000E+00   12  0  1.990  0.0000000E+00
 13  0  1.990  0.0000000E+00   14  0  1.985  0.0000000E+00   15  0  1.985  0.0000000E+00
 16  0  1.985  0.0000000E+00   17 -1  1.980  0.8333333E-05   18 -1  1.980 -0.3333333E-04
 19 -1  1.980  0.1666667E-04   20 -1  1.980 -0.3333333E-04   21 -1  1.980  0.8333333E-05
2001 -1  2.000  0.3333333E-04   2003 -1  2.000  0.6666667E-04   2005 -1  2.000  0.3333333E-04
2009  0  1.990  0.0000000E+00   2011  0  1.990  0.0000000E+00   2013  0  1.990  0.0000000E+00
2017 -1  1.980 -0.3333333E-04   2019 -1  1.980 -0.6666667E-04   2021 -1  1.980 -0.3333333E-04
4001 -1  2.000 -0.8333333E-05   4002 -1  2.000  0.3333333E-04   4003 -1  2.000 -0.1666667E-04
4004 -1  2.000  0.3333333E-04   4005 -1  2.000 -0.8333333E-05   4006  0  1.995  0.0000000E+00
4007  0  1.995  0.0000000E+00   4008  0  1.995  0.0000000E+00   4009  0  1.990  0.0000000E+00
4010  0  1.990  0.0000000E+00   4011  0  1.990  0.0000000E+00   4012  0  1.990  0.0000000E+00
4013  0  1.990  0.0000000E+00   4014  0  1.985  0.0000000E+00   4015  0  1.985  0.0000000E+00
4016  0  1.985  0.0000000E+00   4017 -1  1.980  0.8333333E-05   4018 -1  1.980 -0.3333333E-04
4019 -1  1.980  0.1666667E-04   4020 -1  1.980 -0.3333333E-04   4021 -1  1.980  0.8333333E-05

SOMME DES DEBITS = -0.2837222E-16
    
```

Figure 4.5 : Structure d'un fichier de sortie d'un écoulement hydrodynamique transitoire.

```

*****
* "TRANS3" - MODELE A ELEMENTS FINIS *
* TRANSPORT CONDUCTIF/ADVECTIF PERMANENT OU TRAN- *
* SITOIRE - TRIOTI . *
* CENTRE D'HYDROGEOLOGIE (UNIVERSITE DE NEUCHATEL) *
* VERSION DU 09-04-1989 *
*****

FICHIERS DES DONNEES:
*****
EXEMPLEA_1.ELE
EXEMPLEA_1.XYZ
EXEMPLEA_1.PAR

PARAMETRES DE CONTROLE:
*****
MNNIC=  1  MKNIC= 4021  MKNQ=  2  MKNND=  2
MKLM=  8  MKNODE= 51  MKLONG= 25

VALEURS DES CLASSES DE PERMEABILITE ET DE POROSITE
*****
  1  0.000000E+00  0.000000E+00  0.000000E+00
                                0.000000E+00
                                0.000000E+00
  1  0.1000000E-03
  2  0.100000E-01  0.000000E+00  0.000000E+00
                                0.100000E-01  0.000000E+00
                                0.100000E-01
  2  0.1000000E-03

ALIMENTATIONS DISTRIBUEES
*****
  1  0.0000000E+00
  2  0.0000000E+00

CONDITIONS NODALES
*****
  1  1 -1  0.2000000E+01
  2  2 -1  0.2000000E+01
  .
  .
 25  4020 -1  0.1980000E+01
 26  4021 -1  0.1980000E+01
    
```

```

INCREMENT TEMPEL, TPRINT, TMAX
*****
          5          25          75
Fichier des conditions initiales:
*****          EXEMPLE4_1.INI

Fichier des potentiels:
*****          EXEMPLE4_1.POT

INCREMENT DU TEMPS: DT=          5 JOURS.
PERIODE TRANSITOIRE DE          25 JOURS.

!RESULTATS CALCULES!
*****
      1 -1    2.000 -0.8333333E-05          2 -1    2.000  0.3333333E-04          3 -1    2.000 -0.1666667E-04
      4 -1    2.000  0.3333333E-04          5 -1    2.000 -0.8333333E-05          6  0    1.995  0.0000000E+00
      .
      .
      .
      4016  0    1.985  0.0000000E+00          4017 -1    1.980  0.8333333E-05          4018 -1    1.980 -0.3333333E-04
      4019 -1    1.980  0.1666667E-04          4020 -1    1.980 -0.3333333E-04          4021 -1    1.980  0.8333333E-05

SOMME DES DEBITS = -0.3093385E-16

INCREMENT DU TEMPS: DT=          5 JOURS.
PERIODE TRANSITOIRE DE          50 JOURS.

!RESULTATS CALCULES!
*****
      1 -1    2.000 -0.8333333E-05          2 -1    2.000  0.3333333E-04          3 -1    2.000 -0.1666667E-04
      .
      .
      .
      4019 -1    1.980  0.1666667E-04          4020 -1    1.980 -0.3333333E-04          4021 -1    1.980  0.8333333E-05

SOMME DES DEBITS = -0.3093385E-16

INCREMENT DU TEMPS: DT=          5 JOURS.
PERIODE TRANSITOIRE DE          75 JOURS.

!RESULTATS CALCULES!
*****
      1 -1    2.000 -0.8333333E-05          2 -1    2.000  0.3333333E-04          3 -1    2.000 -0.1666667E-04
      .
      .
      .
      4019 -1    1.980  0.1666667E-04          4020 -1    1.980 -0.3333333E-04          4021 -1    1.980  0.8333333E-05

SOMME DES DEBITS = -0.3093385E-16

```

Figure 4.6 : Structure d'un fichier de sortie d'un transport de masse transitoire.

```

*****
* "TRANS3" - MODELE A ELEMENTS FINIS          *
* TRANSPORT CONDUCTIF/ADVECTIF PERMANENT OU TRAN- *
* SITOIRE - TRIDI .                          *
* CENTRE D'HYDROGEOLOGIE (UNIVERSITE DE NEUCHATEL) *
*          VERSION DU 09-04-1989          *
*****

FICHIERS DES DONNEES:
*****          EXEMPLE4_1.ELE
                  EXEMPLE4_1.XYZ
                  EXEMPLE4_1.PAR

PARAMETRES DE CONTROLE:
*****
MNIC=  1    MNIC= 4021    MNQ=  2    MND=  2
MKLM=  8    MNODE=  51    MXLONG= 25

```

4. Présentation de TRANS3

VALEURS DES CLASSES DE CONDUCTION ET DE POROSITE

 1 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00
 0.00000E+00 0.00000E+00
 0.00000E+00
 1 0.100000E-03
 2 0.10000E-01 0.00000E+00 0.00000E+00
 0.10000E-01 0.00000E+00
 0.10000E-01
 2 0.100000E-03

ALIMENTATIONS DISTRIBUEES

 1 0.000000E+00
 2 0.000000E+00

CONDITIONS NODALES

 1 1 -1 0.200000E+01
 .
 .
 26 4021 -1 0.198000E+01

INCREMENT TEMPOREL, TPRINT, TMAX

 5 25 75

Fichier des conditions initiales:
 ***** EXEMPLE4_1.INI

Fichier des potentiels:
 ***** EXEMPLE4_1.POT

INCREMENT DU TEMPS: DT= 5 JOURS.
 PERIODE TRANSITOIRE OE 25 JOURS.

!RESULTATS CALCULES!

 1 -1 2.000 -0.833333E-05 2 -1 2.000 0.333333E-04 3 -1 2.000 -0.166666E-04
 .
 .
 4019 -1 1.980 0.166666E-04 4020 -1 1.980 -0.333333E-04 4021 -1 1.980 0.833333E-05
 SOMME DES DEBITS = -0.3093385E-16

INCREMENT DU TEMPS: DT= 5 JOURS.
 PERIODE TRANSITOIRE OE 50 JOURS.

!RESULTATS CALCULES!

 1 -1 2.000 -0.833333E-05 2 -1 2.000 0.333333E-04 3 -1 2.000 -0.166666E-04
 .
 .
 4019 -1 1.980 0.166666E-04 4020 -1 1.980 -0.333333E-04 4021 -1 1.980 0.833333E-05
 SOMME DES DEBITS = -0.3093385E-16

INCREMENT DU TEMPS: DT= 5 JOURS.
 PERIODE TRANSITOIRE OE 75 JOURS.

!RESULTATS CALCULES!

 1 -1 2.000 -0.833333E-05 2 -1 2.000 0.333333E-04 3 -1 2.000 -0.166666E-04
 .
 .
 4019 -1 1.980 0.166666E-04 4020 -1 1.980 -0.333333E-04 4021 -1 1.980 0.833333E-05
 SOMME DES DEBITS = -0.3093385E-16

MXLM : nombre total des éléments;
 MXNODE : nombre total des nœuds (pas nécessairement égal à (MXNIC-MNNIC+1)!)
 MXLONG : largeur maximale du front rencontré durant l'élimination symbolique.

Si MXLONG est supérieur à la largeur du front à ne pas dépasser (MXFR = 300) les calculs numériques sont arrêtés et un message d'erreur est renvoyé.

Un écho du fichier des paramètres s'ensuit pour s'assurer que les lectures ont été bien faites, (perméabilités ou conduction, alimentations distribuées, conditions nodales, incrément temporel et vitesses).

Les résultats calculés sont, ensuite, présentés pour chaque point nodal :

RESULTATS CALCULES

NODE KODE(NODE) C(NODE) Q(NODE)

Si KODE(NODE) = 0 ou 1, alors C(NODE) est le résultat calculé pour un débit imposé; si KODE(NODE) = -1, alors Q(NODE) est la valeur calculée pour une charge imposée. Il faut noter que Q(NODE) représente l'intégrale de tous les débits (ou alimentations distribuées) sur le domaine d'influence du point nodal concerné, et son interprétation n'est pas toujours évidente (voir annexe C). La somme de tous les débits nodaux est affichée à la fin de la liste des résultats. Elle doit toujours être nulle ou de l'ordre de grandeur de la précision de calcul utilisée. Dans TRANS3, les calculs se font en double précision.

Pour un cas transitoire le fichier des résultats identifie toutes les périodes transitoires qui ont été imprimées.

4.1.7 Contrôle de la largeur du front à l'aide du fichier des éléments

Exemple 4.1 : Soit un aquifère captif de $W = 2\text{m}$ de largeur et de $e = 1\text{m}$ d'épaisseur portant un écoulement hydrodynamique permanent, Figure 4.7. On en prend une portion entre deux sections distantes de $L = 2\text{m}$ dans le sens de la longueur de l'aquifère. La charge hydraulique H à la section 1 est de 2m et celle à la section 2 est de 1.98m . La perméabilité est $K = 10^{-2}\text{ms}^{-2}$ et le coefficient d'emménagement est $S = 10^{-4}$.

a) Discrétisation par éléments finis.

On subdivise le domaine en 4 blocs d'éléments finis 3-D de 20 nœuds chacun, recouverts par 4 éléments 2-D de 8 nœuds chacun (figure 4.8).

Les 21 nœuds de surface sont numérotés de 1 à 21; les 9 nœuds des arêtes verticales ont le même numéro que ceux de surface auxquels on ajoute le nombre 2000; les 21 nœuds de la base sont numérotés de 4001 à 4021. Les éléments 3-D sont numérotés de 1 à 4 et ceux de surface de 5 à 8. Les nœuds de la base constituent la cote de référence $Z = 0$; les nœuds milieux des arêtes verticales ont une cote $Z = 0.5\text{m}$ et ceux de surface ont $Z = 1\text{m}$.

b) Constructions du fichier des éléments (figure 4.1).

Lors de l'application de l'algorithme Front sur l'exemple 4.1, les éléments sont assemblés dans l'ordre dicté par leur position dans le fichier des éléments et non pas dans l'ordre correspondant à leur numérotation proprement dite. C'est tout comme si les éléments subissaient une renumérotation selon la place qu'ils occupent dans le fichier des éléments.

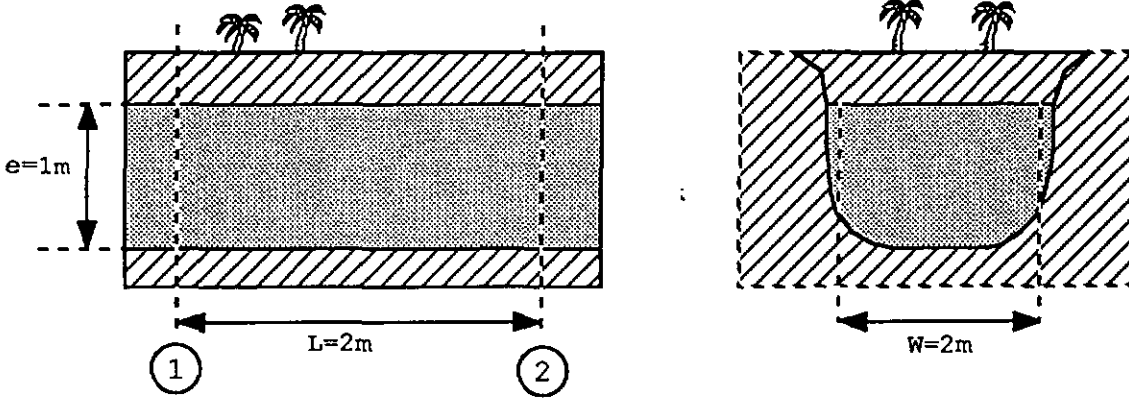


Figure 4.7 : Exemple 4.1. Aquifère captif avec écoulement hydrodynamique permanent.

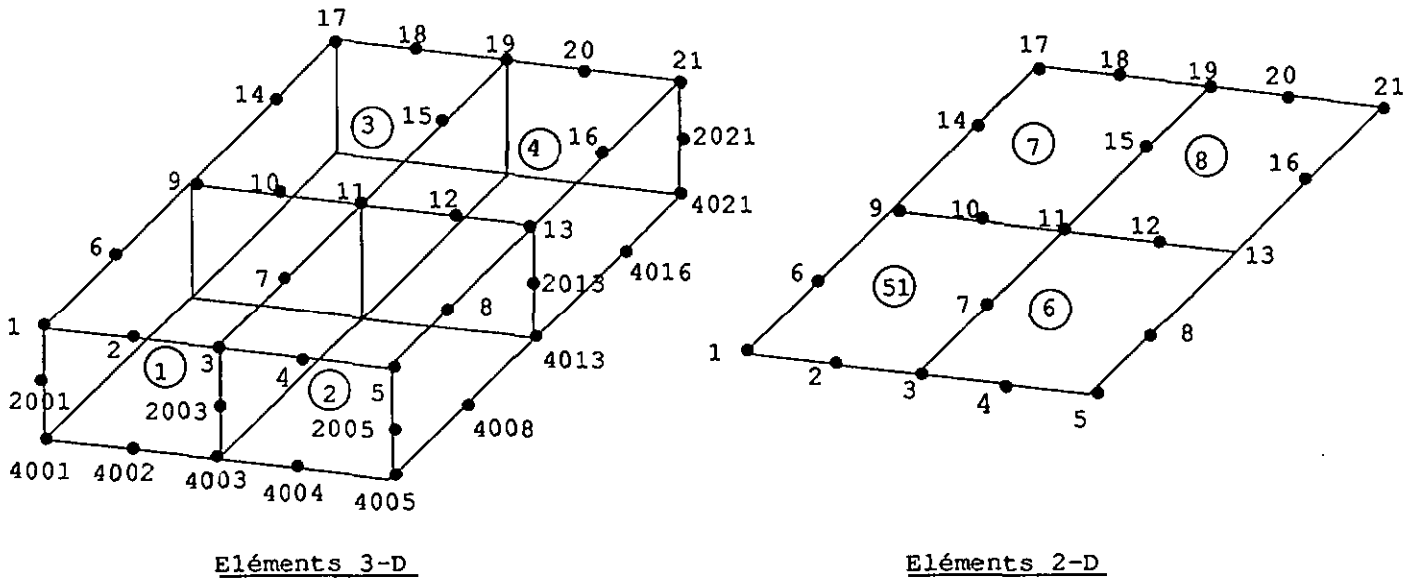


Figure 4.8 : Subdivision du domaine de l'exemple 4.1 en éléments finis.

Cette remarque est très importante. Elle permet d'une part, de ne pas se soucier de la numérotation des éléments lors de la discrétisation, et, d'autre part, d'en rajouter à volonté, mais elle oblige gestion minutieuse du fichier des éléments afin de minimiser la largeur du front. Des exemples assez expressifs illustrent cette idée du front minimum dans la section 3.6 du chapitre 3.

4.2 Description du logiciel TRANS3

Le programme TRANS3 a été conçu de façon modulaire en allant du haut vers le bas. Grâce à ce type de structure, le programme est plus simple à suivre et à comprendre, et par surcroît plus facile à modifier et à optimiser. Les relations verticales et horizontales entre les différents modules sont représentés par l'organigramme de la Figure 4.9. Puisque les principales variables et les listings sont consignés dans l'Annexe B, nous donnerons ici une description plutôt brève des différentes sous-routines du programme.

TRANS3 a été écrit dans le langage FORTRAN 77 et le programme a tourné pour la première fois sur VAX 780 ou VAX 750 de l'université de Neuchâtel en utilisant des facilités FORTRAN VAX non standard pour l'optimiser. Ensuite, il a fallu le rendre standard en enlevant toutes les facilités VAX (par exemple boucle DO WHILE). Ce souci de transportabilité était nécessaire pour pouvoir faire tourner TRANS3 sur le super ordinateur CRAY-1S de l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (E.P.F.L). Le CRAY étant un ordinateur vectoriel, TRANS3 a dû subir quelques modifications pour éviter certaines dépendances qui faussent les calculs dans les boucles DO les plus intérieures, lors de la vectorisation automatique. Cependant, pour des raisons de manque de temps, TRANS3 n'a pas été entièrement vectorisé. En effet, certaines opérations matricielles sont encore lourdement scalaires. Malgré cette non-optimisation vectorielle, le gain de temps CPU (Computeur Program Unit) est considérable, comparativement au VAX.

Actuellement TRANS3 tourne aussi bien sur le CRAY-2 (qui a pris la relève du CRAY-1S, sous UNICOS) de l'E.P.F.L. que sur les VAX 785, VAX 6320 et VAX 8530 sous UNIX de l'université de Neuchâtel.

Selon l'ordinateur sur lequel on désire exécuter TRANS3, les procédures de commande diffèrent. Elles affectent les noms de fichiers aux unités logiques, soumettent le travail à l'exécution, puis rappatrient le fichier de résultats. Les listings des fichiers de commande VAX et CRAY-2 sont présentés en Annexe B.

Le programme principal TRANS3 ouvre les fichiers, appelle les sous-routines de premier niveau et écrit les paramètres de contrôle dans le fichier de résultats. Les fichiers suivants sont utilisés par TRANS3.

FIELM : fichier d'éléments (fichier formaté);
 FICOR : fichier de coordonnées (fichier formaté);
 FIPAR : fichier de paramètres (fichier formaté);
 FIPOT : fichier de potentiels (fichier formaté);
 FIINI : fichier de conditions initiales (fichier formaté);

FIDST : fichier temporaire non formaté binaire à accès séquentiel. Il contient les vecteurs LVB, LVBIIV et ICODE, résultant de l'élimination symbolique de la sous-routine CODESYM;

FIMAT : fichier temporaire séquentiel non formaté (binaire). Il contient le vecteur DOMINF et les matrices PMAT, DMAT et CMAT calculées par la sous-routine MATELM;

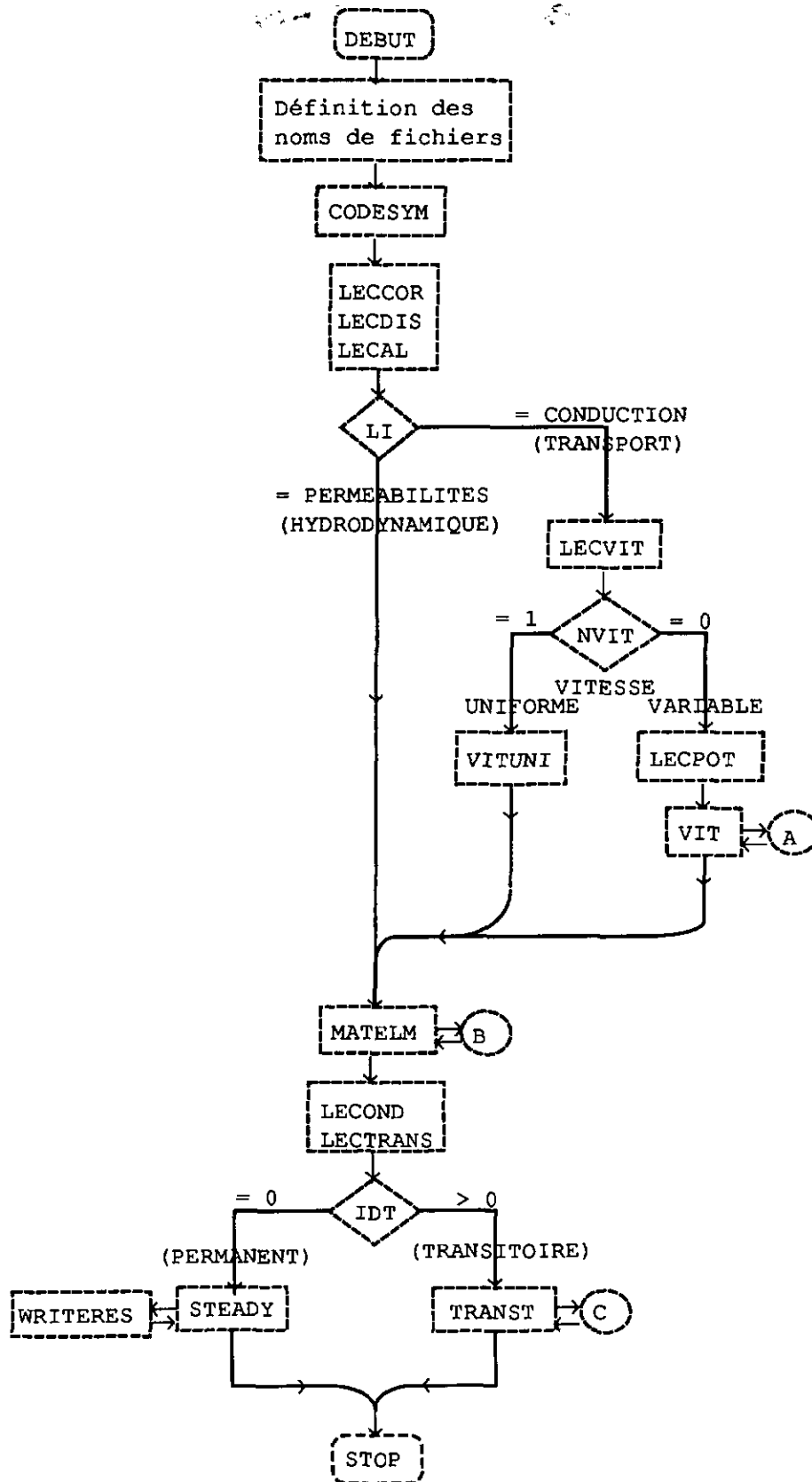


Figure 4.9a : Organigramme du programme TRANS3.

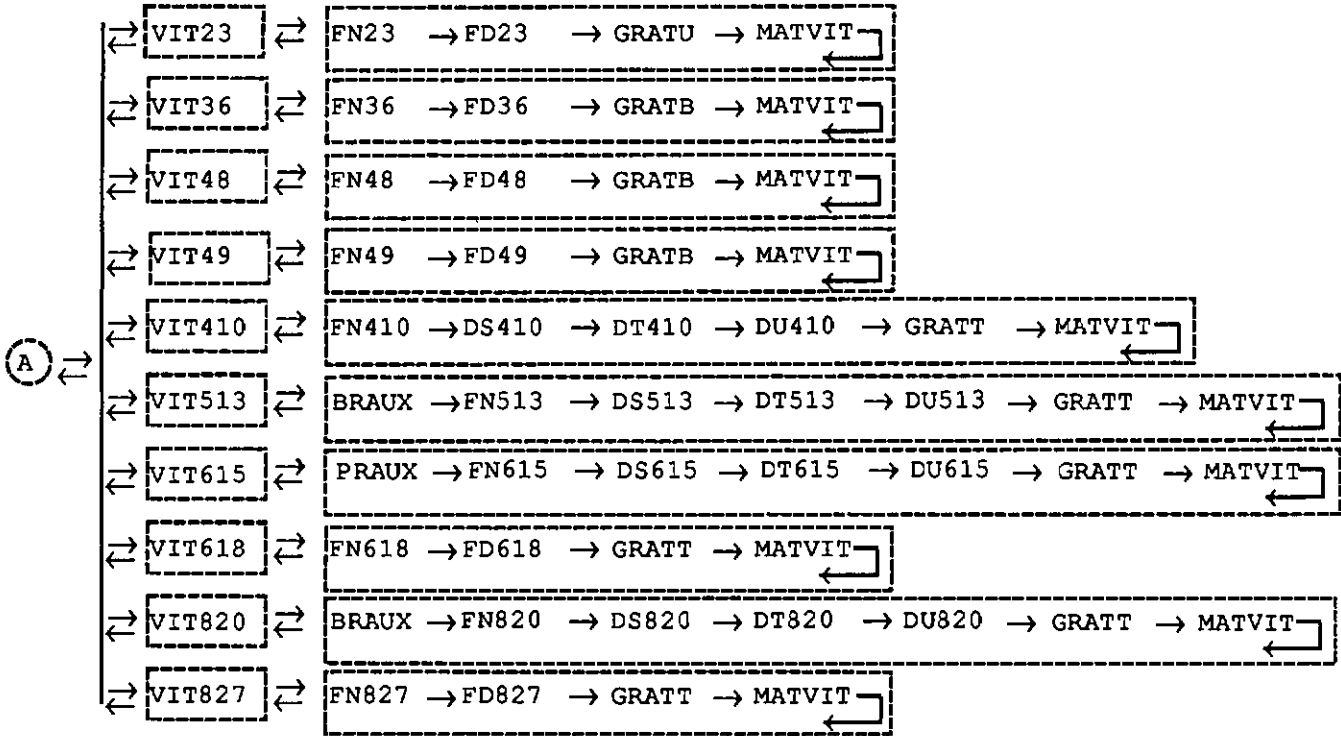


Figure 4.9b : Organigramme de la sous-routine VIT.

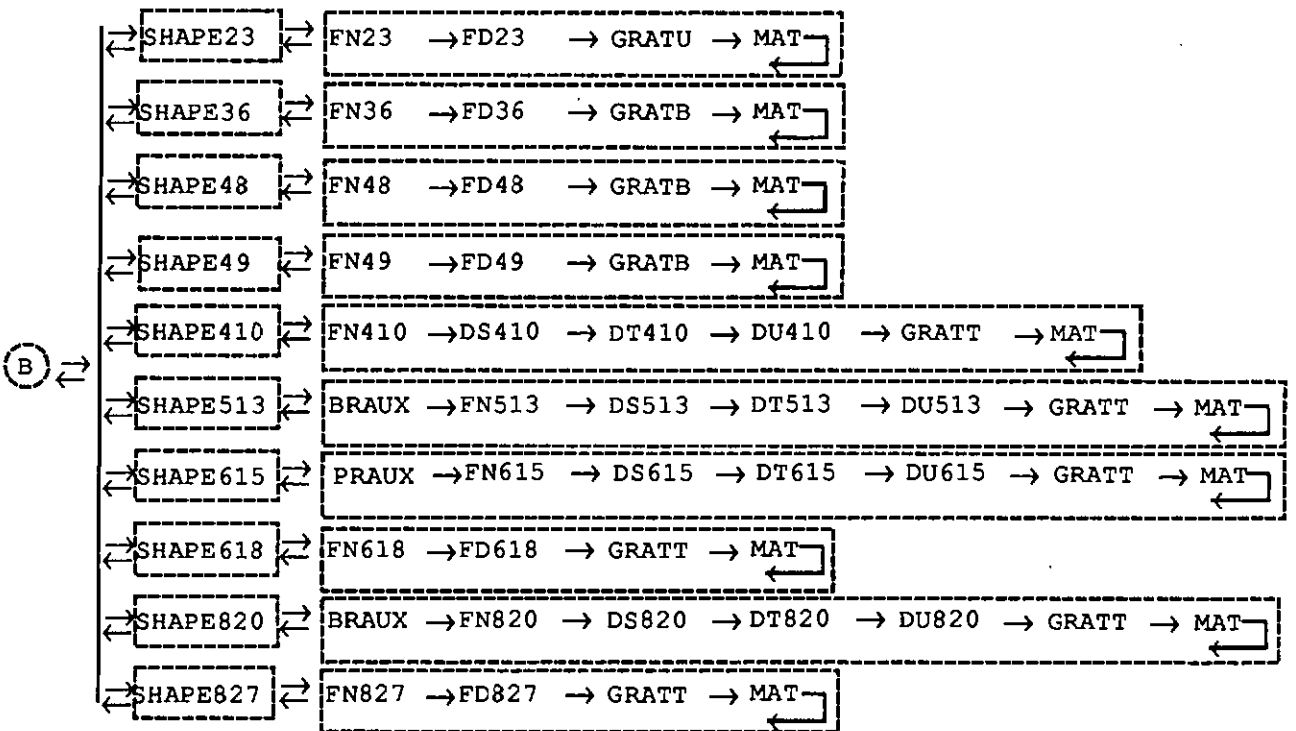


Figure 4.9c : Organigramme de la sous-routine MATELM

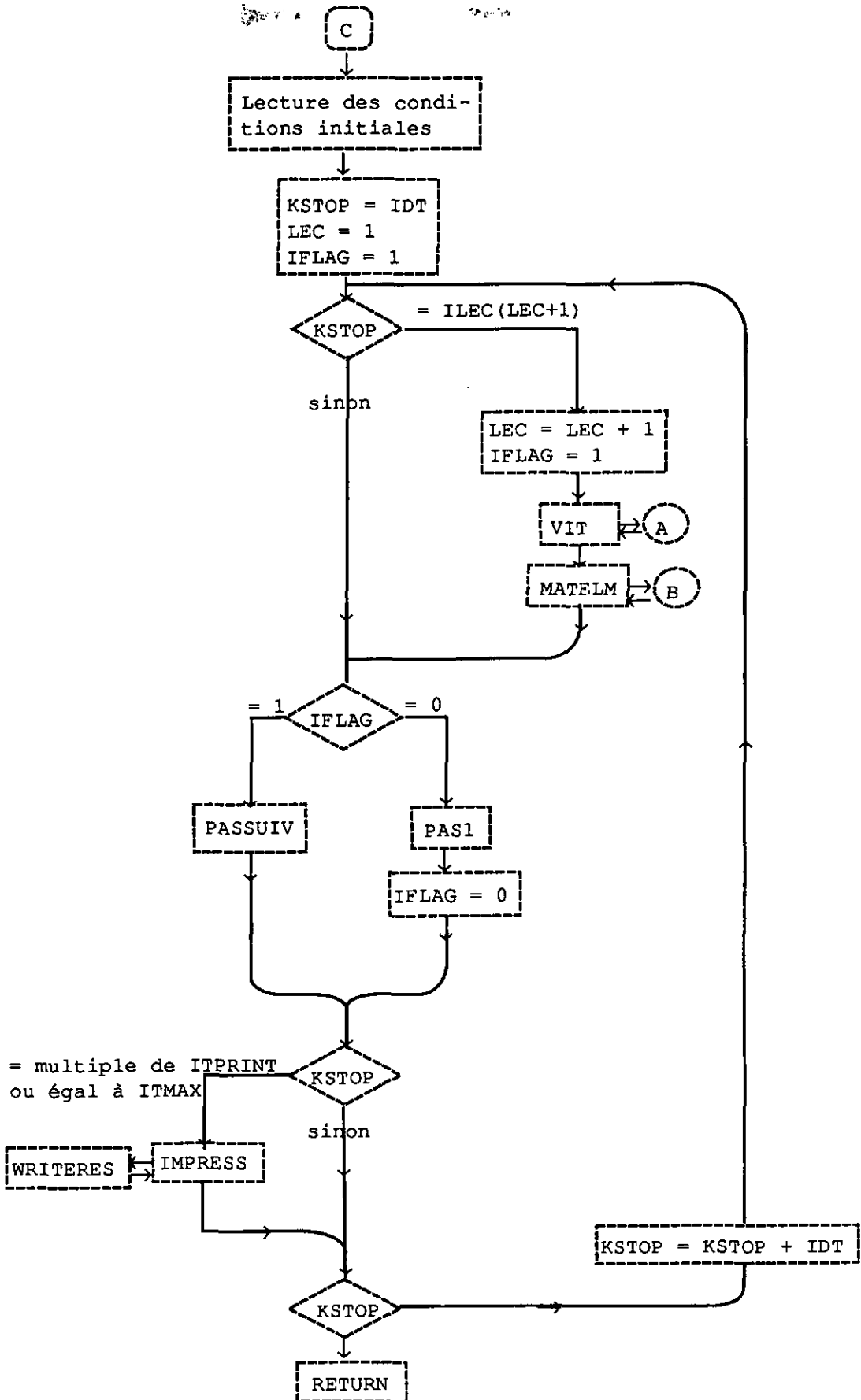


Figure 4.9d : Organigramme de la sous-routine TRANST.

FIEQU : fichier temporaire à accès direct non formaté (binaire) contenant les équations éliminées soit lors du calcul des vitesses (sous-routine VIT), soit lors du calcul de la charge (sous-routine STEADY, PAS1 ou PASSUIV);

FIRES : fichier de résultats (fichier formaté);

Présentement, les dimensions maximum de TRANS3 sont pour un réseau d'éléments finis ayant 10'000 nœuds (IV3 = 10'000) avec une numérotation ne dépassant pas 20'000 (IV1 = 20'000). On peut prévoir jusqu'à 30 classes de perméabilité ou de conduction et porosités (IV2 = 30). On peut faire varier les conditions aux limites, l'alimentation distribuée et les vitesses pour une simulation transitoire jusqu'à 52 fois (IV4 = 52). Selon les besoins, ces différentes valeurs peuvent être changées, mais il faut veiller à ne pas dépasser le quota de mémoires virtuelles à disposition pour la compilation et l'édition de lien.

Plusieurs matrices de nombres réels en double précision ont été dimensionnées à 20'000 lignes et 52 colonnes pour permettre un stockage de 52 épisodes de variations des conditions hydrauliques, pendant toute la période transitoire. Si l'on se satisfait de 12 changements et que les matrices sont redimensionnées à (20'000, 12), cela libèrera alors par matrice, 800'000 places de réels en double précision (!), qui permettraient d'augmenter certains autres vecteurs ou matrices. Ainsi, selon la taille du problème à traiter, on peut accommoder les valeurs des paramètres IV1, IV2, IV3 et IV4. Ces paramètres sont des constantes qui figurent dans la déclaration "PARAMETER" du programme principal et de quelques sous-routines; ce qui facilite leur modification.

La lecture des fichiers d'entrée se fait à l'aide des sous-routines suivantes :

- LECCOR : lecture du fichier des coordonnées;
- LECDIS : lecture des perméabilités ou des conductions et des porosités du fichier des paramètres;
- LECAL : lecture des alimentations distribuées du fichier des paramètres;
- LECCOND : lecture des conditions nodales du fichier des paramètres;
- LECTRANS : lecture des paramètres temporels du fichier des paramètres;
- LECVIT : lecture des paramètres régissant le vecteur vitesse (fichier des paramètres);
- LECPOT : Lecture du fichier des potentiels.

Le fichier des conditions initiales est lu au début de l'exécution de la sous-routine TRANS.

Les calculs sont effectués par les routines suivantes :

- CODESYM : réalise l'élimination symbolique et génère les vecteurs LVBI4 et ICODE; lit le fichier des éléments et écrit les vecteurs LVB, LVBI4 et ICODE dans le fichier de sortie temporaire FIDST.
- VIT : Calcule les vitesses dans les directions x, y et z en utilisant l'intégration numérique sur chaque élément, et en résolvant par la méthode frontale les systèmes d'équations (2.88a, 2.88b et 2.88c). Les fichiers FIELM, FIDST et FIEQU sont utilisés et les vecteurs vitesses sont gardés en mémoire.

- VITUNI : affecte les valeurs VXX, VYY et VZZ constantes lues par LECVIT à tous les nœuds du modèle; aucun calcul n'est fait.
- MATELM : calcule les vecteurs et matrices élémentaires DOMINF, DMAT, CMAT et PMAT, et les stocke dans le fichier FIMAT; effectue les intégrations numériques sur chaque élément; requiert les coordonnées globales, les vecteurs vitesses, les valeurs de perméabilité, porosité et conduction pour chaque classe. On notera que le vecteur DOMINF représente le domaine d'influence de chaque point nodal d'un élément donné. Ce domaine d'influence est une longueur pour un élément 1-D, une surface pour un élément 2-D et un volume pour un élément 3-D.
- STEADY : assemble, élimine et résoud les équations des éléments par la méthode frontale décrite au chapitre 3, pour un état permanent; requiert comme données d'entrée, les conditions nodales, les alimentations distribuées et les vecteurs et matrices LVB, LVBIV et ICODE (de FIDST) et DONINF, DMAT et CMAT (de FIMAT); stocke les équations dans FIEQU et garde les résultats calculés C et Q en mémoire pour les imprimer ensuite en appelant la sous-routine WRITERES.
- TRANST : lit les conditions initiales dans FIINI; assemble et élimine le vecteur et les matrices élémentaires DOMINF, DMAT, CMAT et PMAT grâce à la sous-routine PAS1, lors du premier pas transitoire. Pour les pas suivants il suffit de modifier le vecteur de droite RHS, en lui assemblant les contributions de PMAT et de DOMINF. L'élimination portera uniquement sur le vecteur RHS. C'est la sous-routine PASSUIV qui procède à cette économie de calculs. A chaque changement de champ de vitesses, il faudra recalculer le vecteur DOMINF et les matrices DMAT, CMAT et PMAT, refaire un assemblage et une élimination complète par PAS1, puis continuer les autres pas transitoires avec PASSUIV. TRANST effectue la résolution inverse, contrôle les impressions des résultats en surveillant les paramètres ITPRINT et ITMAX, et appelle les sous-routines IMPRESS et WRITERES pour commander l'impression dans le fichier de résultats.
- VIT*** : Ces sous-routines contiennent les coordonnées locales des points d'intégration, et effectuent l'intégration numérique pour les différents types d'éléments. Dans la notation "VIT***" ou "SHAPE***", "VIT" signifie "vitesse" et "SHAPE" signifie "forme". Le premier chiffre * indique le nombre de sommets, et les deux derniers représentent le nombre de points nodaux de l'élément correspondant; elles retournent les valeurs des vitesses nodales, en ce qui concerne VIT***, et les valeurs intégrées de DOMINF, DMAT, CMAT et PMAT de chaque élément, pour SHAPE***.
- FN*** : calcule les valeurs numériques des fonctions d'interpolation, N_n , pour un ensemble donné de coordonnées locales (ici, ce sont les coordonnées locales des points d'intégration de Gauss). Les nombres "****" indiquent le type d'élément.
- FD*** : sont des sous-routines calculant les valeurs numériques de dérivées $\partial N_n / \partial s$ pour un ensemble donné de coordonnées locales s (ici ce sont les points de Gauss).
- BS***
- DT***
- DU***

- GRATU : calcule les valeurs numériques de la matrice des gradients B pour un élément 1-D dans un espace global 3-D, en utilisant les "dérivées locales" $\partial N_n e / \partial s$.
- GRATB : calcule les valeurs numériques de la matrice des gradients B pour un élément 2-D dans un espace global 3-D.
- GRATT : calcule les valeurs numériques de la matrice des gradients B pour un élément 3-D dans un espace global 3-D.
- MAT : calcule les valeurs numériques du vecteur DOMINF et des matrices DMAT, CMAT et PMAT à un point d'intégration donné. Cette sous-routine requiert en entrée : les valeurs numériques des fonctions d'interpolation obtenues par FN***; les valeurs numériques de la matrice des gradients obtenues par GRATU, GRATB ou GRATT; le tenseur de perméabilité [K] ou de conduction [D] et les vecteurs vitesses nodales élémentaires pour l'élément en traitement. Le vecteur DOMINF et les matrices DMAT, CMAT et PMAT élémentaires sont les arguments retournés à SHAPE***.
- MATVIT : calcule les valeurs des vecteurs vitesses nodales élémentaires à un point d'intégration donné. Cette sous-routine requiert en entrée : les valeurs numériques des fonctions d'interpolation obtenues par FN***, les valeurs numériques de la matrice des gradients obtenue par GRATU, GRATB ou GRATT, et le tenseur de perméabilité de l'élément en traitement. Les matrices GMAT, VXMAT, VYMAT et VZMAT, élémentaires, sont les arguments retournés à VIT***.

4.3 Procédures de commandes VAX

La procédure de commandes TRANS3.COM (écrite en langage de commande DCL et présenté en Annexe B.3) permet à l'utilisateur de définir interactivement les fichiers d'entrée et de sortie. Elle lui offre le choix de soumettre l'exécution en mode interactif ou en mode batch en répondant aux questions apparaissant à l'écran du terminal.

TRANS3.COM appelle une autre procédure de commande, TRANS3A.COM (voir Annexe B.3), qui effectue les assignations des unités physiques (noms des fichiers) aux unités logiques définies dans le programme TRANS3.FOR.

Si les procédures de commandes ne sont pas utilisées, les assignations doivent être faites au préalable par l'utilisateur lui-même.

4.4. Procédure de commande CRAY.

La procédure de commande TRANS3.JOB (écrite en UNICOS, (Unix Cray Operating System), et représentée en Annexe B.3) permet à l'utilisateur de soumettre TRANS3 en exécution batch au CRAY.

L'utilisateur doit y spécifier :

- le "username" et le "password" qui lui sont réservés sur CRAY;
- le transfert des fichiers de VAX vers CRAY;
- la compilation, l'édition de lien et l'exécution de TRANS3;
- et le transfert du fichier des résultats de CRAY vers VAX.

5. Vérification de TRANS3

La vérification consiste à comparer les résultats de l'application de TRANS3 aux solutions analytiques, si elles existent, ou aux résultats numériques d'autres programmes de calcul ayant fait l'objet de vérification et validation.

Tous les exemples présentés dans [KIRALY, 1985] ont été refaits pour s'assurer que, lors de la modification de FEM301, les résultats d'un calcul permanent étaient restés inchangés. C'était bien le cas. Nous renvoyons le lecteur à cette référence pour plus de précisions. Il nous reste donc à vérifier les calculs pour un cas de transport, et pour une simulation transitoire.

A cette fin, nous allons prendre un exemple extrait de [JAVANDEL, et al, 1984], admettant une solution analytique. Nous illustrerons simultanément le transport et le transitoire.

5.1 Solution analytique d'un problème unidimensionnel

Une gamme complète de solutions analytiques unidimensionnelles d'équations de transport conductif-advectif de soluté, a été récemment publiée par [VAN GENUCHTEN and ALVES, 1982]. Nous allons présenter un modèle unidimensionnel, qui consiste en un milieu poreux, isotrope, homogène, infiniment long soutenant un écoulement uniforme permanent avec une vitesse de filtration, V . Nous injectons un élément chimique particulier à une extrémité pendant une période de temps t_0 de sorte que la concentration à l'entrée soit une fonction exponentielle du temps. La valeur de cette concentration chimique peut être obtenue, à n'importe quel temps t et à une distance x de l'extrémité d'injection, en tenant compte de la décroissance et de l'adsorption, par la résolution de l'ensemble suivant d'équations :

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - V \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda RC = R \frac{\partial C}{\partial t} \quad (5.1)$$

où D , est le coefficient de conduction (dispersion-diffusion);
 C , est la concentration du soluté;
 V , est la vitesse de filtration de l'eau;
 $\lambda = \ln(2/(\text{demi-vie}))$ est la constante de décroissance radioactive;
 $R = [1 + \rho_b K_d/m]$, est le facteur de retardation;
 ρ_b , est la densité "bulk" du solide;
 K_d , est le coefficient de distribution de la concentration du polluant;
 m , est la porosité efficace;

avec, comme condition initiale,

$$C(x,t) = 0 \quad t = 0 \quad (5.2)$$

ce qui signifie que le système est initialement vide de ce polluant; et avec, comme condition aux limites,

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial x} = 0 \quad x = \infty \quad (5.3)$$

$$[-D \frac{\partial C}{\partial x} + VC]_{x=0} = Vf(t) \quad (5.4)$$

ce qui indique que le gradient de concentration à l'extrémité opposée à l'injection demeure inchangé; la concentration à l'entrée prend la forme suivante :

$$\begin{aligned} f(t) &= C_0 \exp(-\alpha t) & 0 < t \leq t_0 \\ f(t) &= 0 & t > t_0 \end{aligned} \quad (5.5)$$

où C_0 et α sont constants. L'équation (5.4) montre que le flux de masse du polluant à l'extrémité d'injection à tout instant, est équivalent au flux total du soluté charrié par conduction (dispersion-diffusion) et advection.

En utilisant la technique des transformations de Laplace, VAN GENUCHTEN, 1982, a résolu l'ensemble des équations ci-dessus pour arriver aux résultats suivants :

$$\begin{aligned} C(x,t) &= A(x,t) & 0 < t \leq t_0 \\ C(x,t) &= A(x,t) - A(x,t-t_0) \exp(-\alpha t_0) & t > t_0 \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$\text{où, } A(x,t) = C_0 \exp(-\alpha t_0) A_1(x,t) \quad \alpha \neq \lambda$$

$$A(x,t) = C_0 \exp(-\alpha t_0) A_2(x,t) \quad \alpha = \lambda \quad (5.7)$$

$$\begin{aligned} A_1(x,t) &= V/(V+U) \exp[x(V-U)/2D] \operatorname{erfc}[(Rx-Ut)/2(DRt)]^{1/2} \\ &+ V/(V-U) \exp[x(V+U)/2D] \operatorname{erfc}[(Rx+Ut)/2(DRt)]^{1/2} \\ &+ V^2/2DR(\lambda-\alpha) \exp[xV/D] \operatorname{erfc}[(Rx+Vt)/2(DRt)]^{1/2} \end{aligned} \quad (5.8)$$

$$\text{avec } U = [V^2 + 4DR(\lambda-\alpha)]^{1/2} \quad (5.9)$$

$$\begin{aligned} A_2(x,t) &= 1/2 \operatorname{erfc}[(Rx-Vt)/2(DRt)]^{1/2} + [V^2t/\pi DR]^{1/2} \operatorname{erfc}[-(Rx-Vt)^2/4(DRt)] \\ &- 1/2 [1 + Vx/D + V^2t/DR] \exp[Vx/D] \operatorname{erfc}[(Rx+Vt)/2(DRt)]^{1/2} \end{aligned} \quad (5.10)$$

Dans VAN GENUCHTEN, 1982, un programme d'ordinateur a été fourni en Annexe B pour permettre de calculer le rapport C/C_0 (équations 5.6 à 5.10) pour un point donné en aval de la source de contamination, et à un temps donné. L'annexe A dudit ouvrage donne une liste de séries de tables de concentration adimensionnelle, C/C_0 , en fonction de la vitesse moyenne de filtration de l'eau, du coefficient de dispersion, du facteur de retardation, de la constante de décroissance, et de la période d'activité de la source de pollution. Ces tables ont été préparées grâce au programme d'ordinateur dont il a été fait mention.

Pour $\alpha = \lambda = 0$, et $R = 1$, nous serons dans un cas de figure sans facteur de décroissance, avec une injection à concentration constante d'un soluté ne subissant pas de réactions d'adsorption ou chimiques. L'équation différentielle (5.1) gouvernant le transport de masse, devient :

$$D \partial^2 C / \partial x^2 - v \partial C / \partial x = \partial C / \partial t \quad (5.11)$$

Ce qui donne la solution suivante :

$$C/C_0 = A_3(x,t) \quad 0 < t \leq t_0$$

$$C/C_0 = A_3(x,t) - A_3(x,t-t_0) \quad t > t_0 \quad (5.12)$$

où

$$A_2(x,t) = 1/2 \operatorname{erfc}[(x-Vt)/2(Dt)^{1/2}] + [V^2t/\pi D]^{1/2} \operatorname{erfc}[-(x-Vt)^2/4(Dt)] \\ - 1/2 [1 + Vx/D + V^2t/D] \exp[Vx/D] \operatorname{erfc}[(x+Vt)/2(Dt)^{1/2}] \quad (5.13)$$

5.2 Résolution analytique d'un exemple unidimensionnel

Exemple 5.1 : Considérons un aquifère isotrope, homogène, de faible profondeur ayant une épaisseur de 10 m, et portant une vitesse moyenne de pore, uniforme et permanente de 1 m/j. Une tranchée relativement longue intercepte l'aquifère perpendiculairement à la direction de l'écoulement, Figure 5.1.

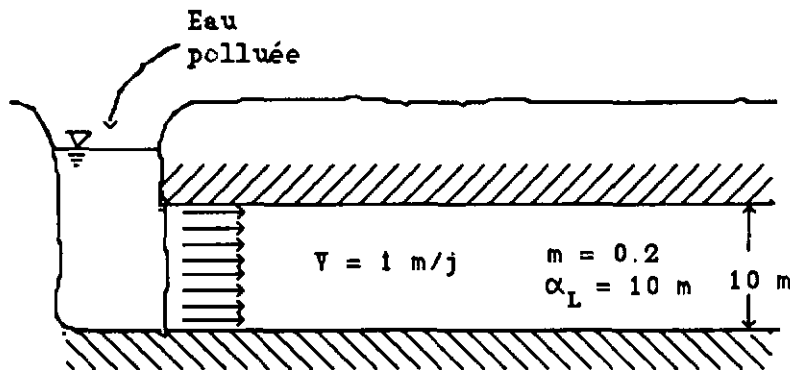


Figure 5.1 : Diagramme schématique montrant la section verticale d'un aquifère dans le sens de l'écoulement.

Un déchet chimique non réactif est versé continuellement dans la tranchée. Le flux de déchet chimique est environ de $0.1 \text{ m}^3/\text{j}$ par unité de longueur de tranchée. La concentration d'un certain constituant non réactif dans ces déchets est de $10 \text{ Kg}/\text{m}^3$. On suppose une dispersivité longitudinale de 10 m et une porosité de 0.2. Etant données ces conditions, nous allons représenter sur graphique la variation de C/C_0 versus la distance pour 1 et 2 ans après le début de l'opération. Auparavant, analysons les données.

En multipliant entre elles la vitesse de pore, 1 m/j, l'épaisseur de l'aquifère, 10 m, la porosité, 0.2, et une longueur unitaire de tranchée, nous obtenons le flux volumique par unité de longueur de tranchée : $2 \text{ m}^3/\text{j}$.

Le débit d'injection de polluant chimique donné précédemment, $0.1 \text{ m}^3/\text{j}$, représente 5% du débit de l'écoulement souterrain, de sorte que nous pouvons négliger l'accroissement de la vitesse de l'écoulement souterrain produit par l'injection, sans introduire une erreur significative.

En supposant que le mélange du polluant avec l'eau souterraine naturelle dans la tranchée est parfait, la concentration du soluté à l'étude sera calculée comme

suit : le débit de masse de ce déchet est de 1 Kg/j par unité de longueur de tranchée; le débit de l'écoulement souterrain par unité de longueur de tranchée étant de 2 m³/j, alors la concentration du soluté en question est $C_0 = 1/2$ Kg/m³ ou 500 ppm.

Le coefficient de dispersion, D , produit de la dispersivité longitudinale, α_L , par la vitesse de filtration, V , est de 10 m²/j. La concentration adimensionnelle C/C_0 pour $R = 1$, $\alpha = \lambda = 0$, $V = 1$ m/j et $D = 10$ m²/j pour des distances jusqu'à 1000 m et des temps de 1 et 2 ans, est donnée ci-dessous :

t (année)	x = 50 (m)	x = 100 (m)	x = 150 (m)	x = 200 (m)	x = 250 (m)	x = 300 (m)
1.0	.9999D+00	.9993D+00	.9950D+00	.9756D+00	.9144D+00	.7798D+00
2.0	.1000D+01	.1000D+01	.1000D+01	.1000D+01	.1000D+01	.9998D+00

t (année)	x = 400 (m)	x = 500 (m)	x = 600 (m)	x = 700 (m)	x = 800 (m)	x = 1000 (m)
1.0	.3394D+00	.5551D-01	.2806D-02	.4013D-04	.1556D-06	.4338D-13
2.0	.9971D+00	.9728D+00	.8615D+00	.5998D+00	.2811D+00	.1251D-01

La Figure 5.2 montre ces valeurs sous forme graphique.

Figure 5.2 : Concentration adimensionnelle C/C_0 versus la distance du point d'injection au bout de 1 et 2 ans de pollution constante.

Dans cet exemple nous avons négligé la diffusion moléculaire. Cette hypothèse est raisonnable car les valeurs de $(D_d\beta)$ dans l'équation 1.28b, sont généralement de l'ordre de grandeur de 10⁻⁵ m²/j. Ce qui lui permet, en toute sécurité, d'être négligé par rapport à l'ordre de grandeur de $V\alpha_L$, 10 m²/j.

5.3 Résolution numérique d'un exemple unidimensionnel

A l'aide de TRANS3, nous allons calculer la distribution de la pollution après 1 an puis 2 ans d'injection du traceur à débit constant, pour un écoulement souterrain uniforme et permanent. Le calcul transitoire ne portera donc que sur la propagation du polluant, les paramètres hydrodynamiques étant constants.

5.3.1 Discrétisation par éléments finis

Nous avons remarqué, dans la résolution analytique, que la propagation du polluant, après 2 ans, atteint légèrement un point de l'aquifère situé à une distance de 1000 m de la tranchée. Nous pouvons considérer un domaine ayant une limite amont au droit de la tranchée avec $C/C_0 = 1$, et une limite aval au-delà de 1000 m, par exemple 1200 m, avec $C/C_0 = 0$, et cela pour toute la durée transitoire de 2 ans. Ainsi le domaine rectangulaire à l'étude sera subdivisé en éléments finis rectangulaires de 100 m x 5 m, Figure 5.3.

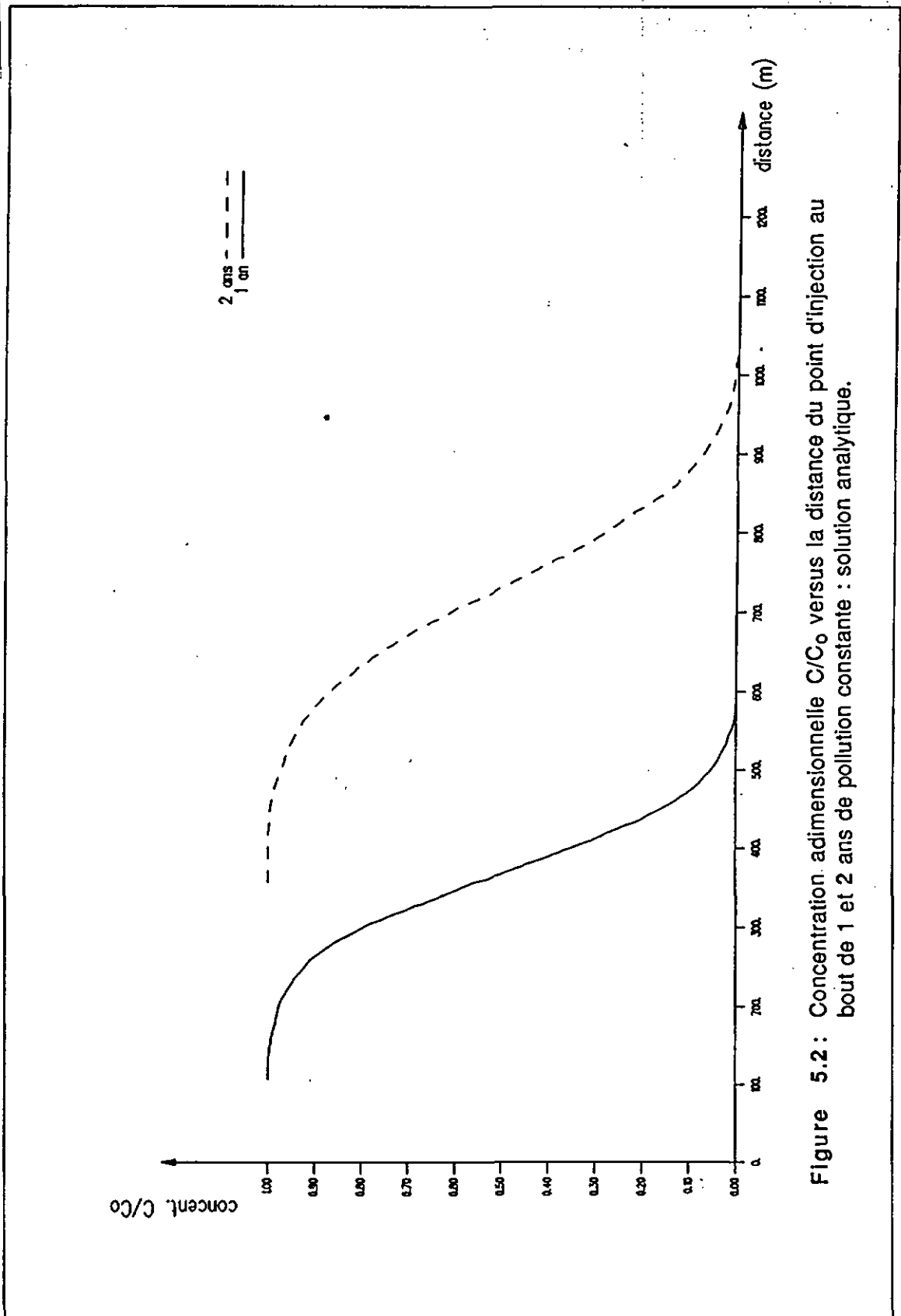


Figure 5.2: Concentration adimensionnelle C/C₀ versus la distance du point d'injection au bout de 1 et 2 ans de pollution constante : solution analytique.

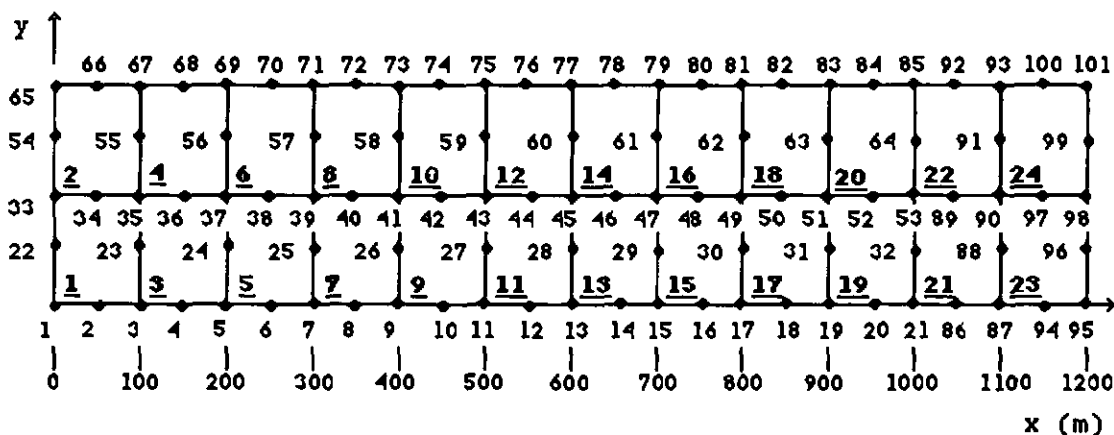


Figure 5.3 : Discretisation par éléments finis de l'exemple 5.1 : numérotation des éléments et des nœuds.

Pour effectuer une simulation de transport de masse transitoire, il nous faut quatre fichiers de données : fichiers des éléments, des coordonnées, des paramètres, des conditions initiales, et des potentiels. Le fichier des potentiels n'est requis que lorsque le champ de vitesses est variable dans l'espace et doit, par conséquent, être calculé. Cependant ce n'est pas le cas dans l'exemple 5.1. Par ailleurs, la vitesse à prendre en compte doit être celle de Darcy et non pas celle de filtration. De plus, elle doit être exprimée en m/s. La valeur à mettre dans le fichier des paramètres sera :

$$VXX = (1 \times 0.2 / 86400) \text{ m/s} = 2.314815\text{E-}6 \text{ m/s}$$

De même, le coefficient de dispersion sera :

$$D = (10 \times 0.2 / 86400) \text{ m}^2/\text{s} = 2.314815\text{E-}5 \text{ m}^2/\text{s}.$$

5.3.2 Présentation des fichiers de données et de sortie de l'exemple 5.1

a) Fichier des éléments

EXEMPLE5_1.ELE

Legende :

colonne 1 : elm

colonne 2 : mad

colonne 3 : mpa

colonne 4 : kr

colonne 5 : ar

colonnes suivantes : lvabl

ELEMENTS

1	1	1	8	4	1	2	3	23	35	34	33	22
2	1	1	8	4	33	34	35	55	67	66	65	54
3	1	1	8	4	3	4	5	24	37	36	35	23
4	1	1	8	4	35	36	37	56	69	68	67	55
5	1	1	8	4	5	6	7	25	39	38	37	24
6	1	1	8	4	37	38	39	57	71	70	69	56
7	1	1	8	4	7	8	9	26	41	40	39	25
8	1	1	8	4	39	40	41	58	73	72	71	57
9	1	1	8	4	9	10	11	27	43	42	41	26
10	1	1	8	4	41	42	43	59	75	74	73	58
11	1	1	8	4	11	12	13	28	45	44	43	27

12	1	1	8	4	43	44	45	60	77	76	75	59
13	1	1	8	4	13	14	15	29	47	46	45	28
14	1	1	8	4	45	46	47	61	79	78	77	60
15	1	1	8	4	15	16	17	30	49	48	47	29
16	1	1	8	4	47	48	49	62	81	80	79	61
17	1	1	8	4	17	18	19	31	51	50	49	30
18	1	1	8	4	49	50	51	63	83	82	81	62
19	1	1	8	4	19	20	21	32	53	52	51	31
20	1	1	8	4	51	52	53	64	85	84	83	63
21	1	1	8	4	21	86	87	88	90	89	53	32
22	1	1	8	4	53	89	90	91	93	92	85	64
23	1	1	8	4	87	94	95	96	98	97	90	88
24	1	1	8	4	90	97	98	99	101	100	93	91

b) Fichier des coordonnées

EXEMPLE5_1.XYZ

Legende :

colonne 1 : nic (numero des noeuds)
colonne 2 : x[nic]
colonne 3 : y[nic]
colonne 4 : z[nic]

COORDONNEES

	100.0	1.0	1.0	/FACX,FACY,FACZ
1		0.000		0.000 0.000
2		0.500		0.000 0.000
3		1.000		0.000 0.000
4		1.500		0.000 0.000
5		2.000		0.000 0.000
6		2.500		0.000 0.000
7		3.000		0.000 0.000
8		3.500		0.000 0.000
9		4.000		0.000 0.000
10		4.500		0.000 0.000
11		5.000		0.000 0.000
12		5.500		0.000 0.000
13		6.000		0.000 0.000
14		6.500		0.000 0.000
15		7.000		0.000 0.000
16		7.500		0.000 0.000
17		8.000		0.000 0.000
18		8.500		0.000 0.000
19		9.000		0.000 0.000
20		9.500		0.000 0.000
21		10.000		0.000 0.000
22		0.000	2.500	0.000
23		1.000	2.500	0.000
24		2.000	2.500	0.000
25		3.000	2.500	0.000
26		4.000	2.500	0.000
27		5.000	2.500	0.000
28		6.000	2.500	0.000
29		7.000	2.500	0.000
30		8.000	2.500	0.000
31		9.000	2.500	0.000
32		10.000	2.500	0.000
33		0.000	5.000	0.000
34		0.500	5.000	0.000
35		1.000	5.000	0.000
36		1.500	5.000	0.000
37		2.000	5.000	0.000
38		2.500	5.000	0.000
39		3.000	5.000	0.000
40		3.500	5.000	0.000

5. Vérification de TRANS3

41	4.000	5.000	0.000
42	4.500	5.000	0.000
43	5.000	5.000	0.000
44	5.500	5.000	0.000
45	6.000	5.000	0.000
46	6.500	5.000	0.000
47	7.000	5.000	0.000
48	7.500	5.000	0.000
49	8.000	5.000	0.000
50	8.500	5.000	0.000
51	9.000	5.000	0.000
52	9.500	5.000	0.000
53	10.000	5.000	0.000
54	0.000	7.500	0.000
55	1.000	7.500	0.000
56	2.000	7.500	0.000
57	3.000	7.500	0.000
58	4.000	7.500	0.000
59	5.000	7.500	0.000
60	6.000	7.500	0.000
61	7.000	7.500	0.000
62	8.000	7.500	0.000
63	9.000	7.500	0.000
64	10.000	7.500	0.000
65	0.000	10.000	0.000
66	0.500	10.000	0.000
67	1.000	10.000	0.000
68	1.500	10.000	0.000
69	2.000	10.000	0.000
70	2.500	10.000	0.000
71	3.000	10.000	0.000
72	3.500	10.000	0.000
73	4.000	10.000	0.000
74	4.500	10.000	0.000
75	5.000	10.000	0.000
76	5.500	10.000	0.000
77	6.000	10.000	0.000
78	6.500	10.000	0.000
79	7.000	10.000	0.000
80	7.500	10.000	0.000
81	8.000	10.000	0.000
82	8.500	10.000	0.000
83	9.000	10.000	0.000
84	9.500	10.000	0.000
85	10.000	10.000	0.000
86	10.500	0.000	0.000
87	11.000	0.000	0.000
88	11.000	2.500	0.000
89	10.500	5.000	0.000
90	11.000	5.000	0.000
91	11.000	7.500	0.000
92	10.500	10.000	0.000
93	11.000	10.000	0.000
94	11.500	0.000	0.000
95	12.000	0.000	0.000
96	12.000	2.500	0.000
97	11.500	5.000	0.000
98	12.000	5.000	0.000
99	12.000	7.500	0.000
100	11.500	10.000	0.000
101	12.000	10.000	0.000

<<<

c) Fichier des paramètres

```

EXEMPLE5_1.PAR
CONDUCTION ET POROSITE
 1  2.314815E-5 / [m2/s]
 1  0.2
ALIMENTATIONS DISTRIBUEES
 1 / NLEC
 1  0.0 /
INCREMENT TEMPOREL
 5  360  720 / [j]
VITESSES
 1  2.314815E-6  0.0  0.0 / NVIT, VXX, VYY, VZZ [m/s]
CONDITIONS NODALES
 1  -1  1.0
22  -1  1.0
33  -1  1.0
54  -1  1.0
65  -1  1.0
95  -1  0.0
96  -1  0.0
98  -1  0.0
99  -1  0.0
101 -1  0.0

```

d) Fichier des conditions initiales

```

EXEMPLES_1.INI
*****
* "TRANS3" - MODELE A ELEMENTS FINIS *
* TRANSPORT CONDUCTIF/ADVECTIF PERMANENT OU TRAN- *
* SITOIRE - TRIDI . *
* CENTRE D'HYDROGEOLOGIE (UNIVERSITE DE NEUCHATEL) *
* VERSION DU 09-04-1989 *
*****

FICHIERS DES DONNEES:
***** EXEMPLES_1.ELE
EXEMPLES_1.XYZ
EXEMPLES_1.PAR

PARAMETRES DE CONTROLE:
*****
MKNIC= 1 MKNIC= 101 MKNQ= 1 MKNQ= 1
MKLM= 24 MKNODE= 101 MKLONG= 10

VALEURS DES CLASSES DE CONDUCTION ET ET DE POROSITE
*****

 1      0.11574E-03  0.00000E+00  0.00000E+00
          0.11574E-03  0.00000E+00
          0.11574E-03
 1      0.2000000E+00

ALIMENTATIONS DISTRIBUEES
*****

 1  0.0000000E+00

VITESSE
*****

 1  0.1157410E-04  0.0000000E+00  0.0000000E+00

```

CONDITIONS NODALES

1	1 -1	0.100000E+01
2	22 -1	0.100000E+01
3	33 -1	0.100000E+01
4	54 -1	0.100000E+01
5	65 -1	0.100000E+01
6	95 -1	0.000000E+00
7	96 -1	0.000000E+00
8	98 -1	0.000000E+00
9	99 -1	0.000000E+00
10	101 -1	0.000000E+00

INCREMENT TEMPOREL, TPRINT, TMAX

0	360	720
---	-----	-----

!RESULTATS CALCULES!

1 -1	0.000	0.5623478E-11	2 0	0.000	0.000000E+00	3 0	0.000	0.000000E+00
4 0	0.000	0.000000E+00	5 0	0.000	0.000000E+00	6 0	0.000	0.000000E+00
7 0	0.000	0.000000E+00	8 0	0.000	0.000000E+00	9 0	0.000	0.000000E+00
10 0	0.000	0.000000E+00	11 0	0.000	0.000000E+00	12 0	0.000	0.000000E+00
13 0	0.000	0.000000E+00	14 0	0.000	0.000000E+00	15 0	0.000	0.000000E+00
16 0	0.000	0.000000E+00	17 0	0.000	0.000000E+00	18 0	0.000	0.000000E+00
19 0	0.000	0.000000E+00	20 0	0.000	0.000000E+00	21 0	0.000	0.000000E+00
22 -1	0.000	0.2249391E-10	23 0	0.000	0.000000E+00	24 0	0.000	0.000000E+00
25 0	0.000	0.000000E+00	26 0	0.000	0.000000E+00	27 0	0.000	0.000000E+00
28 0	0.000	0.000000E+00	29 0	0.000	0.000000E+00	30 0	0.000	0.000000E+00
31 0	0.000	0.000000E+00	32 0	0.000	0.000000E+00	33 -1	0.000	0.1124696E-10
34 0	0.000	0.000000E+00	35 0	0.000	0.000000E+00	36 0	0.000	0.000000E+00
37 0	0.000	0.000000E+00	38 0	0.000	0.000000E+00	39 0	0.000	0.000000E+00
40 0	0.000	0.000000E+00	41 0	0.000	0.000000E+00	42 0	0.000	0.000000E+00
43 0	0.000	0.000000E+00	44 0	0.000	0.000000E+00	45 0	0.000	0.000000E+00
46 0	0.000	0.000000E+00	47 0	0.000	0.000000E+00	46 0	0.000	0.000000E+00
49 0	0.000	0.000000E+00	50 0	0.000	0.000000E+00	51 0	0.000	0.000000E+00
52 0	0.000	0.000000E+00	53 0	0.000	0.000000E+00	54 -1	0.000	0.2249391E-10
55 0	0.000	0.000000E+00	56 0	0.000	0.000000E+00	57 0	0.000	0.000000E+00
58 0	0.000	0.000000E+00	59 0	0.000	0.000000E+00	60 0	0.000	0.000000E+00
61 0	0.000	0.000000E+00	62 0	0.000	0.000000E+00	63 0	0.000	0.000000E+00
64 0	0.000	0.000000E+00	65 -1	0.000	0.5623478E-11	66 0	0.000	0.000000E+00
67 0	0.000	0.000000E+00	68 0	0.000	0.000000E+00	69 0	0.000	0.000000E+00
70 0	0.000	0.000000E+00	71 0	0.000	0.000000E+00	72 0	0.000	0.000000E+00
73 0	0.000	0.000000E+00	74 0	0.000	0.000000E+00	75 0	0.000	0.000000E+00
76 0	0.000	0.000000E+00	77 0	0.000	0.000000E+00	78 0	0.000	0.000000E+00
79 0	0.000	0.000000E+00	80 0	0.000	0.000000E+00	81 0	0.000	0.000000E+00
82 0	0.000	0.000000E+00	83 0	0.000	0.000000E+00	84 0	0.000	0.000000E+00
85 0	0.000	0.000000E+00	86 0	0.000	0.000000E+00	87 0	0.000	0.000000E+00
88 0	0.000	0.000000E+00	89 0	0.000	0.000000E+00	90 0	0.000	0.000000E+00
91 0	0.000	0.000000E+00	92 0	0.000	0.000000E+00	93 0	0.000	0.000000E+00
94 0	0.000	0.000000E+00	95 -1	0.000	-0.9645089E-05	96 -1	0.000	-0.3858036E-04
97 0	0.000	0.000000E+00	98 -1	0.000	-0.1929018E-04	99 -1	0.000	-0.3858036E-04
100 0	0.000	0.000000E+00	101 -1	0.000	-0.9645089E-05			

SOMME DES DEBITS = -0.1157410E-03

e) Fichier des résultats

```
*****
* "TRANS3" - MODELE A ELEMENTS FINIS *
* TRANSPORT CONDUCTIF/ADVECTIF PERMANENT OU TRAN- *
* SITOIRE - TRIDI . *
* CENTRE O'HYDROGEOLOGIE (UNIVERSITE DE NEUCHATEL) *
* VERSION DU 09-04-1989 *
*****
```

FICHIERS DES DONNEES:

```
*****
EXAMPLE5_1.ELE
EXAMPLE5_1.XYZ
EXAMPLE5_1.PAR
```

PARAMETRES DE CONTROLE:

```
*****
MNNIC= 1 MNNIC= 101 MNNQ= 1 MNND= 1
MXLM= 24 MNNCDE= 101 MNNLONG= 10
```

VALEURS DES CLASSES DE CONDUCTION ET DE POROSITE

```
*****
1 0.23148E-04 0.00000E+00 0.00000E+00
0.23148E-04 0.00000E+00
0.23148E-04
1 0.2000000E+00
```

ALIMENTATIONS DISTRIBUEES

```
*****
1 0.0000000E+00
```

VITESSE

```
*****
1 0.2314815E-05 0.0000000E+00 0.0000000E+00
```

CONDITIONS NODALES

```
*****
1 1 -1 0.1000000E+01
2 22 -1 0.1000000E+01
3 33 -1 0.1000000E+01
4 54 -1 0.1000000E+01
5 65 -1 0.1000000E+01
6 95 -1 0.0000000E+00
7 96 -1 0.0000000E+00
8 98 -1 0.0000000E+00
9 99 -1 0.0000000E+00
10 101 -1 0.0000000E+00
```

INCREMENT TEMPOREL, TPRINT, TMAX

```
*****
5 360 720
```

Fichier des conditions initiales:

```
***** EXAMPLE5_1.INI
```

```
INCREMENT DU TEMPS: DT= 5 JOURS.
PERIODE TRANSITOIRE DE 360 JOURS.
```


!RESULTATS CALCULES!

1	-1	1.000	0.8650768E-09	2	0	1.001	0.000000E+00	3	0	1.000	0.000000E+00
4	0	0.999	0.000000E+00	5	0	0.984	0.000000E+00	6	0	0.932	0.000000E+00
7	0	0.819	0.000000E+00	8	0	0.618	0.000000E+00	9	0	0.390	0.000000E+00
10	0	0.191	0.000000E+00	11	0	0.064	0.000000E+00	12	0	0.016	0.000000E+00
13	0	0.002	0.000000E+00	14	0	0.000	0.000000E+00	15	0	0.000	0.000000E+00
16	0	0.000	0.000000E+00	17	0	0.000	0.000000E+00	18	0	0.000	0.000000E+00
19	0	0.000	0.000000E+00	20	0	0.000	0.000000E+00	21	0	0.000	0.000000E+00
22	-1	1.000	0.3460307E-08	23	0	1.000	0.000000E+00	24	0	0.984	0.000000E+00
25	0	0.819	0.000000E+00	26	0	0.390	0.000000E+00	27	0	0.064	0.000000E+00
28	0	0.002	0.000000E+00	29	0	0.000	0.000000E+00	30	0	0.000	0.000000E+00
31	0	0.000	0.000000E+00	32	0	0.000	0.000000E+00	33	-1	1.000	0.1730154E-08
34	0	1.001	0.000000E+00	35	0	1.000	0.000000E+00	36	0	0.999	0.000000E+00
37	0	0.984	0.000000E+00	38	0	0.932	0.000000E+00	39	0	0.819	0.000000E+00
40	0	0.618	0.000000E+00	41	0	0.390	0.000000E+00	42	0	0.191	0.000000E+00
43	0	0.064	0.000000E+00	44	0	0.016	0.000000E+00	45	0	0.002	0.000000E+00
46	0	0.000	0.000000E+00	47	0	0.000	0.000000E+00	48	0	0.000	0.000000E+00
49	0	0.000	0.000000E+00	50	0	0.000	0.000000E+00	51	0	0.000	0.000000E+00
52	0	0.000	0.000000E+00	53	0	0.000	0.000000E+00	54	-1	1.000	0.3460307E-08
55	0	1.000	0.000000E+00	56	0	0.984	0.000000E+00	57	0	0.819	0.000000E+00
58	0	0.390	0.000000E+00	59	0	0.064	0.000000E+00	60	0	0.002	0.000000E+00
61	0	0.000	0.000000E+00	62	0	0.000	0.000000E+00	63	0	0.000	0.000000E+00
64	0	0.000	0.000000E+00	65	-1	1.000	0.8650768E-09	66	0	1.001	0.000000E+00
67	0	1.000	0.000000E+00	68	0	0.999	0.000000E+00	69	0	0.984	0.000000E+00
70	0	0.932	0.000000E+00	71	0	0.819	0.000000E+00	72	0	0.618	0.000000E+00
73	0	0.390	0.000000E+00	74	0	0.191	0.000000E+00	75	0	0.064	0.000000E+00
76	0	0.016	0.000000E+00	77	0	0.002	0.000000E+00	78	0	0.000	0.000000E+00
79	0	0.000	0.000000E+00	80	0	0.000	0.000000E+00	81	0	0.000	0.000000E+00
82	0	0.000	0.000000E+00	83	0	0.000	0.000000E+00	84	0	0.000	0.000000E+00
85	0	0.000	0.000000E+00	86	0	0.000	0.000000E+00	87	0	0.000	0.000000E+00
88	0	0.000	0.000000E+00	89	0	0.000	0.000000E+00	90	0	0.000	0.000000E+00
91	0	0.000	0.000000E+00	92	0	0.000	0.000000E+00	93	0	0.000	0.000000E+00
94	0	0.000	0.000000E+00	95	-1	0.000	-0.1795100E-13	96	-1	0.000	-0.7180401E-13
97	0	0.000	0.000000E+00	98	-1	0.000	-0.3590201E-13	99	-1	0.000	-0.7180401E-13
100	0	0.000	0.000000E+00	101	-1	0.000	-0.1795100E-13				

SOMME DES DEBITS = 0.1038071E-07
 INCREMENT DU TEMPS: DT= 5 JOURS.
 PERIODE TRANSITOIRE OE 720 JOURS.

!RESULTATS CALCULES!

1	-1	1.000	0.2537508E-10	2	0	1.000	0.000000E+00	3	0	1.000	0.000000E+00
4	0	1.000	0.000000E+00	5	0	1.000	0.000000E+00	6	0	1.000	0.000000E+00
7	0	1.000	0.000000E+00	8	0	1.000	0.000000E+00	9	0	0.998	0.000000E+00
10	0	0.993	0.000000E+00	11	0	0.977	0.000000E+00	12	0	0.941	0.000000E+00
13	0	0.874	0.000000E+00	14	0	0.762	0.000000E+00	15	0	0.620	0.000000E+00
16	0	0.452	0.000000E+00	17	0	0.295	0.000000E+00	18	0	0.169	0.000000E+00
19	0	0.082	0.000000E+00	20	0	0.035	0.000000E+00	21	0	0.012	0.000000E+00
22	-1	1.000	0.1015003E-09	23	0	1.000	0.000000E+00	24	0	1.000	0.000000E+00
25	0	1.000	0.000000E+00	26	0	0.998	0.000000E+00	27	0	0.977	0.000000E+00
28	0	0.874	0.000000E+00	29	0	0.620	0.000000E+00	30	0	0.295	0.000000E+00
31	0	0.082	0.000000E+00	32	0	0.012	0.000000E+00	33	-1	1.000	0.5075015E-10
34	0	1.000	0.000000E+00	35	0	1.000	0.000000E+00	36	0	1.000	0.000000E+00
37	0	1.000	0.000000E+00	38	0	1.000	0.000000E+00	39	0	1.000	0.000000E+00
40	0	1.000	0.000000E+00	41	0	0.998	0.000000E+00	42	0	0.993	0.000000E+00
43	0	0.977	0.000000E+00	44	0	0.941	0.000000E+00	45	0	0.874	0.000000E+00
46	0	0.762	0.000000E+00	47	0	0.620	0.000000E+00	48	0	0.452	0.000000E+00
49	0	0.295	0.000000E+00	50	0	0.169	0.000000E+00	51	0	0.082	0.000000E+00
52	0	0.035	0.000000E+00	53	0	0.012	0.000000E+00	54	-1	1.000	0.1015003E-09
55	0	1.000	0.000000E+00	56	0	1.000	0.000000E+00	57	0	1.000	0.000000E+00

5. Vérification de TRANS3

58 0	0.998	0.000000E+00	59 0	0.977	0.000000E+00	60 0	0.874	0.000000E+00
61 0	0.620	0.000000E+00	62 0	0.295	0.000000E+00	63 0	0.082	0.000000E+00
64 0	0.012	0.000000E+00	65 -1	1.000	0.253750E-10	66 0	1.000	0.000000E+00
67 0	1.000	0.000000E+00	68 0	1.000	0.000000E+00	69 0	1.000	0.000000E+00
70 0	1.000	0.000000E+00	71 0	1.000	0.000000E+00	72 0	1.000	0.000000E+00
73 0	0.998	0.000000E+00	74 0	0.993	0.000000E+00	75 0	0.977	0.000000E+00
76 0	0.941	0.000000E+00	77 0	0.874	0.000000E+00	78 0	0.762	0.000000E+00
79 0	0.620	0.000000E+00	80 0	0.452	0.000000E+00	81 0	0.295	0.000000E+00
82 0	0.169	0.000000E+00	83 0	0.082	0.000000E+00	84 0	0.035	0.000000E+00
85 0	0.012	0.000000E+00	86 0	0.004	0.000000E+00	87 0	0.001	0.000000E+00
88 0	0.001	0.000000E+00	89 0	0.004	0.000000E+00	90 0	0.001	0.000000E+00
91 0	0.001	0.000000E+00	92 0	0.004	0.000000E+00	93 0	0.001	0.000000E+00
94 0	0.000	0.000000E+00	95 -1	0.000	-0.211298E-09	96 -1	0.000	-0.845194E-09
97 0	0.000	0.000000E+00	98 -1	0.000	-0.422597E-09	99 -1	0.000	-0.845194E-09
100 0	0.000	0.000000E+00	101 -1	0.000	-0.211298E-09			

SOMME DES DEBITS = -0.2231082E-08

La Figure 5.4 montre, le long de la ligne joignant les nœuds 33 et 98, la distribution de la propagation du polluant après 1 an et 2 ans, résultant du calcul numérique de TRANS3. La Figure 5.5 synthétise les solutions analytiques et numériques.

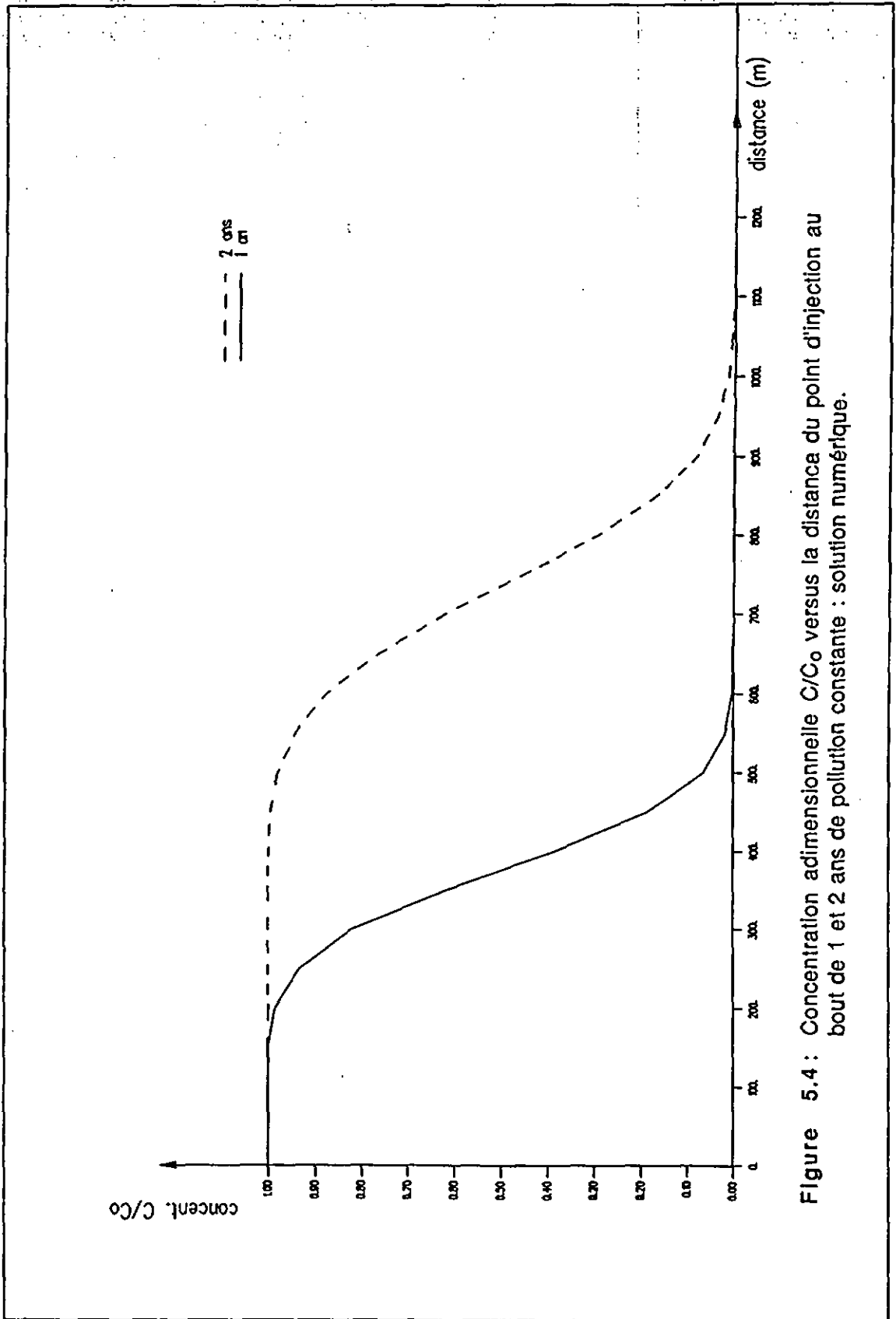


Figure 5.4 : Concentration adimensionnelle C/C_0 versus la distance du point d'injection au bout de 1 et 2 ans de pollution constante : solution numérique.

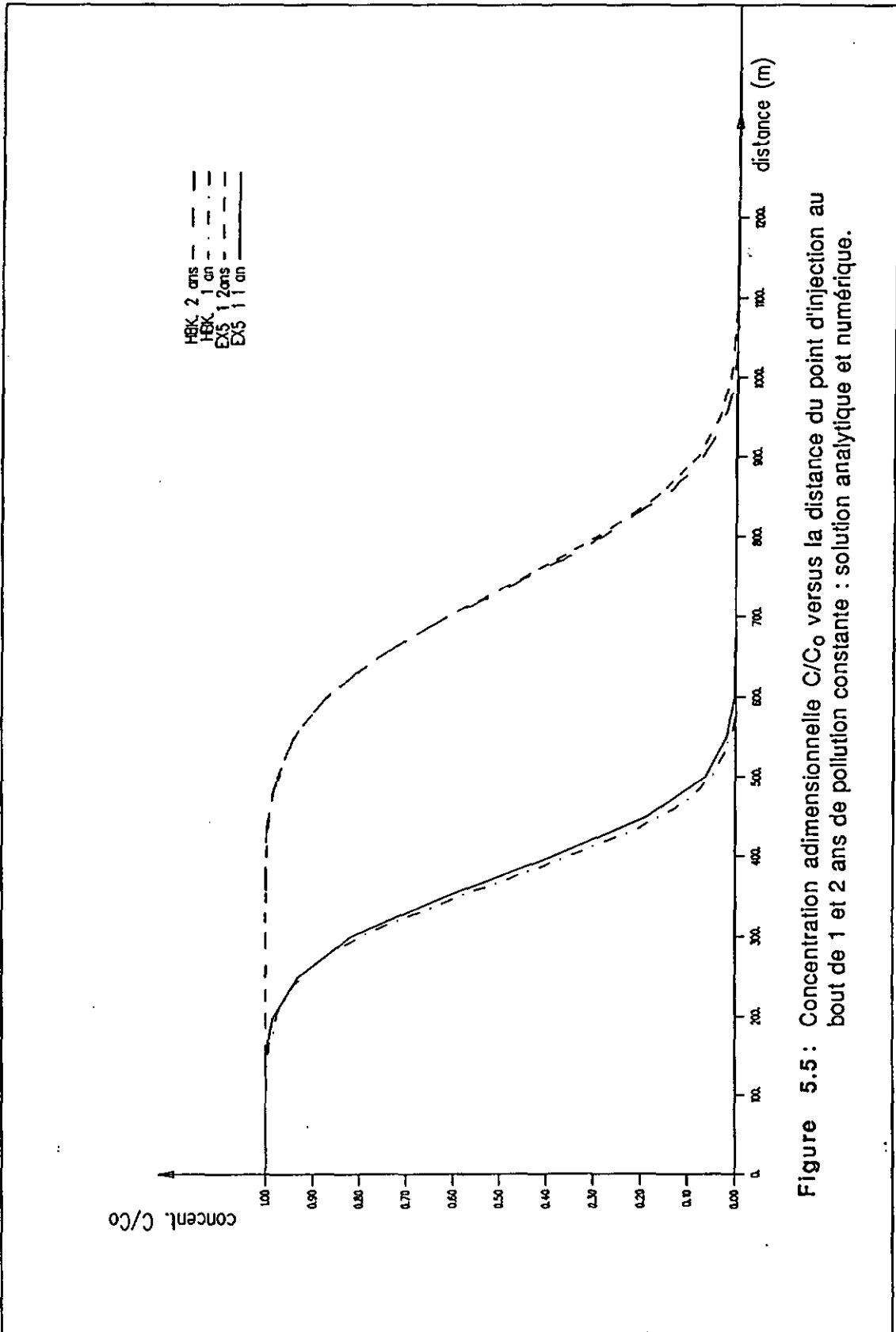


Figure 5.5: Concentration adimensionnelle C/C_0 versus la distance du point d'injection au bout de 1 et 2 ans de pollution constante : solution analytique et numérique.

6. Projet Altwiden et méthodologie de Validation

La validation d'un modèle est aussi appelée "calage du modèle". C'est l'opération qui consiste à **ajuster** ou à **calibrer** les valeurs des paramètres et des conditions aux limites, afin de reproduire au mieux des états mesurés sur le modèle physique (par exemple sur le terrain). Cette étape est nécessaire et précède tout modèle de gestion. Et ce n'est que lorsque cette validation sera acceptable, eu égard à l'incertitude régissant la détermination des paramètres in-situ servant à la calibration, que l'on pourra faire varier les sollicitations du modèle numérique, pour essayer de prédire le comportement de l'aquifère, autrement dit, faire de la gestion de ressources.

Le but des travaux présentés dans cet ouvrage, n'est pas réellement de résoudre un cas concret de simulation de TRANS3 pour aboutir à une validation ou à une gestion de modèle, mais plutôt d'offrir un outil de travail, parmi tant d'autres, ayant la prétention d'aider un gestionnaire. Après la phase de vérification de TRANS3, cet objectif semble atteint.

Cependant, dans un souci de montrer comment utiliser TRANS3 pour tenter d'arriver à une validation acceptable, nous présentons dans ce chapitre, une application de TRANS3 sur une banque de données thermiques mise gracieusement à notre disposition par le bureau d'étude A. WERNER de Berthoud (canton de Berne).

Nous précisons qu'une validation, à l'aide de TRANS3, a déjà été menée avec succès dans le cadre de deux études. La première a été réalisée par D. EVARD, 1987, sur un modèle 2-D de simulation en transitoire d'un stockage de chaleur à basse enthalpie, pour le bureau d'étude B. MATHEY de Montézillon (canton de Neuchâtel). La seconde étude consiste en un calage de modèle hydrodynamique en permanent et en transitoire sur le terrain de Oberriet (canton de St. Gall), devant servir de support à un modèle de transport chimique. Malgré quelques problèmes techniques rencontrés, les auteurs, L. TACHER et R. BERNASCONI, sont en voie d'achever leur travail de diplôme en hydrogéologie au CHYN avec des résultats probants.

6.1 Présentation du projet Altwiden

Le projet Altwiden, situé entre Utzenstorf et Aefligen, et intitulé "Température de l'eau souterraine et végétation - Utzenstorf-Aefligen", se trouve au nord-ouest de la Suisse centrale, dans le canton de Berne, à proximité du cours d'eau Emme, Figure 6.1 et 6.2. Il est sous le haut patronage de Dr. R. BLAU de l'office de l'économie hydraulique et énergétique du canton de Berne.

Les collaborateurs de ce projet sont :

- l'Institut de la recherche forestière et du bois, chaire de la physique des sols, EPF Zurich;
- l'Institut de la production végétale, EPF Zurich;
- l'Institut de zoologie, Université de Neuchâtel;
- l'Ecole d'agriculture Rütli, Zollikofen;
- le Bureau d'ingénieurs et d'études A. Werner, Berthoud;
- H. Basler, installations énergétiques, Wabern.

Ce projet consiste à étudier l'influence de la variation de température de l'eau souterraine d'un aquifère phréatique sur la vie de la faune et de la flore. Cette région a été choisie à cause de la proximité de l'Emme qui alimente l'aquifère. La température de ce cours d'eau est sujette à de grandes variations. Les Figures 6.3 à 6.5 présentent respectivement, à titre indicatif,

Figure 6.1 : Plan de masse du projet Utzenstorf-Aeffligen.

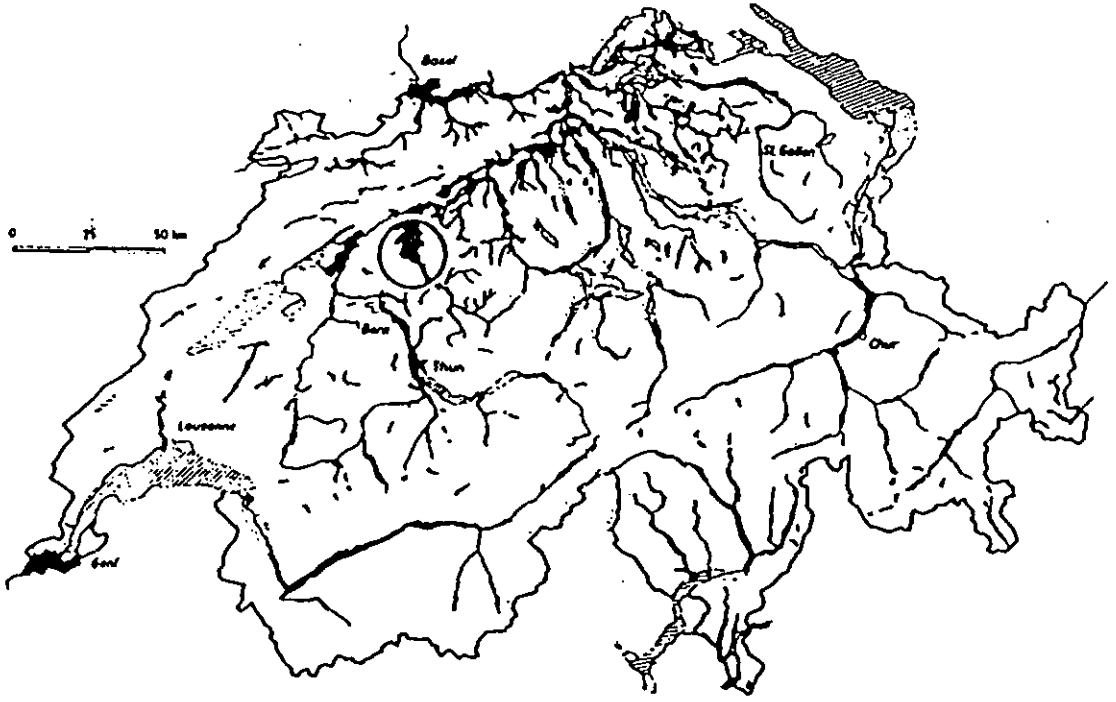
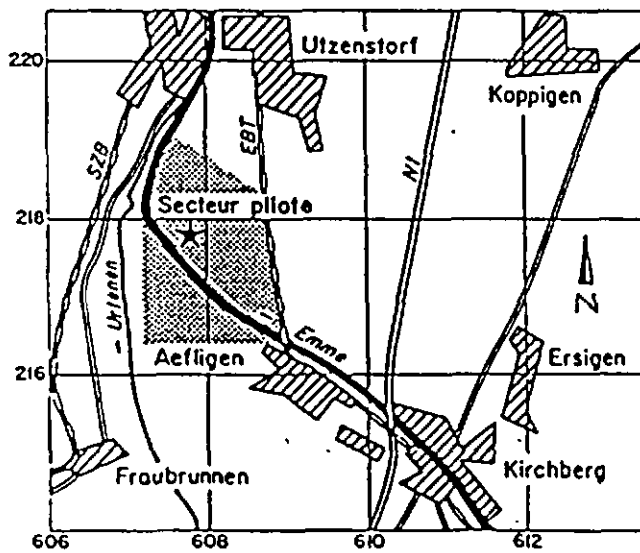


Figure 6.2 : Localisation du champ d'essai Altwiden.



★ CHAMP D'ESSAI ALTWIDEN

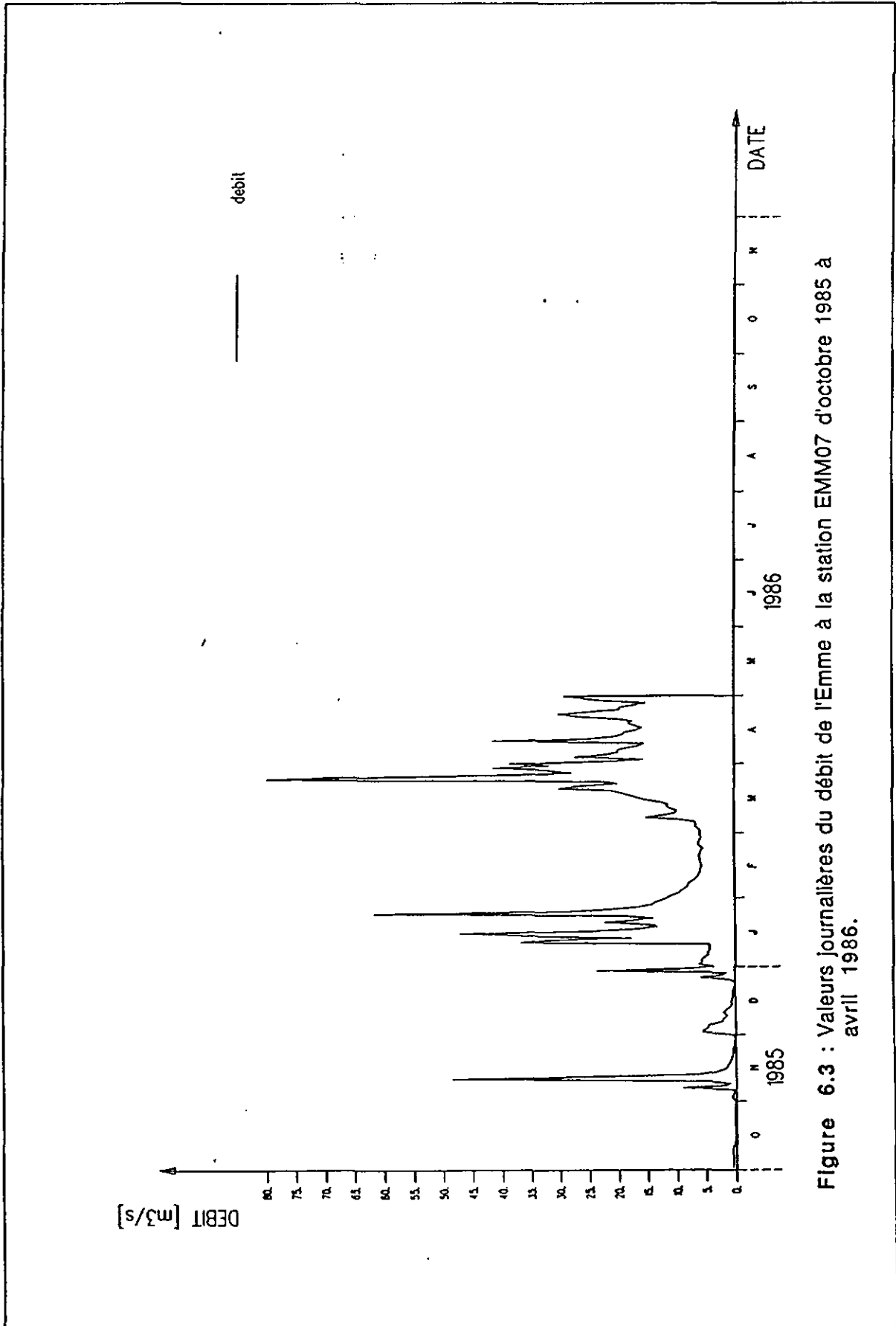


Figure 6.3 : Valeurs Journalières du débit de l'Emme à la station EMM07 d'octobre 1985 à avril 1986.

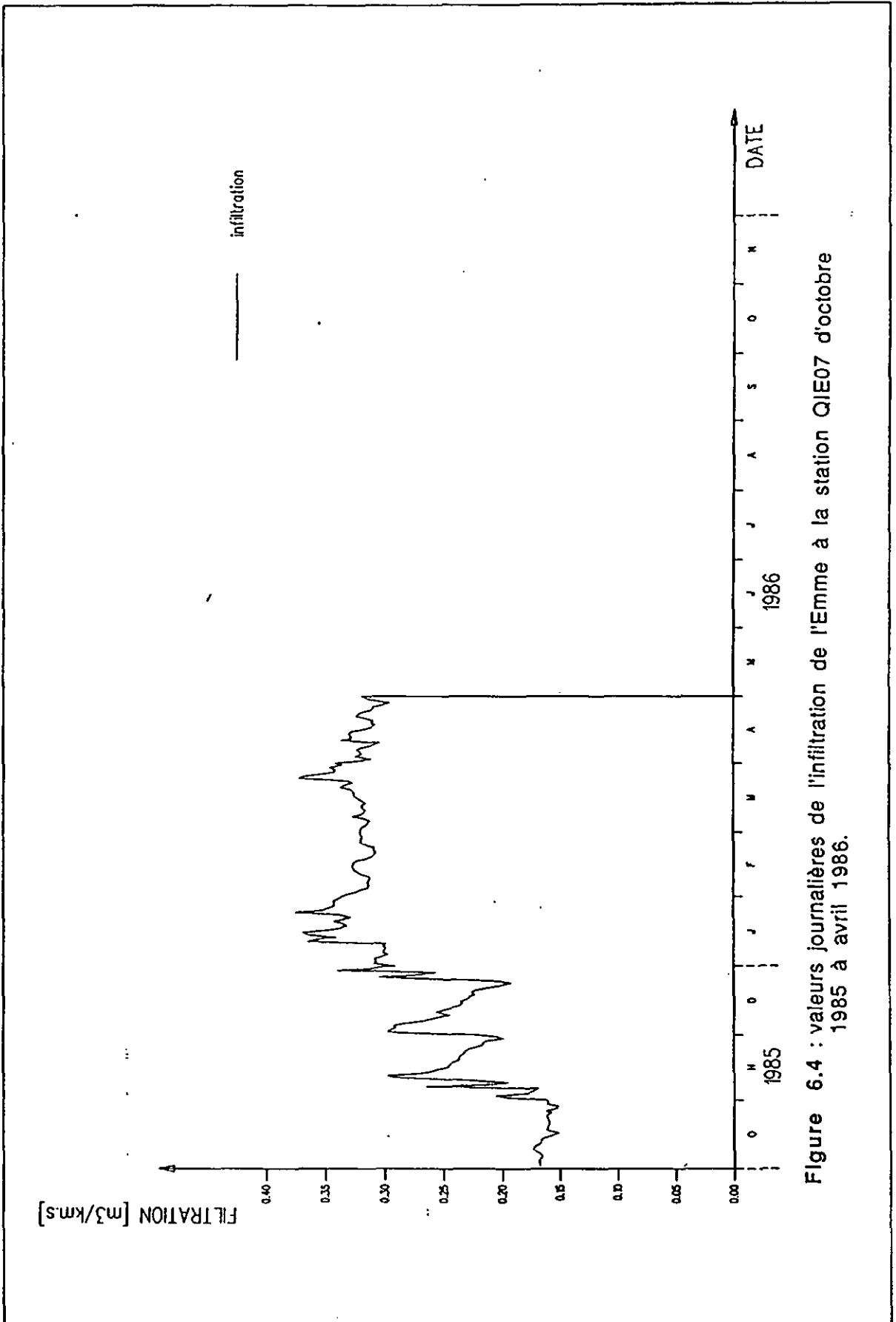


Figure 6.4 : valeurs journalières de l'infiltration de l'Emme à la station QIE07 d'octobre 1985 à avril 1986.

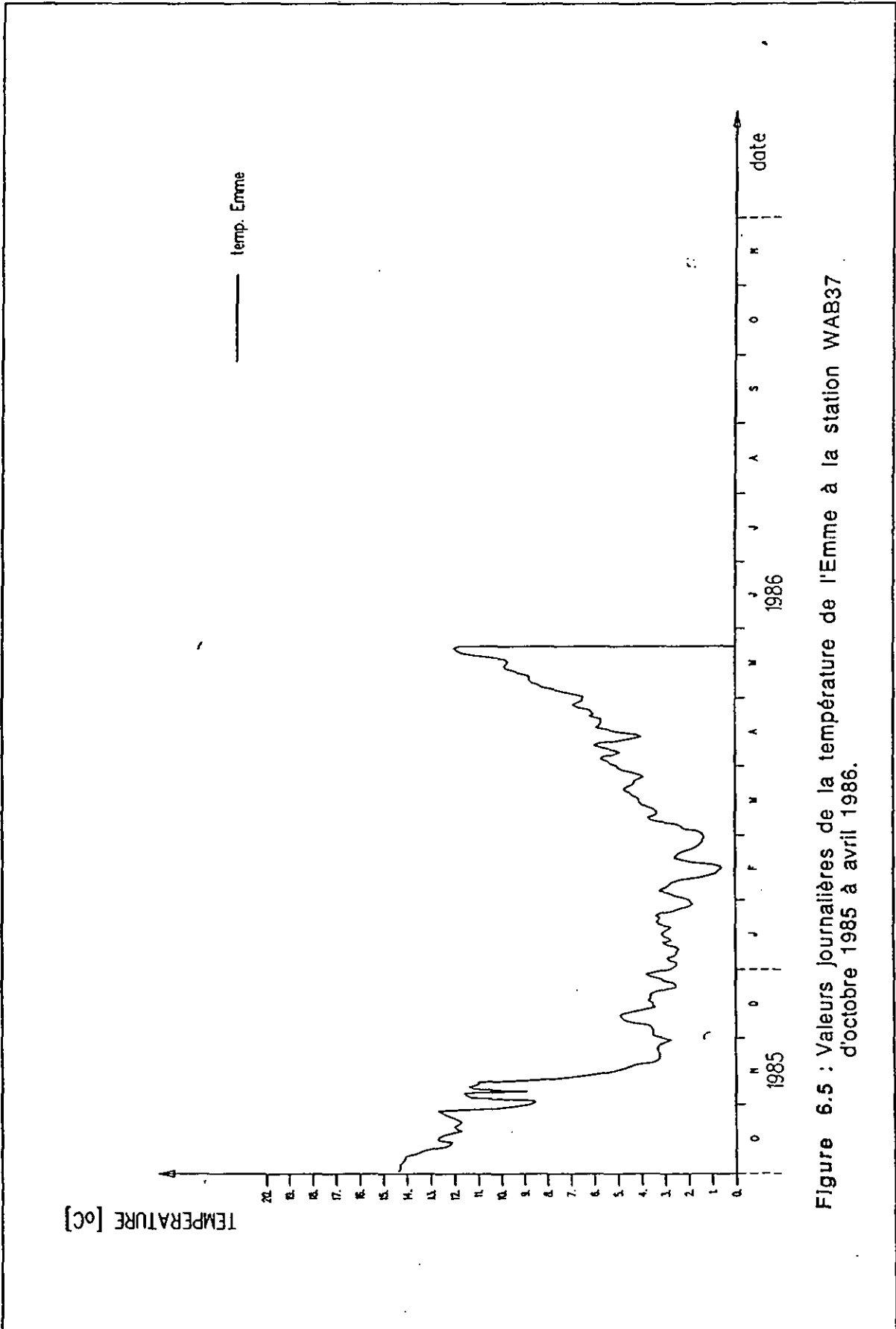


Figure 6.5 : Valeurs journalières de la température de l'Emme à la station WAB37 d'octobre 1985 à avril 1986.

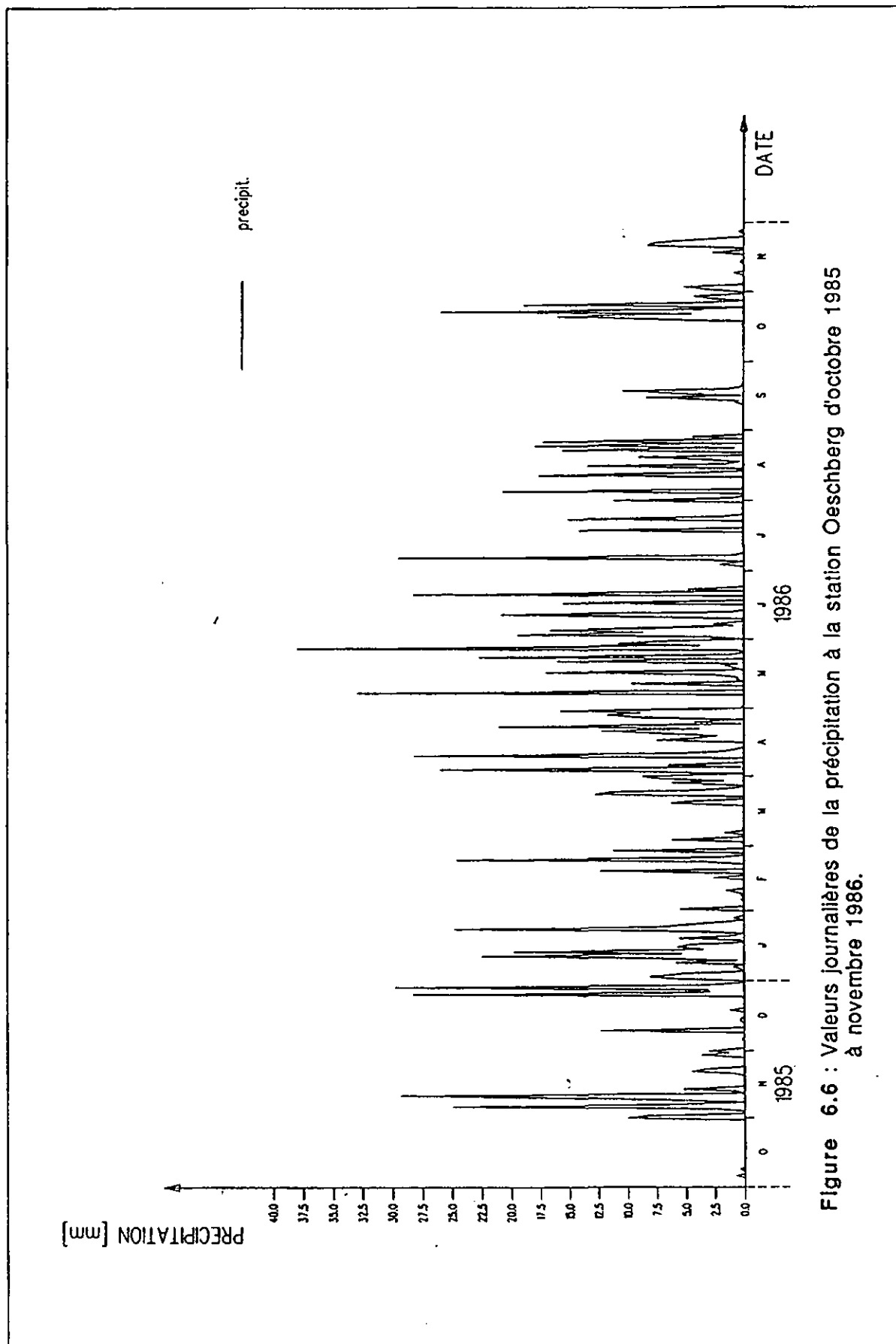


Figure 6.6 : Valeurs journalières de la précipitation à la station Oeschberg d'octobre 1985 à novembre 1986.

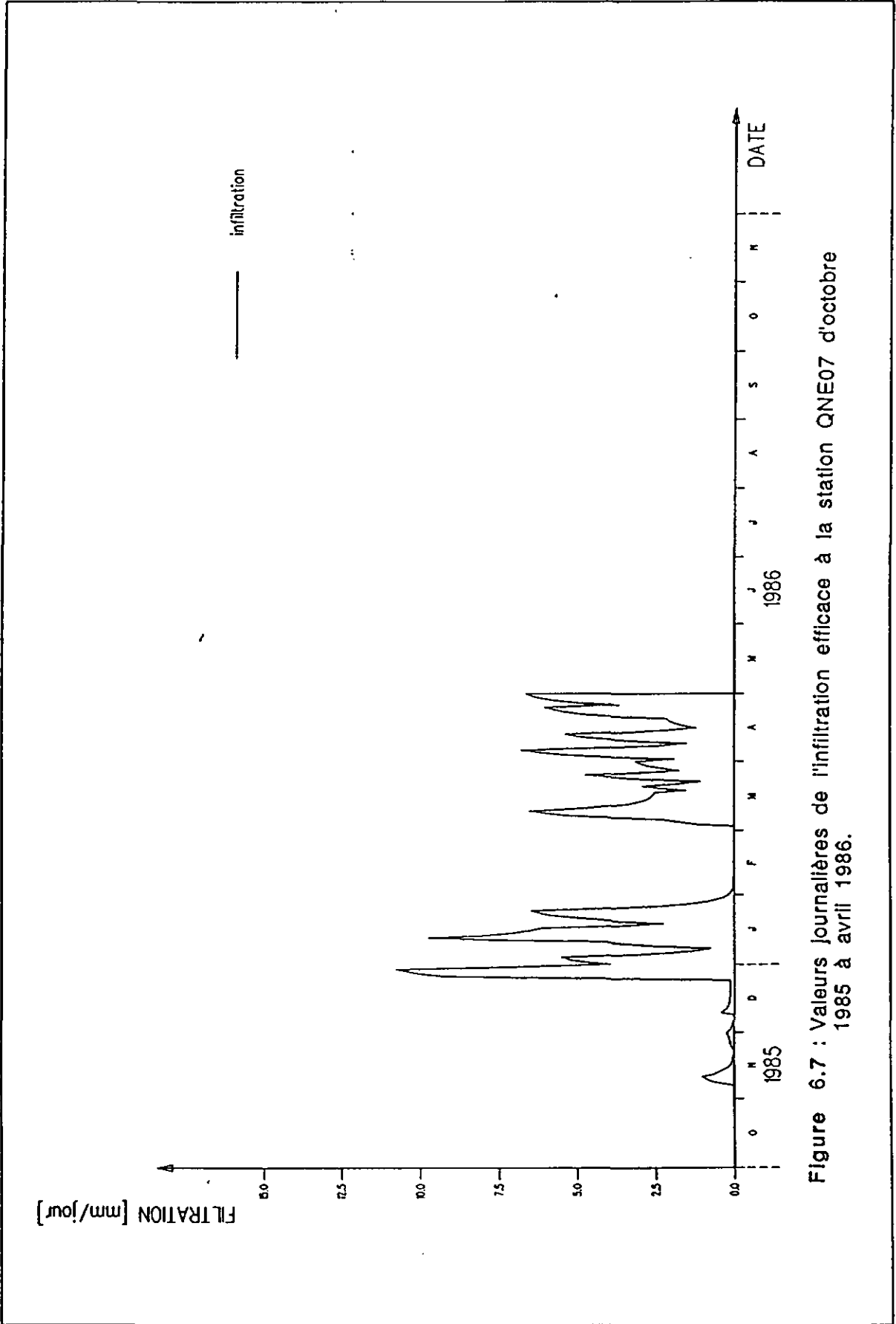


Figure 6.7 : Valeurs journalières de l'infiltration efficace à la station QNE07 d'octobre 1985 à avril 1986.

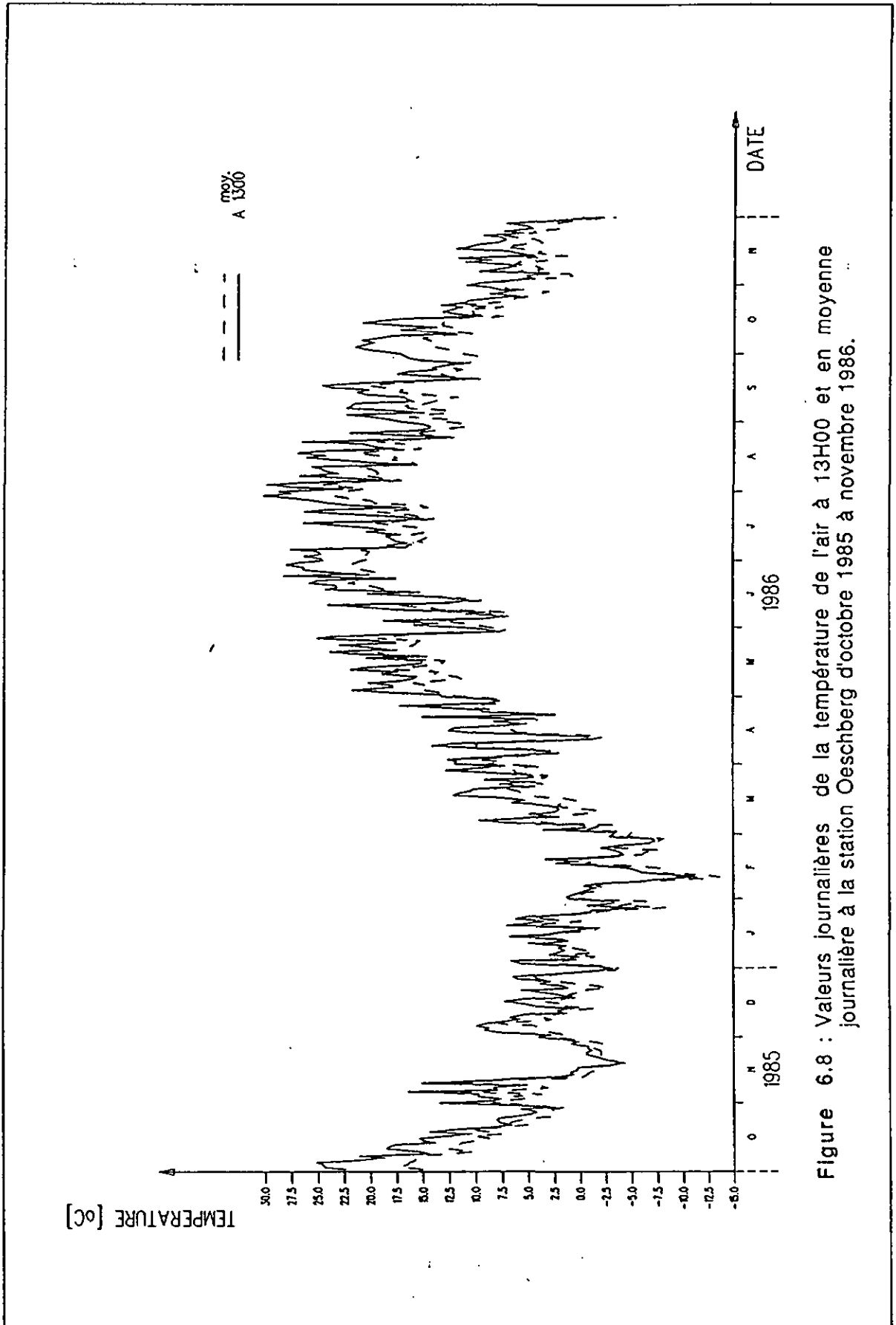


Figure 6.8 : Valeurs journalières de la température de l'air à 13H00 et en moyenne journalière à la station Oeschberg d'octobre 1985 à novembre 1986.

les valeurs journalières du débit de l'Emme, de son infiltration et de sa température pour la période d'octobre 1985 à avril 1986.

Les conditions de températures naturelles sont tributaires, d'une part de l'infiltration massive de l'Emme, Figure 6.4, et d'autre part de l'apport de chaleur de l'atmosphère, Figure 6.8. Les Figures 6.6 à 6.8 présentent respectivement, à titre indicatif, les valeurs journalières de la précipitation, de l'infiltration efficace et de la température de l'air à 13H00 et en moyenne journalière, pour la période d'octobre 1985 à novembre 1986.

La figure 6.9 montre les isothermes de la zone saturée et non saturée du milieu poreux, pour les périodes du 24 juillet 1985 et du 4 février 1986, sur une coupe verticale suivant l'axe 3. Cet axe est identifié sur la Figure 6.10. Il se trouve à proximité de la région d'étude. On remarque très bien l'apport d'eau froide par infiltration de l'Emme et des précipitations (isothermes du 4 février 1986). L'apport de chaleur pendant le semestre d'été se déroule de façon analogue et inhibe le courant d'eau froide.

Les conditions de l'eau souterraine dans le secteur pilote peuvent être caractérisées comme suit : l'aquifère, constitué de graviers du quaternaire, porte un écoulement dans la direction sub-nord, et a une épaisseur d'environ 12m; entre Kirchberg et Schalunen, une quantité appréciable de 2'000 l/s est infiltrée de l'Emme dans l'aquifère; la température de ce cours d'eau varie environ entre 2°C en hiver et 20°C en été; l'infiltration de l'Emme se fait plus sentir du côté de sa rive droite que de celle de gauche; l'épaisseur de la zone non saturée varie entre 0.5 m et 6 m dans le secteur pilote.

Ce secteur pilote a été subdivisé en deux sites. Le premier, situé à proximité de l'Emme, réagit aux conditions de variations naturelles de la température. Le second, situé à une distance où l'influence de l'Emme se fait moins ressentir, réagit à la fois aux conditions de variations naturelles de la température, et à une injection artificielle d'eau réchauffée ou refroidie à l'aide d'une pompe à chaleur. Cette installation est en exploitation depuis le mois de janvier 1986. Elle permet d'influencer à volonté les température du milieu. C'est ce second site, appelé champ d'essai Altwiden, qui nous intéresse plus particulièrement.

Il a une superficie d'environ 0.5 ha, soit 70 m x 70 m. Un réseau, fourni de 86 piézomètres, jalonne le champ d'essai. Ils sont espacés de 3, 6, ou 12 m les uns des autres, et ont une profondeur de 6 m pour la plupart et 12 m pour une dizaine d'entre eux. Ils sont alignés dans la direction de l'écoulement et perpendiculairement à celui-ci, Figure 6.11. Le piézomètre No 49, en amont du site, est utilisé pour pomper l'aquifère à un débit donnée. Cette quantité d'eau est subdivisée en trois parties. Une première partie est injectée sans traitement dans l'aquifère par le piézomètre No 150. Les deux autres quantité passent par l'échangeur de chaleur pour subir respectivement un refroidissement de 2 à 4°C et un réchauffement du même ordre de grandeur, et sont injectés dans les piézomètres No 120 et 180, Figure 6.12. Le champ est ainsi subdivisé en trois zones. Dans chacune d'elles la température est augmentée, maintenue à l'état naturel ou diminuée. Le pompage et l'injection se font en continu.

Une campagne de mesure de la température et de la piézométrie est régulièrement planifiée. Elle consiste en une mesure de la température dans l'aquifère à tous les 50 cm jusqu'à la profondeur de 6 m. La Figure 6.13 présente un tableau récapitulatif donnant les dates de début et de fin d'injection, les volumes d'eau injectés en continu dans les trois zones, la date de campagne de mesures et le nombre de piézomètres concernés par la campagne.

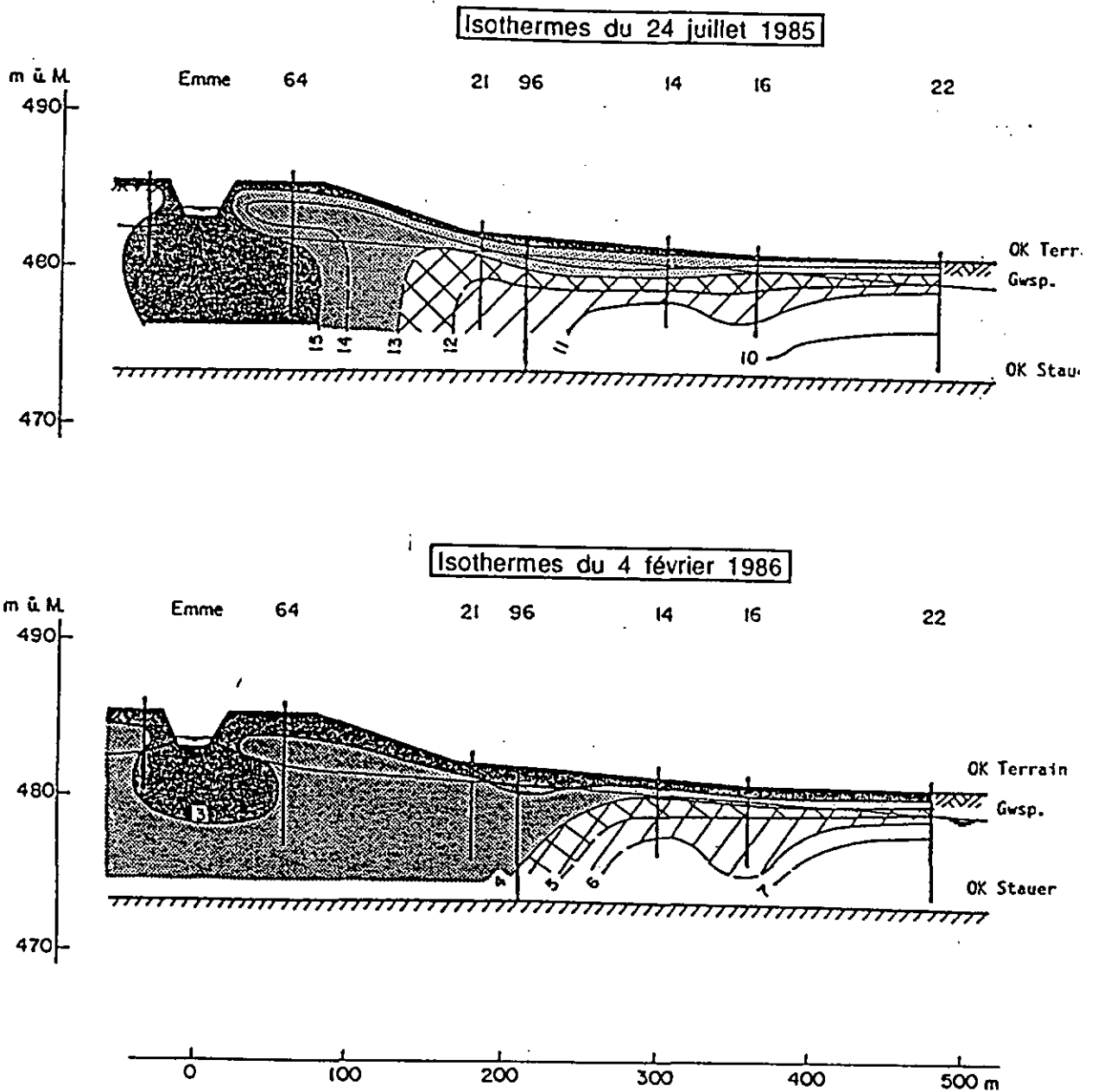


Figure 6.9 : Isolignes de température de la zone saturée et non saturée du milieu poreux le long d'une coupe verticale suivant l'axe 3 (voir Figure 6.10), (BLAU, R.V., et al, 1987)

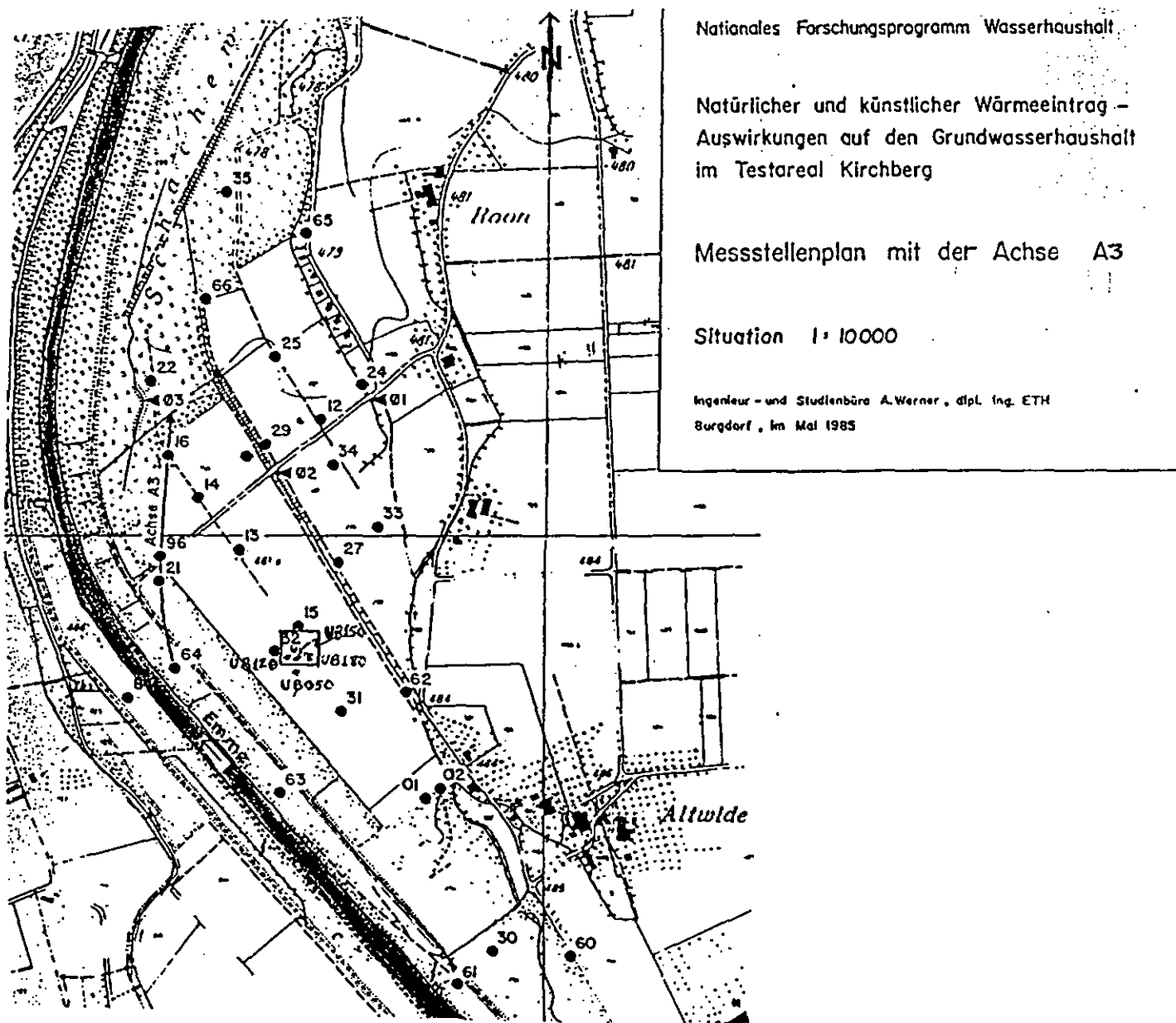


Figure 6.10 : Localisation de l'axe 3 et des piézomètres de mesure du niveau de l'eau souterraine et de sa température. Positionnement du champ d'essai, (BLAU, R.V., et al, 1987).

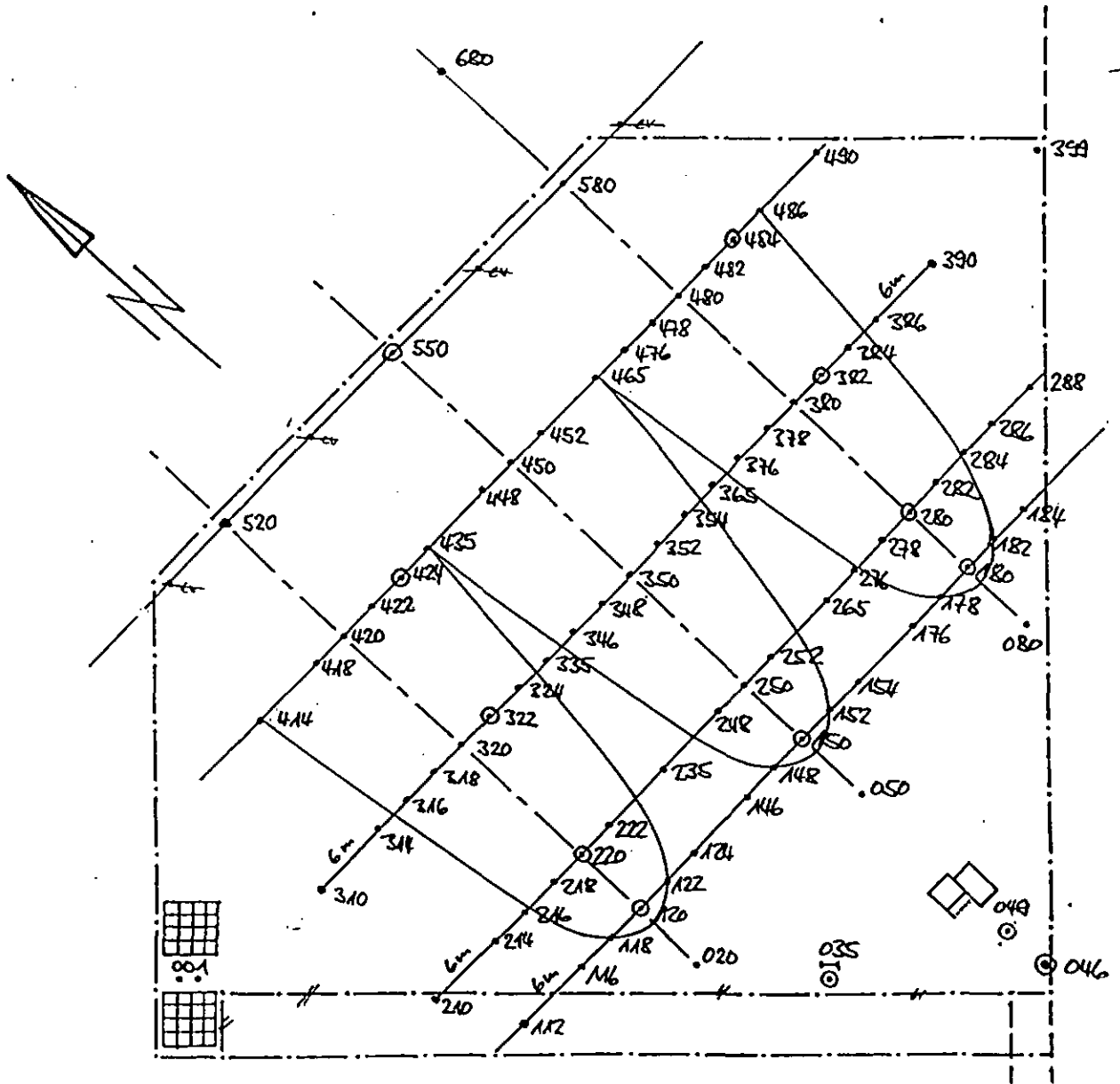


Figure 6.11 : Plan détaillé du champ d'essai Altwiden. Identification des piézomètres.

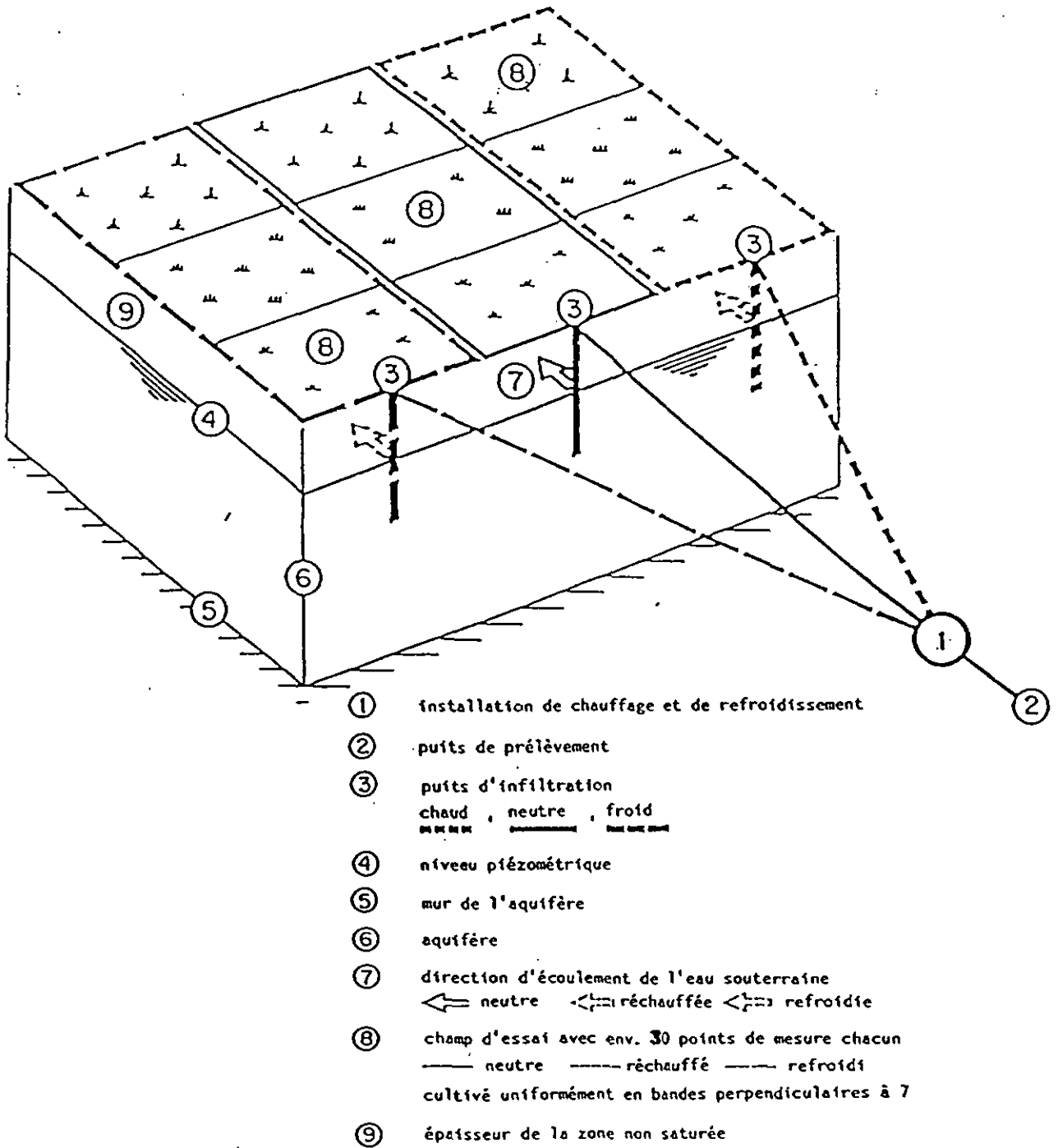
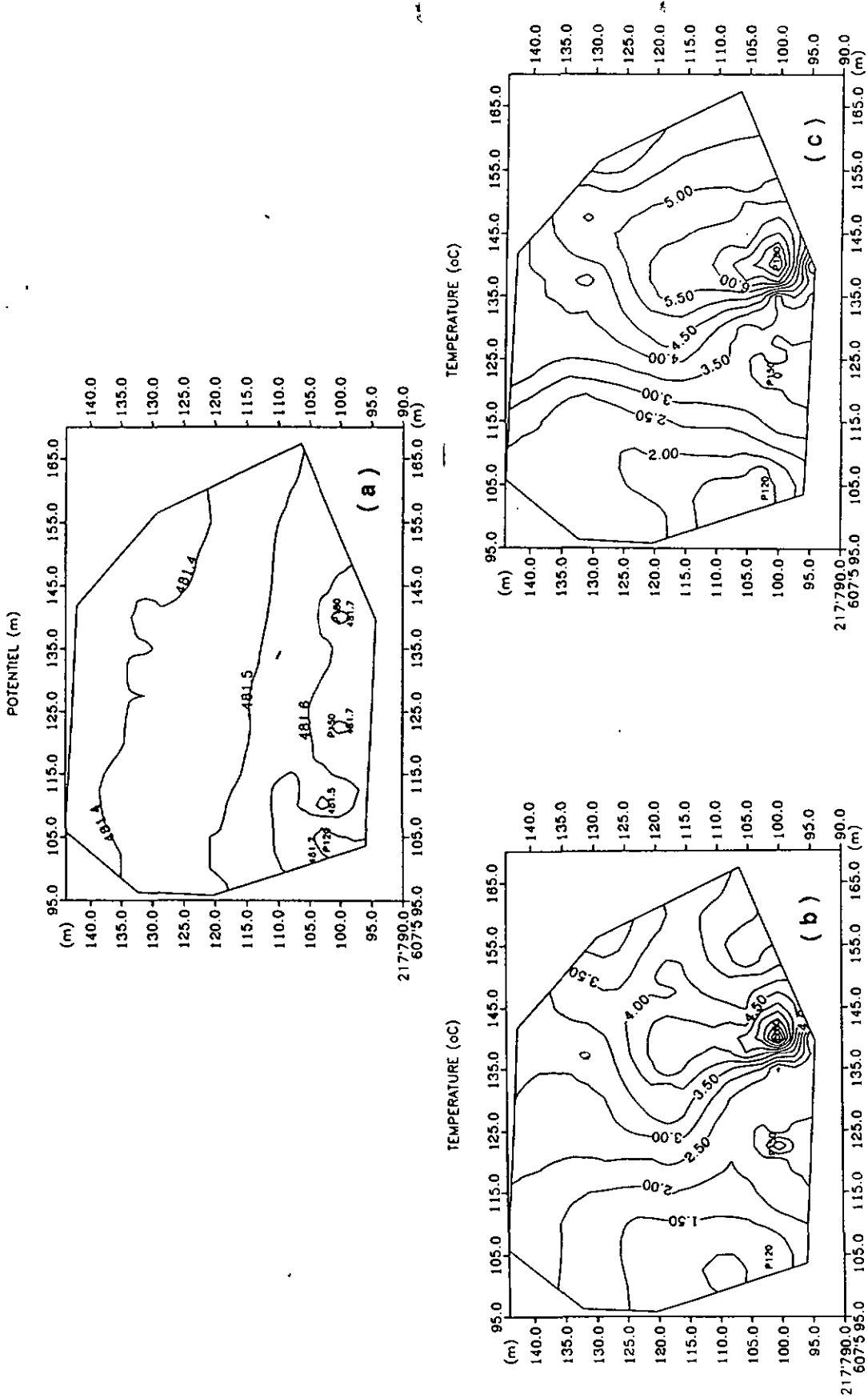


Figure 6.12 : Champ d'essai Altwiden : esquisse schématique des trois zones d'injection.

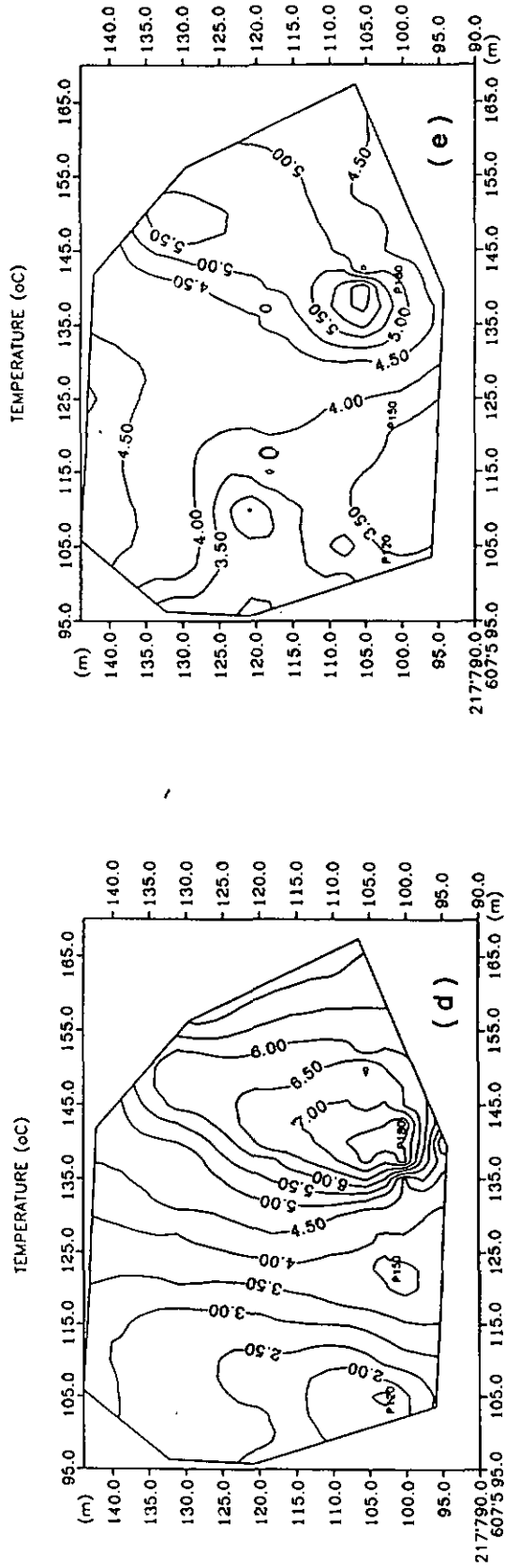
Période	Date de début d'injection	Date de fin d'injection	Nature de l'injection Débit injecté			Date de mesures	Nombre de piézomètres mesurés
			P120	P150	P180		
1 ^{ère}	20.11.85	20.12.85	CHAUD 70 l/mn	NEUTRE 70 l/mn	FROID 70 l/mn	19.11.85	29
						20.11.85	11
						22.11.85	18
						25.11.85	15
						28.11.85	18
						2.12.85	18
						5.12.85	79
						12.12.85	18
						20.12.85	91
2 ^{ème}	21.01.86	14.07.86	FROID 70 l/mn	NEUTRE 13.2 l/mn	CHAUD 70 l/mn	23.01.86	75
						27.01.86	75
						30.01.86	89
						6.02.86	75
						13.02.86	90
						27.02.86	86
						13.03.86	91
						27.03.86	91
						10.04.86	92
						27.04.86	92
						7.05.86	92
						22.05.86	92
						5.06.86	92
						19.06.86	92
						3.07.86	92
						14.07.86	79
						16.07.86	92
21.07.86	79						
29.07.86	91						
26.08.86	91						
25.09.86	91						
6.11.86	124						

Figure 6.13 : Champ d'essai Altwiden : tableau récapitulatif des campagnes d'acquisition de données



CHAMP D'ESSAI ALTWIDEN (Canton de Berne)

Figure 6.14 : Isohyse de mesure du 13 mars 1986 : a) carte piézométrique; ; cartes des isothermes b) à 0.10 m, c) à 1.10 m, d) à 2.10 m, et e) à 4.10 m du niveau piézométrique.



CHAMP D'ESSAI ALTWIDEN (Canton de Berne)

Figure 6.14 : Isohypse de la campagne de mesure du 13 mars 1986 : a) carte piézométrique; cartes des isothermes b) à 0.10 m, c) à 1.10 m, d) à 2.10 m, et e) à 4.10 m du niveau piézométrique.

Un volume aussi important de données prend plus de temps à gérer que le calage d'un modèle numérique. La Figure 6.14 représentent les cartes des isopièzes, et des isothermes, sur des plans à différentes profondeurs par rapport à la surface piézométrique, de la campagne de mesure du 13 mars 1986.

6.2 Choix des limites du modèle physique

Les limites du modèle correspondent au rectangle reliant les piézomètres 118, 184, 484 et 418. Il comprend 57 piézomètres pouvant fournir les valeurs des conditions aux limites et conditions initiales. La Figure 6.15 présente les limites de ce domaine en plan. Dans la dimension verticale l'extension du domaine est limitée par l'extrémité des mesures de température, soit environ à 4 m en-dessous du niveau phréatique. Le domaine 3-D ainsi décrit, est un bloc de la forme d'une brique de 45 m x 30 m x 4 m.

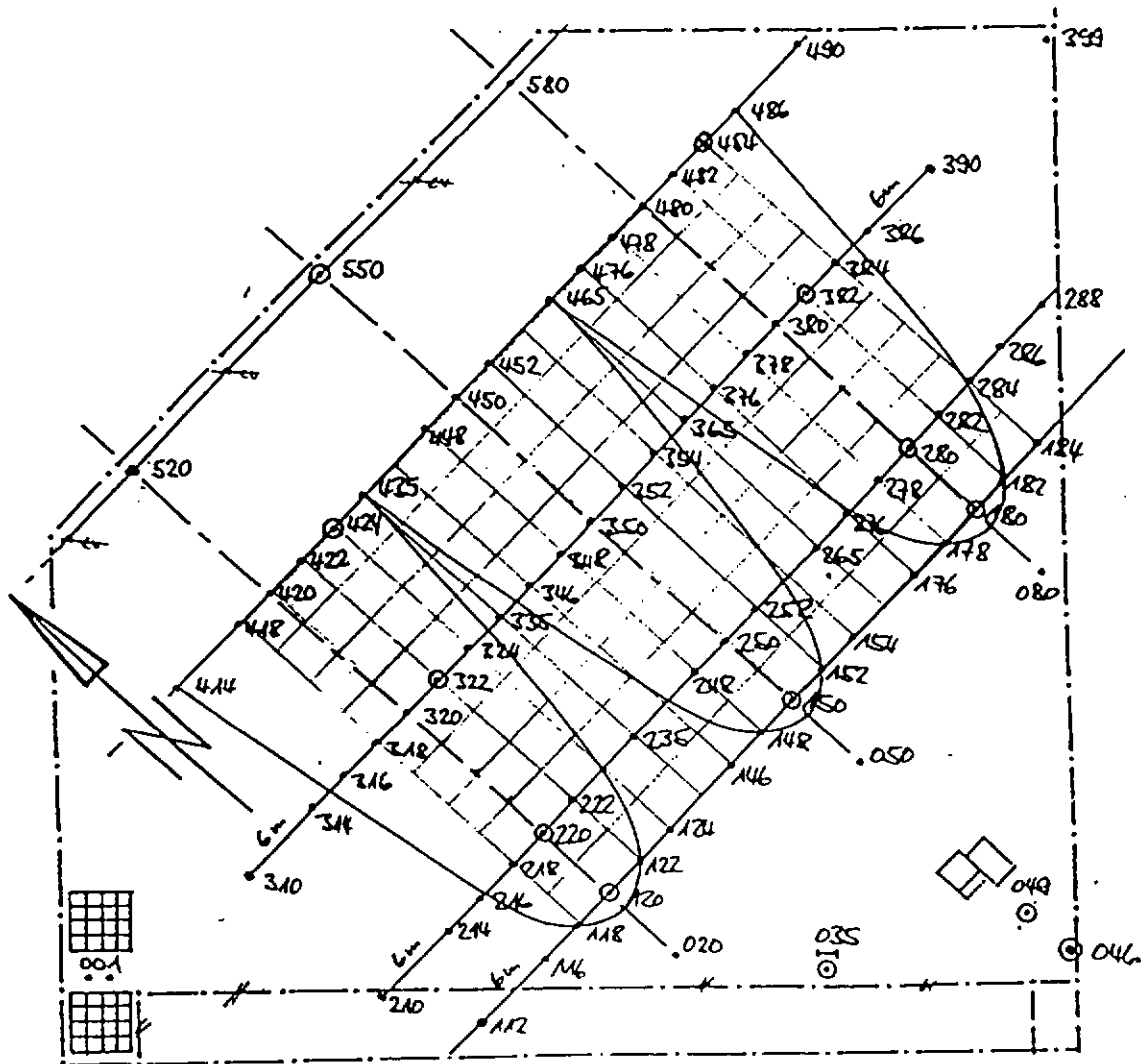


Figure 6.15 : Limites du domaine du modèle physique.

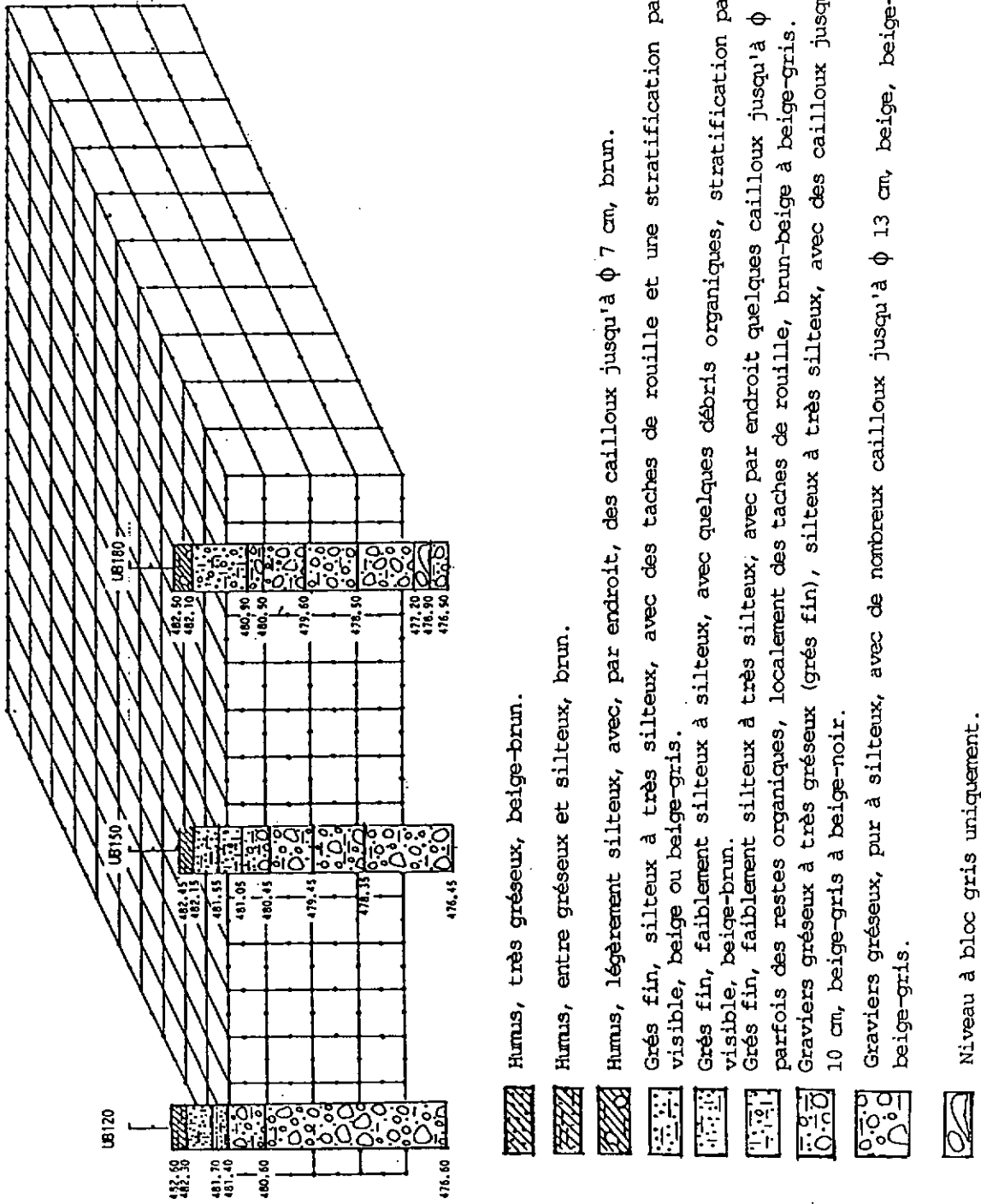


Figure 6.17 : Comparaison entre les limites des éléments et celles de la lithologie des coupes stratigraphiques des piézomètres No 120, 150 et 180.

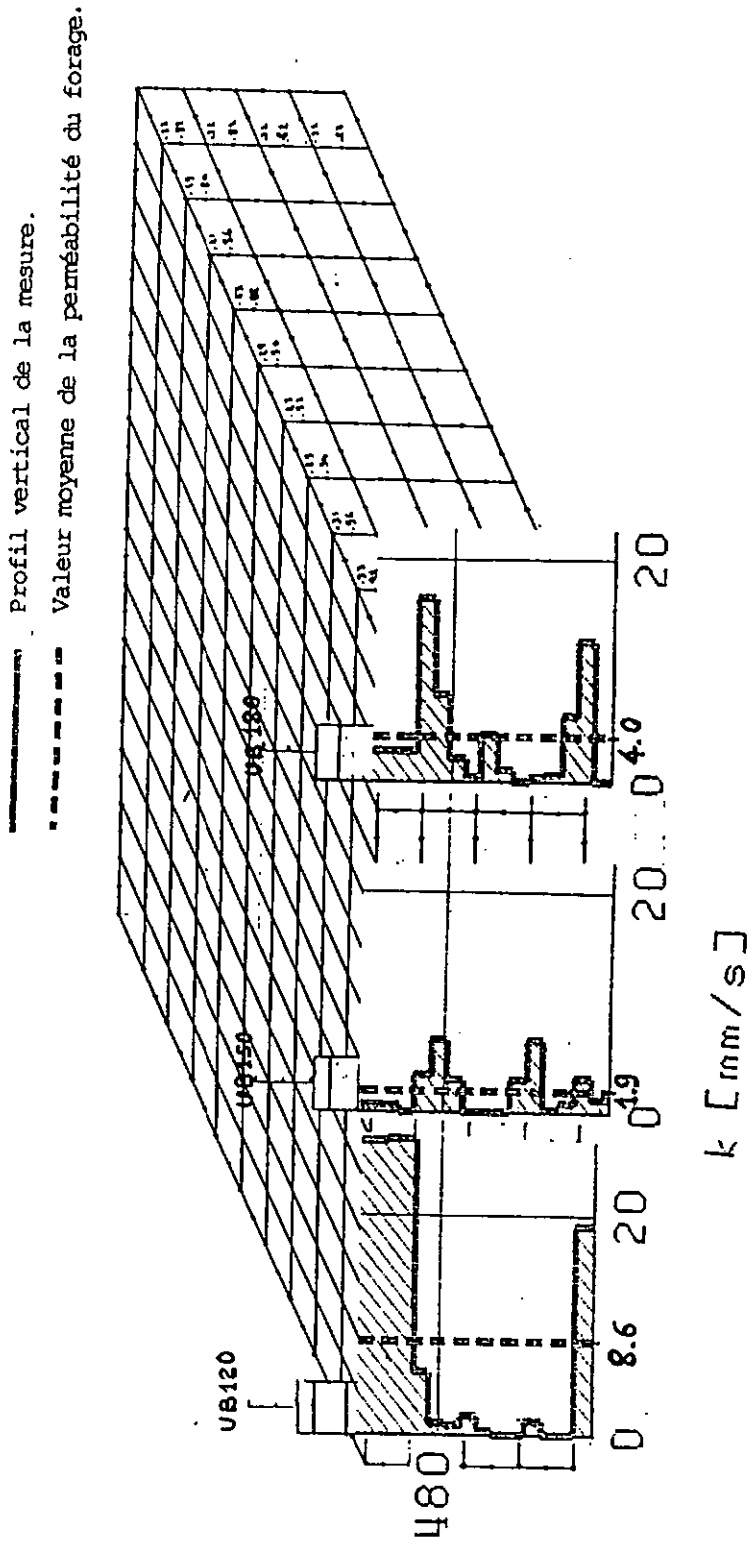


Figure 6.18 : Comparaison entre les limites des éléments et les profils verticaux de mesures de perméabilités par flow mètre dans les piézomètres No 120, 150 et 180.

6.3 Discrétisation par éléments finis

Nous avons choisi de subdiviser le domaine en 600 éléments finis 3-D (15x10x4) constitués par des hexaédres quadratiques de Sérendip (20 nœuds) ayant 3 nœuds par arête, Figure 6.16. Tous les éléments ont la même dimension, soit 3 m x 3 m x 1 m, où 1 m représente la dimension verticale. Ce choix a été guidé par la densité des mesures, de sorte que chaque nœud d'une arête verticale, correspondant à un piézomètre, coïncide avec un point de mesure de température. Nous avons aussi 150 éléments finis 2-D (15x10) constitués par des rectangles quadratiques de Sérendip (8 nœuds), Figure 6.16. Ces éléments de surface représentent la face supérieure des bloc 3-D de la 1^{ière} couche. Leur utilité est de permettre de répartir à chaque nœud de surface, selon sa surface d'influence, la contribution de l'alimentation distribuée qui lui est associée.

Les Figures 6.17 et 6.18 comparent la discrétisation précédente aux coupes stratigraphiques des forages UB120, UB150 et UB180, d'une part, et aux profils de perméabilités mesurés dans ces mêmes forages par la méthode du flow mètre, d'autre part. La subdivision verticale du domaine permet de tenir approximativement compte des changements de lithologie et de perméabilité des différentes séries géologiques rencontrées. Tous les éléments d'une même couche appartiennent à la même classe de perméabilité, d'alimentation distribuée et de conduction. Les données hydrogéologiques sont présentées à l'Annexe C.

6.4 Différentes étapes du calage du modèle

Les différentes étapes du calage d'un modèle de transport sont les suivantes :

- choix des paramètres hydrodynamiques (perméabilités, K, porosité, m, et alimentation distribuée, ALD), des conditions aux limites (krigeage à partir des mesures et affectation des valeurs de potentiel ou de débit à tous les nœuds du contour du domaine), des conditions initiales (attribution d'une valeur de potentiel à tous les nœuds du domaine), de la durée transitoire et du pas de temps;
- simulation hydrodynamique en permanent (calage des paramètres K et ALD), puis en transitoire (calage du paramètre m; ceci peut conduire à reviser les valeurs antérieures de K et ALD, auquel cas il faudrait reprendre la simulation en permanent qui donnera de nouvelles valeurs de K et ALD et ainsi de suite); impression d'autant de variations sensibles du champ de potentiel permettant de calculer toutes les distributions de vitesses requises pour le transport;
- choix des paramètres du transport (coefficient de conduction, D, potentiels et perméabilités K pour le calcul des vitesses, porosité ou coefficient de capacité calorifique adimensionnelle, m, et alimentation distribuée, ALD) des conditions aux limites (krigeage et affectation des valeurs de température ou de concentration à tous les nœuds de contour), des conditions initiales (attribution d'une valeur de température ou de concentration à tous les nœuds du domaine), de la durée transitoire et du pas de temps;
- simulation du transport en permanent (calage de D et ALD, K étant le résultat du calage hydrodynamique), puis en transitoire (calage de m avec risque de modifier le calage en transport permanent, ou même celui de l'hydrodynamique).

a) Choix des paramètres hydrauliques

Nous avons pris un état piézométrique de la campagne de mesure du 13 mars 1986, et fait les hypothèses suivantes :

- la charge hydraulique ne varie pas le long d'une verticale; nous avons interpolé les mesures piézométriques et alloué à tous les nœuds intérieurs et extérieurs du modèle une valeur de potentiel. Ce procédé permet d'éviter de faire une simulation hydrodynamique, et de calculer un champ de vitesse dont la composante verticale est nulle. Ce champ de vitesse ne sera pas unique puisque la perméabilité n'a pas été calée. Le but recherché est en effet de faire varier la vitesse pour voir son influence sur les paramètres thermiques.
- le tenseur de perméabilité est homogène et isotrope sur tout le domaine; on prendra : $10^{-3} \leq K \leq 10^{-2}$ m/s (voir données en Annexe C).
- m, porosité volumique :
 $10 \leq m \leq 20 \%$

b) Paramètres thermiques

De Marsily propose une variation de la conductivité thermique équivalente du milieu, λ , entre 2.0 et 4.3 W/m °C. Les abaques donne des valeurs de la masse volumique, ρ , à 20°C de 998.2 Kg/m³, et de 999.8 Kg/m³ à 0°C; les valeurs de la capacité calorifique massique de l'eau, C, sont de 4.174 x 10⁶ J/m³ °C à 20°C et de 4.217 x 10⁶ J/m³ °C à 0°C. Pour la capacité calorifique volumique du solide, $\rho'C'$, on peut prendre une valeur entre 1.880 et 2.3 x 10⁶ J/m³ °C. La porosité des graviers de Aefligen est de l'ordre de 10 à 20%. Grace à toutes ces données, on peut évaluer des fourchettes de valeurs entre lesquelles varient les paramètres suivants :

- Le rapport du tenseur de conductivité thermique du milieu équivalent à la capacité calorifique volumique du fluide, $[\lambda]/\rho C$, varie entre les valeurs suivantes : $0.474 \leq [\lambda]/\rho C \leq 1.03 \times 10^{-6}$ m²/s.
- Le rapport de la capacité calorifique volumique du milieu équivalent, $\rho''C'' = m\rho C + (1-m)\rho'C'$, à celle de l'eau, ρC , varie comme suit : $0.501 \leq \rho''C''/\rho C \leq 0.641$.

A l'aide de ces paramètres, nous avons fait tourner TRANS3 en régime permanent afin de constater l'effet relatif de leur variation sur le comportement de la solution simulée. Pour cela nous avons supposé que tous les éléments du modèle ont une même classe de perméabilité (homogène et isotrope), K, une même classe de conductibilité thermique rapportée à la capacité calorifique volumique, $[\lambda]/\rho C$, et une même capacité calorifique volumique adimensionnelle, $\rho''C''/\rho C$.

Les figures 6.19 à 6.23 montrent quelques profils thermiques résultant de diverses simulations.

Le profil 4003 - 4456 correspond à une ligne joignant les piézomètres 120 et 420 à 1 m en-dessous de la surface libre de l'aquifère.

6. Projet Altwiden et méthodologie de validation

Le profil 4035 - 4476 correspond à une ligne joignant les piézomètres 150 et 450 à 1 m en-dessous de la surface libre de l'aquifère.

Le profil 4065 - 4494 correspond à une ligne joignant les piézomètres 180 et 480 à 1 m en-dessous de la surface libre de l'aquifère.

Lorsque l'advection est nulle ($K=0$), Figures 6.19 et 6.20, il n'y a pas d'oscillation de la solution, par contre lorsqu'elle devient de plus en plus importante ($K= 10^{-3}$, 5×10^{-3} , puis 10^{-2}), Figures 6.21, 6.22 et 6.23, les oscillations augmentent à toute chose égale par ailleurs. En effet lorsque l'advection devient prépondérante par rapport à la conduction, il s'établit une dispersion numérique due au changement de type de l'équation différentielle régissant le transport.

Nous attirons l'attention de l'utilisateur sur ce phénomène d'oscillation qui ne fausse pas les calculs mais qui ne présente pas bien.

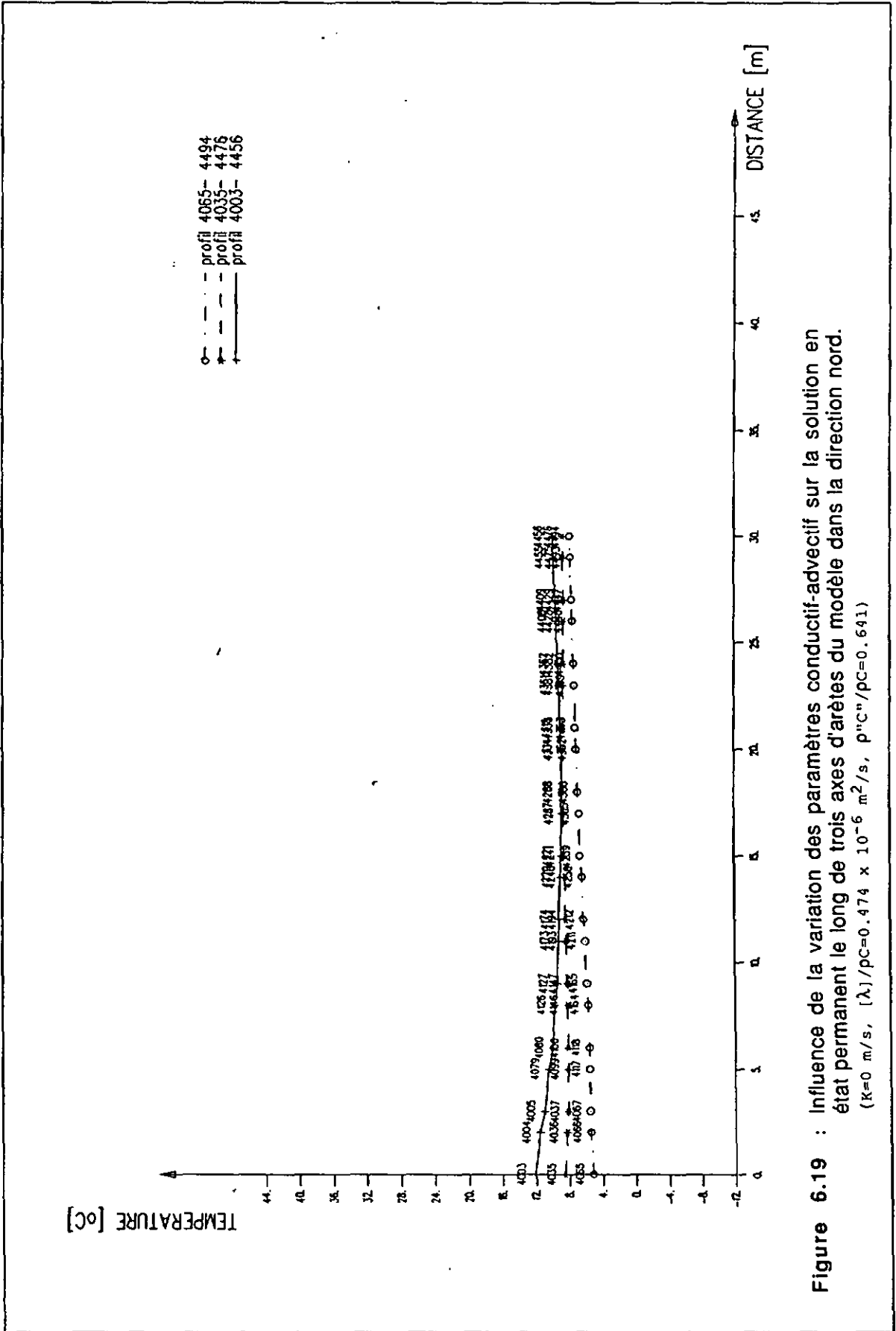


Figure 6.19 : Influence de la variation des paramètres conductif-advectif sur la solution en état permanent le long de trois axes d'arêtes du modèle dans la direction nord.
 (K=0 m/s, [λ]/ρC=0.474 x 10⁻⁶ m²/s, ρ"C"/ρC=0.641)

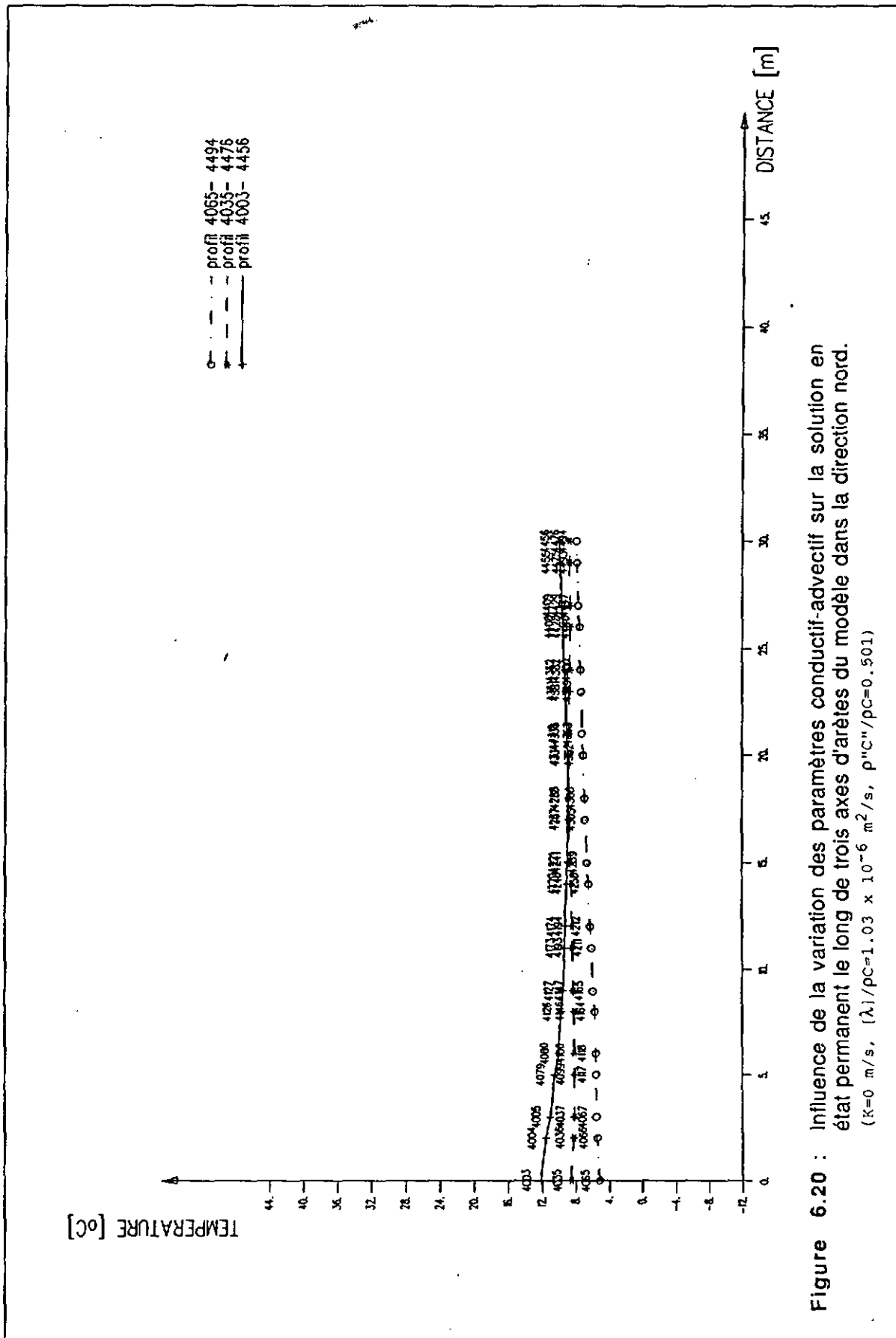


Figure 6.20 : Influence de la variation des paramètres conductif-advecif sur la solution en état permanent le long de trois axes d'arêtes du modèle dans la direction nord.
 (K=0 m/s, $[\lambda]/\rho C=1.03 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$, $\rho^*C^*/\rho C=0.501$)

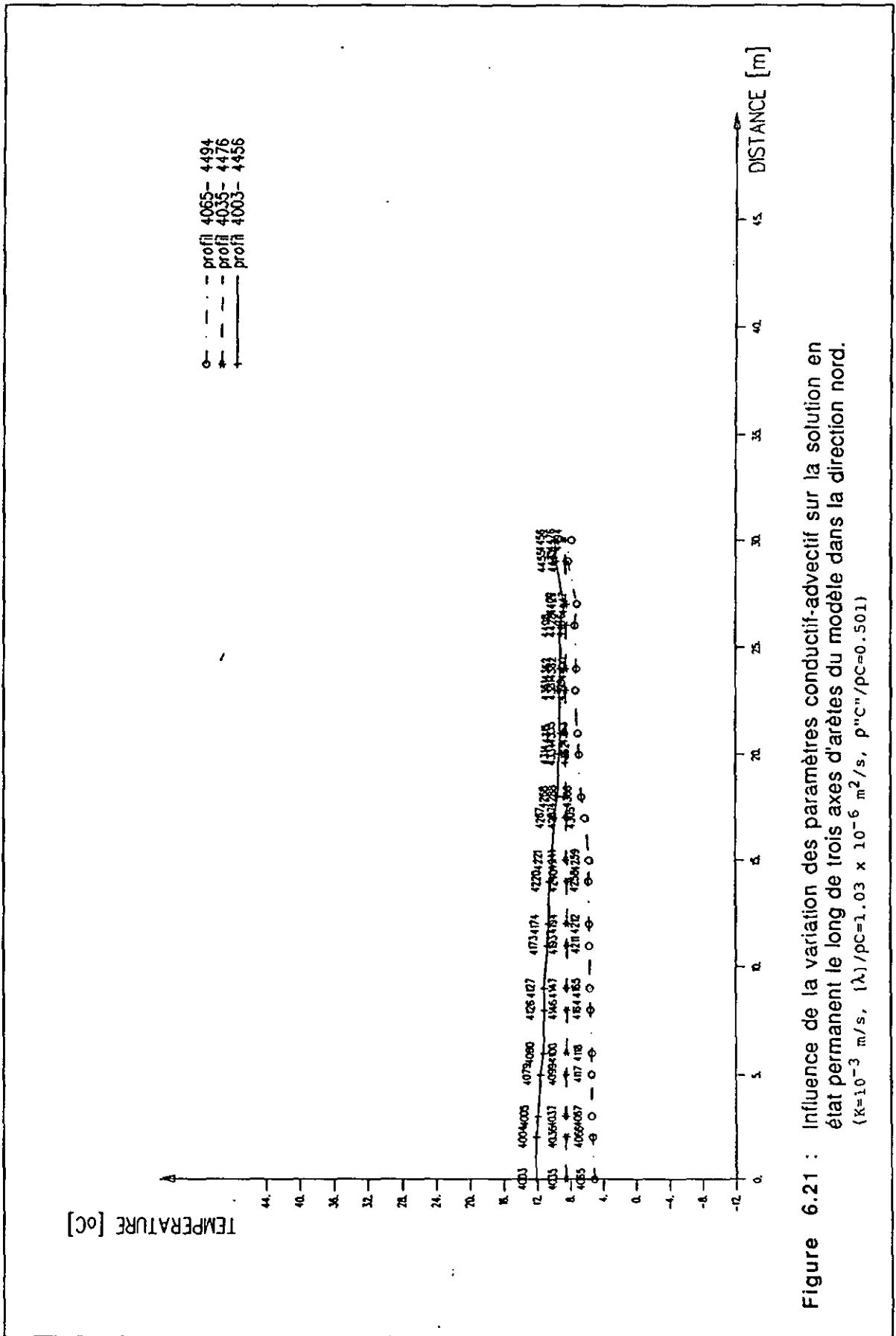
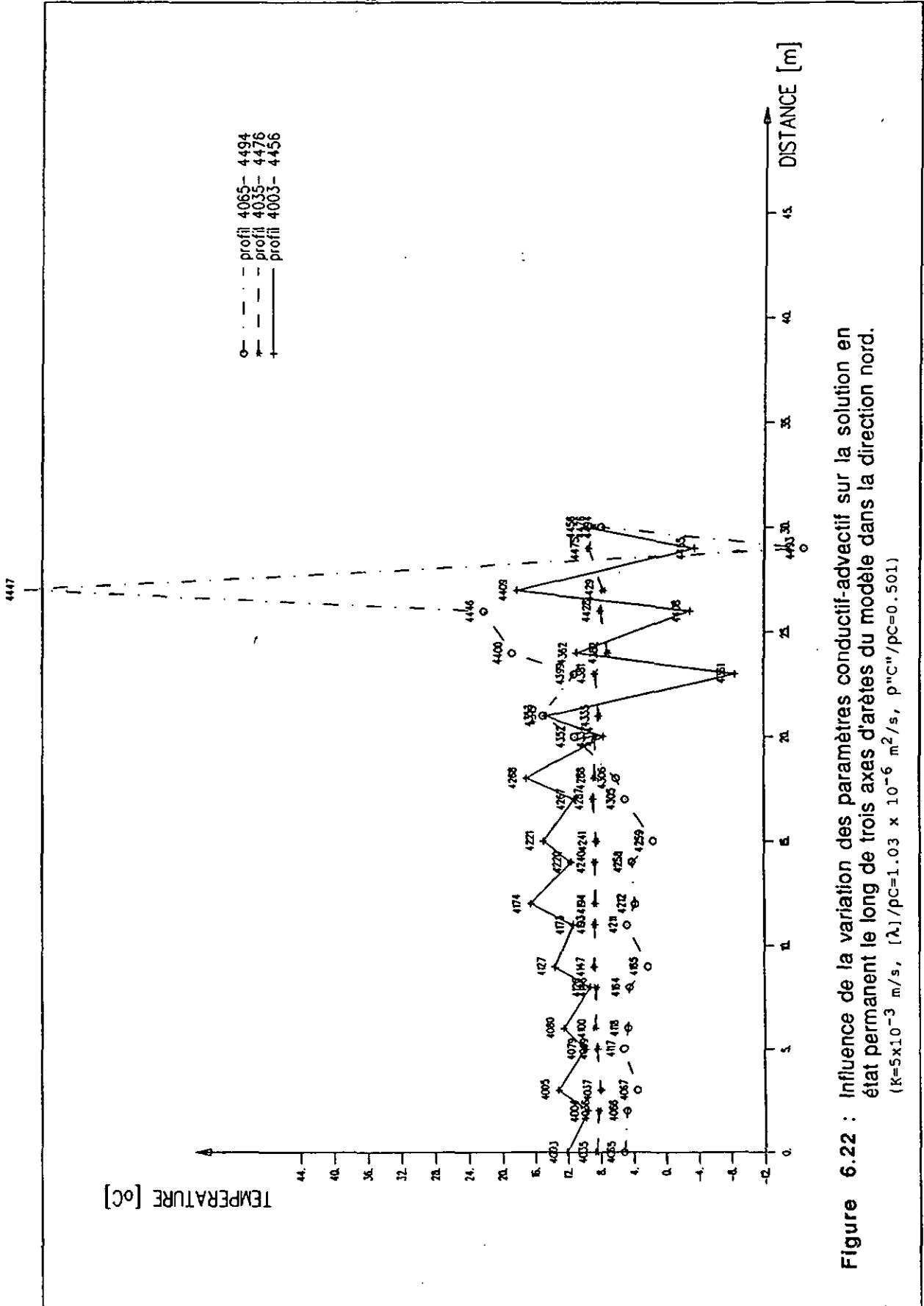


Figure 6.21 : Influence de la variation des paramètres conductif-advecitif sur la solution en état permanent le long de trois axes d'arêtes du modèle dans la direction nord.
 ($K=10^{-3}$ m/s, $(\lambda)/\rho C=1.03 \times 10^{-6}$ m²/s, $\rho^*C^*/\rho C=0.501$)



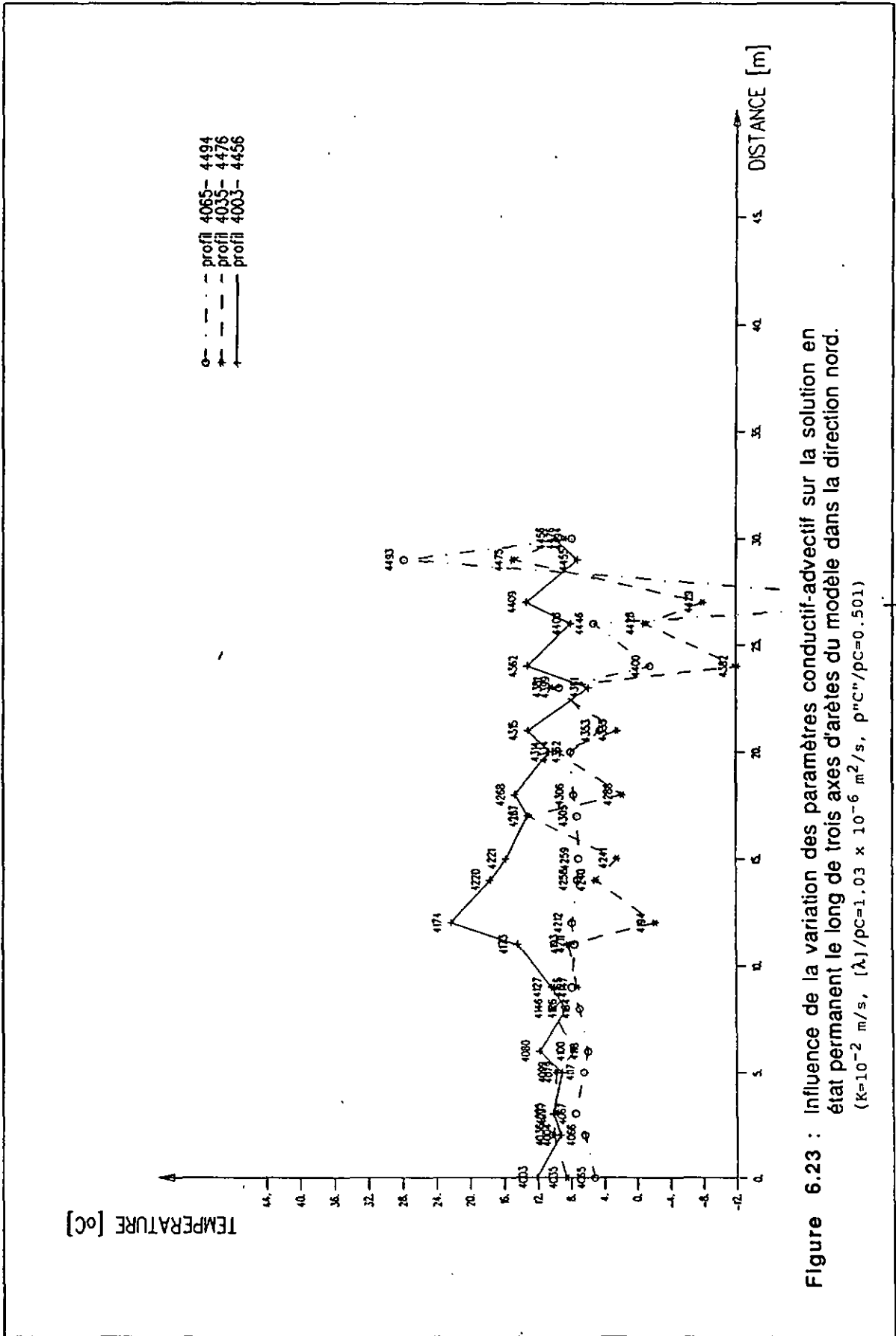


Figure 6.23 : Influence de la variation des paramètres conductif-advectif sur la solution en état permanent le long de trois axes d'arêtes du modèle dans la direction nord.
 ($K=10^{-2}$ m/s, $[\lambda]/\rho C=1.03 \times 10^{-6}$ m²/s, $\rho^{*}C^{*}/\rho C=0.501$)

7. Conclusion et recommandations

Le but des travaux présentés dans cet ouvrage est de concevoir un logiciel permettant de simuler un écoulement hydrodynamique et un processus de transfert de masse ou d'énergie, en état permanent ou transitoire. Le domaine à l'étude est tridimensionnel et peut être discrétisé par un découpage par éléments finis 1-D, 2-D et/ou 3-D, tous plongés dans un espace 3-D. C'est cet assemblage d'éléments de diverses dimensions qui fait l'originalité de TRANS3. Il permet en effet de tenir compte des discontinuités unidimensionnelles ou bidimensionnelles au sein d'un aquifère isotrope ou anisotrope par rapport à sa perméabilité.

TRANS3 fonctionne assez bien mais ses limites n'ont pas été toutes sondées. Cela ne peut d'ailleurs se faire qu'au prix d'un nombre élevé de modèles différents, sollicitant des réaménagements de TRANS3 à cause d'insuffisances quelconques.

Malgré le haut degré de confiance que nous portons à TRANS3, nous croyons devoir insister plus que jamais sur le fait que les modèles doivent être considérés comme des instruments d'aide à la prise de décision. Si les principes de base de l'écoulement de l'eau souterraine (ou du transfert de masse ou d'énergie) et les hypothèses sous-tendant la modélisation sont perdus de vue, il y aura un sérieux danger d'effectuer de très mauvaises interprétations des résultats du modèle. Dans l'application de tous modèles, et plus spécialement de ceux traitant de la qualité de l'eau souterraine, un degré de jugement scientifique élevé, tempéré par une expérience de terrain, est désirable pour cerner les interprétations des anomalies naturelles.

Une des restrictions les plus importantes de TRANS3 est l'hypothèse de validité de la loi de Darcy. La panoplie des divers types d'éléments que l'on peut utiliser avec ce logiciel, se prête assez bien à une simulation des hétérogénéités karstiques. Cependant ladite loi ne s'y trouve pas toujours respectée. Il serait donc souhaitable d'implémenter TRANS3 pour pouvoir traiter ces écoulements turbulents. Dans le même ordre d'idée, il devrait être envisagé de résoudre les problèmes de transfert de masse ou d'énergie pour lesquels les paramètres advectifs sont prépondérants par rapport aux coefficients de conduction. Des techniques récentes, telle que la méthode "Up wind" (en traduction littérale "contre courant"), se sont révélées comme étant des artifices mathématiques ayant donné des résultats probants.

La discrétisation temporelle a été faite à l'aide de la méthode de semi-implicite de Crank-Nicholson. Ce choix nous a été recommandé par certains auteurs, suite à quelques problèmes de stabilité de la solution produits par la méthode explicite.

L'avantage de la méthode explicite est la rapidité des calculs. Elle présente cependant deux inconvénients majeurs : elle est d'ordre 1 en temps, et il faut vérifier la condition de stabilité de la solution. Il va de soit que cette non stabilité n'est pas dérangeante, dans la mesure où la convergence de la solution n'en est pas affectée.

Par contre la méthode de Crank-Nicholson offre les deux avantages d'être inconditionnellement stable, et d'ordre 2 en temps. Son seul inconvénient, et pas des moindres, c'est qu'elle est difficile à résoudre numériquement, donnant ainsi des temps de calculs qui peuvent être élevés.

7. Conclusion et recommandations

Par rapport à toutes les hypothèses simplificatrices qui régissent l'écoulement souterrain et à toutes les erreurs qui accompagnent l'acquisition in-situ des paramètres hydrodynamiques. On pourrait se demander s'il est justifié d'utiliser une méthode de discrétisation d'ordre 2 en temps. Une comparaison de ces deux méthodes, basée sur le choix du pas de temps et du pas d'espace assurant la convergence et la stabilité.

Annexe A : Fonctions d'interpolation quadratiques utilisées dans TRANS3.

Dans cette section, nous présentons les familles d'éléments uni-, bi-, et tri-dimensionnels pouvant être appliqués aux problèmes requérant une continuité C^0 de la fonction u . Pour de tels problèmes, nous utilisons les valeurs nodales de la fonction inconnue comme étant les degrés de liberté de l'élément. Nous prendrons trois valeurs nodales de u le long de chaque arête d'élément pour avoir une représentation quadratique de u .

A.1 Eléments d'ordre 2 de la famille de Lagrange.

La famille de Lagrange est ainsi dénommée parce que les fonctions de base des éléments de cette famille peuvent être déduites simplement d'un produit tensoriel des polynômes de Lagrange à une dimension.

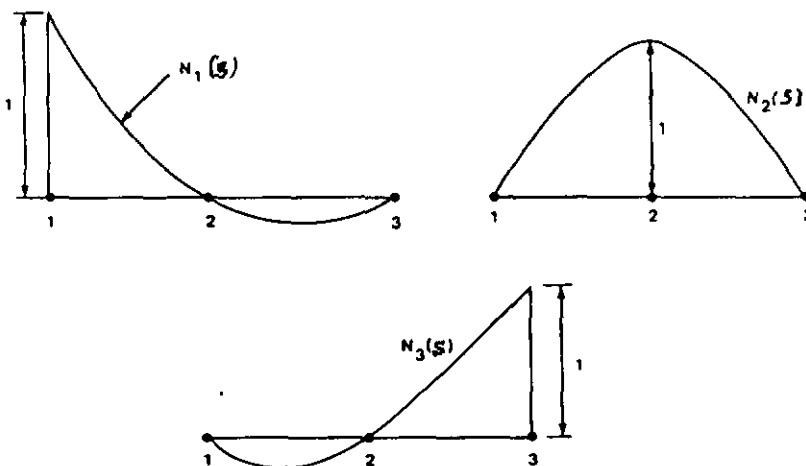
Si nous utilisons une interpolation de Lagrange pour obtenir une fonction de forme d'ordre m , il faudra avoir $m+1$ points nodaux. Ainsi nous aurons, en coordonnées locales ou isoparamétriques :

$$N_i(s) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{m+1} \left[\frac{s-s_j}{s_i-s_j} \right]$$

Pour les éléments quadratiques, on prendra $m = 2$. On peut montrer que les fonctions d'interpolation de Lagrange satisfont les conditions de continuité de la fonction inconnue sur les interfaces des éléments. Une telle condition de continuité est appelée "continuité C^0 ".

a) Elément quadratique 1-D (3 nœuds).

Pour un élément 1-D à trois nœuds les polynômes d'ordre 2 ont l'expression simplifiée suivante :



$$N_1(s) = 1/2 s s_i (1 + s s_i)$$

$$N_3(s) = (1 - s^2)$$

pour les nœuds sommets,
pour le nœud milieu.

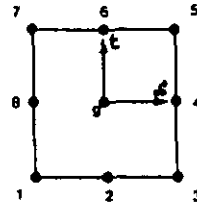
b) Élément quadratique 2-D (9 nœuds).

Les fonctions de base sont des produits de polynômes 1-D de Lagrange dans les coordonnées 2-D isoparamétriques s et t . Ainsi pour le nœud i nous avons :

$$N_i(s,t) = N_i(s)N_i(t)$$

où $N_i(s)$ et $N_i(t)$ représentent les polynômes 1-D de Lagrange en s et t , respectivement.

$$N_i(s,t) = \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{4}ss_i(1+ss_i)tt_i(1+tt_i) \\ \text{pour les nœuds sommets,} \\ \frac{1}{2}(1-s^2)tt_i(1+tt_i) \\ \text{pour les nœuds avec } s_i=0, t_i=\pm 1, \\ \frac{1}{2}ss_i(1+ss_i)(1-t^2) \\ \text{pour les nœuds avec } s_i=\pm 1, t_i=0. \end{array} \right.$$



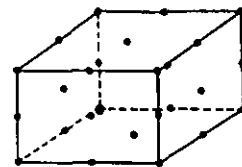
c) Élément hexaédrique (ou brique 3-D) quadratique (27 nœuds).

Les fonctions de base sont des produits de polynômes 1-D de Lagrange dans les coordonnées 3-D isoparamétriques s , t et u . Ainsi pour le nœud i nous avons :

$$N_i(s,t,u) = N_i(s)N_i(t)N_i(u)$$

où $N_i(s)$, $N_i(t)$ et $N_i(u)$ représentent les polynômes 1-D de Lagrange en s , t et u respectivement.

$$N_i(s,t,u) = \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{8}ss_i(1+ss_i)tt_i(1+tt_i)uu_i(1+uu_i) \\ \text{pour les nœuds sommets,} \\ \frac{1}{4}(1-s^2)tt_i(1+tt_i)uu_i(1+uu_i) \\ \text{pour les nœuds avec } s_i=0, t_i=u_i=\pm 1, \\ \frac{1}{4}ss_i(1+ss_i)(1-t^2)uu_i(1+uu_i) \\ \text{pour les nœuds avec } t_i=0, s_i=u_i=\pm 1, \\ \frac{1}{4}ss_i(1+ss_i)tt_i(1+tt_i)(1-u^2) \\ \text{pour les nœuds avec } u_i=0, s_i=t_i=\pm 1. \end{array} \right.$$



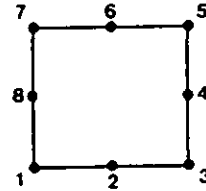
A.2 Éléments d'ordre 2 de la famille de Sérendip.

Dans cette famille l'élément contient uniquement des nœuds extérieurs.

a) Élément quadratique 2-D (8 nœuds).

Les fonctions de forme sont :

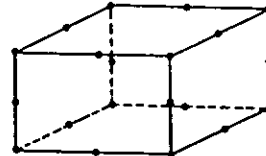
$$N_i(s,t) = \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{4}(1+ss_i)(1+tt_i)(ss_i+tt_i-1) \\ \text{pour les nœuds sommets,} \\ \frac{1}{2}(1-s^2)(1+tt_i) \\ \text{pour les nœuds avec } s_i=0, t_i=\pm 1 \\ \frac{1}{2}(1+ss_i)(1-t^2) \\ \text{pour les nœuds avec } s_i=\pm 1, t_i=0. \end{array} \right.$$



b) Élément hexaédrique (ou brique 3-D) quadratique (20 nœuds).

Du fait que les éléments de Sérendip ne contiennent que des nœuds extérieurs sur les arêtes des éléments, ceux de Lagrange présentent un désavantage à cause du nombre élevé des nœuds de milieu de face et intérieur. C'est pour cette raison que les éléments de Sérendip sont préférés. Les fonctions de base d'un élément hexaédrique quadratique peuvent être dérivées par la méthode directe (HUYAKORN, PINDER, 1983) ou par inspection.

$$N_i(s,t,u) = \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{8}(1+ss_i)(1+tt_i)(1+uu_i)(ss_i+tt_i+uu_i-2) \\ \text{pour les nœuds sommets,} \\ \frac{1}{4}(1-s^2)(1+tt_i)(1+uu_i) \\ \text{pour les nœuds avec } s_i=0, t_i=u_i=\pm 1, \\ \frac{1}{4}(1+ss_i)(1-t^2)(1+uu_i) \\ \text{pour les nœuds avec } t_i=0, s_i=u_i=\pm 1, \\ \frac{1}{4}(1+ss_i)(1+tt_i)(1-u^2) \\ \text{pour les nœuds avec } u_i=0, s_i=t_i=\pm 1. \end{array} \right.$$

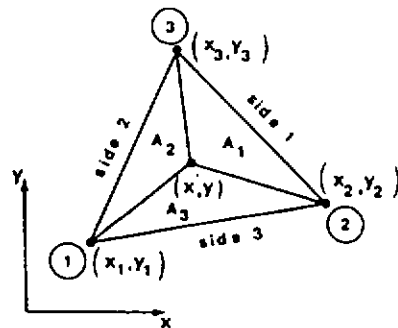
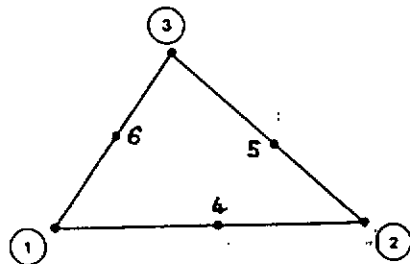


A.3 Éléments en coordonnées naturelles.

a) Élément quadratique triangulaire (6 nœuds).

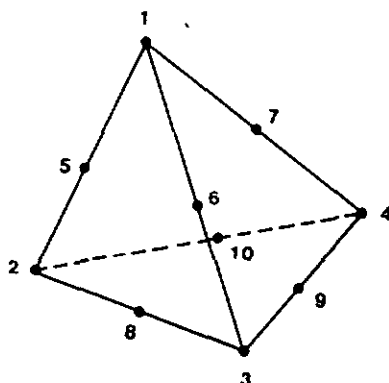
Les fonctions de base de la famille des éléments triangulaires peuvent être simples lorsqu'elles sont exprimées en coordonnées naturelles (ou de surface).

$$\begin{array}{l} N_1 = L_1(2L_1-1) \\ N_2 = L_2(2L_2-1) \\ N_3 = L_3(2L_3-1) \\ N_4 = 4L_1L_2 \\ N_5 = 4L_2L_3 \\ N_6 = 4L_3L_1 \end{array}$$



b) Élément quadratique tétraédrique (10 nœuds).

La formulation des fonctions de base pour cet élément 3-D est une extension directe du cas 2-D, en coordonnées naturelles (ou de volume).



$$N_i = L_i(2L_i - 1) \quad i = 1, 2, 3, 4, \quad \text{pour les nœuds sommets,}$$

$$N_5 = 4L_1L_2 \quad N_6 = 4L_1L_3 \quad \text{etc.,} \quad \text{pour les nœuds milieux d'arête.}$$

c) Prism quadratique triangulaire (15 nœuds).

$$N_1 = 1/2L_1(2L_1 - 1)(1 + u) - 1/2L_1(1 - u^2)$$

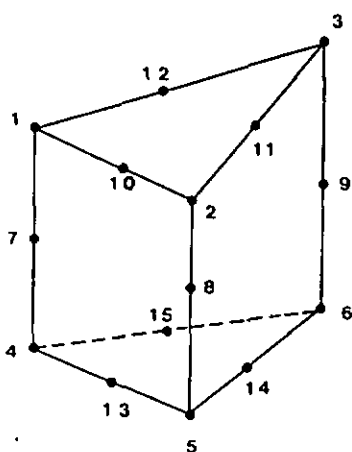
pour un nœud typique sommet,

$$N_7 = L_1(1 - u^2)$$

pour un nœud typique milieu d'arête de quadrangle,

$$N_{10} = 2L_1L_2(1 + u)$$

pour un nœud typique milieu d'arête de triangle.



B.1 Définition des principales variables

Seulement les noms des variables les plus importantes sont définies ici, et uniquement si elles ne sont pas déjà définies dans le listing lui-même. Puisque les noms des sous-routines et des fichiers sont expliqués à la section 4.2, ces définitions ne seront pas répétées non plus.

AL, BL, CL : coordonnées d'aire ou de volume pour triangle et tétraèdre.
 BX, BY, BZ : lignes de la matrice des gradients (dérivées des fonctions d'interpolation par rapport aux coordonnées globales x, y et z).
 B : "grande" matrice de travail des coefficients, stockée en mémoire durant l'assemblage et l'élimination des équations.
 BM : vecteur de la $m^{\text{ième}}$ ligne de B.
 C2 : vecteur des valeurs moyennes nodales calculées ou imposées de C sur un intervalle de temps IDT.
 C : vecteur des valeurs nodales des conditions aux limites ou calculées de la charge hydraulique, de la concentration ou de la température, selon la simulation effectuée.
 CLEC : matrice de stockage des variations de C sur toute la période transitoire.
 DETJ : déterminant de la matrice jacobienne, ou encore racine carrée du déterminant du tenseur métrique covariant.
 DMAT, CMAT et PMAT : matrices des coefficients élémentaires. Elles seront assemblées dans la matrice B et dans le vecteur RHS de travail, pour former les équations.
 DOMINF : vecteur des domaines d'influence (longueur, surface ou volume) pour chaque nœud d'un élément donné.
 DT2 : moitié du pas de temps converti en secondes.
 FACX, FACY, FACZ : facteurs d'échelle pour les coordonnées x, y et z.
 FN : vecteur des fonctions d'interpolation pour un point donné d'un élément.
 FNDS, FNDD, FNDU : vecteur des dérivées des fonctions d'interpolation par rapport aux coordonnées locales pour un point donné d'un élément.
 H : vecteur des valeurs nodales de la charge hydraulique servant à calculer la vitesse du terme advectif.
 HLEC : matrice de stockage de toutes les variations de H durant la période transitoire.
 ID : vecteur auxiliaire indiquant le nombre d'apparition de chaque variable.
 IDT : pas de temps en jours pour le calcul transitoire.
 ICODE : vecteur auxiliaire, pour un élément donné, servant à contrôler l'apparition des nœuds lors de l'assemblage et de l'élimination.
 IFLAG : drapeau servant à gérer l'assemblage et l'élimination de B à chaque pas de temps.
 ILEC : vecteur des durées indiquant le moment des variations des paramètres transitoires.
 ITPRINT : paramètre temporel en jours contrôlant l'impression.
 ITMAX : durée totale en jours de la période transitoire.
 IV : vecteur auxiliaire servant à identifier les variables actives dans B et RHS.
 KODE : vecteur des codes d'imposition de la condition aux limites de chaque nœud.
 KR : nombre de points nodaux dans l'élément.
 KSTOP : permet de gérer le calcul des vitesses en conformité avec ILEC, l'impression des résultats, et la fin du traitement transitoire.
 LI : permet de traiter soit un cas hydrodynamique, soit un cas de transport.
 LONG : est la dimension courante de IV, B et RHS.
 LVB : vecteur des numéros de nœud pour un élément donné.
 LVBIV : vecteur, pour un élément donné, contrôlant l'adresse des variables dans IV, B et RHS.

MXFR : largeur maximale du front. C'est la taille maximale de IV, B et RHS.
 MXLM : nombre total d'éléments.
 MXND, MXNQ : nombre total de classes de perméabilité (ou de conduction), et d'alimentation distribuée.
 MXNIC, MNNIC : plus grand et plus petit numéro de nœud.
 MXNODE : nombre total de points nodaux du modèle.
 NAR : nombre d'arêtes ou d'extrémités d'un élément.
 ND, NQ : classe de perméabilité (ou de conduction) et d'alimentation distribuée d'un élément.
 NLEC : nombre de variations des paramètres transitoires.
 NVIT : code permettant de contrôler le calcul des vitesses.
 PER : matrice de toutes les valeurs de perméabilité (ou conduction).
 PERM : matrice de perméabilité d'un élément.
 PIVOT : terme de la diagonale de B.
 POR : vecteur de toutes les valeurs de chaque classe de porosité.
 Q2 : vecteur des débits moyens nodaux multipliés par DT2.
 Q : vecteur des débits nodaux ou apport de l'alimentation distribuée.
 QD : vecteur de toutes les alimentations distribuées.
 QDLEC : matrice des variations de toutes les alimentations distribuées sur toute la période transitoire.
 QLEC : matrice des variations de tous les débits nodaux sur la période transitoire.
 RHS : vecteur des membres de droite des équations.
 RHSEL : valeur de la variable pour une équation à éliminer.
 RHSM, RHSMA : valeur du terme de droite pour une équation à éliminer.
 S, T, U : coordonnées locales d'un point donné d'un élément.
 VAL : vecteur auxiliaire des valeurs de la fonction, associées aux variables actives.
 X, Y, Z : vecteur de toutes les coordonnées globales.
 XN, YN, ZN : vecteur des coordonnées globales des points nodaux d'un élément particulier.

B.2 Listing de TRANS3

B.2.1 Module principal de TRANS3

```

PROGRAM TRANS3
IMPLICIT REAL*8 (A,C,D,P,Q,V,X,Y,Z)
CHARACTER*60 HD1,HD2,HD3,HD4,HD5,HD6,NAM*50,LI*15
PARAMETER (IV1=20000,IV2=30,IV3=10000,IV4=52,MXFR=300)
DIMENSION C (IV1), ID (IV1), KODE (IV1), Q (IV1), X (IV1), ILEC (IV4)
DIMENSION Y (IV1), Z (IV1), VX (IV1), VY (IV1), VZ (IV1), CLEC (IV1, IV4)
DIMENSION DIS (6, IV2), QD (IV2), NODE (IV3), POR (IV2), QLEC (IV1, IV4)
DIMENSION QDLEC (IV2, IV4), HLEC (IV1, IV4), H (IV1), PER (6, IV2)
DATA INELM, INCOR, INPAR, INMAT, INEQU/11, 12, 13, 14, 15/
+INRES, INDST/16, 17/
DATA HD1/' *****'/
+HD2/' * "TRANS3" - MODELE A ELEMENTS FINIS */
+HD3/' * TRANSPORT CONDUCTIF/ADVECTIF PERMANENT OU TRAN- */
+HD4/' * SITOIRE - TRIDI */
+HD5/' * CENTRE D'HYDROGEOLOGIE (UNIVERSITE DE NEUCHATEL) */
+HD6/' * VERSION DU 09-04-1989 */

```

C..Ce programme est appelé par le fichier de commande TRANS3A.COM
C..qui est lui-même activé par le fichier de commande TRANS3.COM.
C..Ces fichiers de commande effectuent les assignations de tous les
C..fichiers de données et du répertoire de travail.

C..Compilation..... '\$FOR TRANS3'
C..Linkage..... '\$LINK/EXE=PROG:TRANS3 TRANS3'
C..Exécution..... '\$@DISK\$GEOL:[SOUMA.COM]TRANS3'

C..IV1= plus élevé numéro de nœud du réseau;
C..IV2= nombre total de classes de conduction ou d'alimentation
C.. distribuée;
C..IV3= nombre total maximum de nœuds du réseau;
C..MXFR= a) largeur maximale admise du front de l'élimination;
C.. b) nombre maximum admis de variables actives;
C.. c) dimension maximale admise de la matrice de travail;
C.. (ne pas confondre avec MXLONG qui en est la dimension
C.. maximale calculée) .
C..IV4= nombre max de changements simultanés des paramètres
C.. suivants: - alimentation distribuée
C.. - conditions aux limites
C.. - potentiels servant à calculer le champ
C.. de vitesse.
C.. Ces 3 ensembles de paramètres doivent être en nombre
C.. identique.

```

C..*****
C..* MODELE TRIDI - PERMANENT OU TRANSITOIRE *
C..*****
100 FORMAT(/7(4X,A60/))
200 FORMAT(/4X,' FICHIERS DES DONNEES: '/
1 4X,' ***** ',A50)
300 FORMAT(28X,A50)
400 FORMAT(4X,' FICHIER DE SORTIE: '/
1 4X,' ***** ',//)
500 FORMAT(4X,' PARAMETRES DE CONTROLE: '/
1 4X,' *****')
600 FORMAT(4X,' MNNIC=' I5, 5X, 'MXNIC=', I5, 5X, 'MXNQ=', I3, 5X, 'MXND=', I3)

```

```

700 FORMAT(4X, ' MXLM=', I5, 5X, 'MXNODE=', I5, 5X, 'MXLONG=', I3/)
800 FORMAT(/' LE FRONT DEPASSE ', I4)
900 FORMAT(/' CALCUL INTERROMPU APRES L''ELIMINATION SYMBOLIQUE')
1010 FORMAT(A)
      OPEN (UNIT=INELM, STATUS='OLD', FILE='FIELM',
1FORM='FORMATTED', ACCESS='SEQUENTIAL')
      OPEN (UNIT=INCOR, STATUS='OLD', FILE='FICOR',
1FORM='FORMATTED', ACCESS='SEQUENTIAL')
      OPEN (UNIT=INPAR, STATUS='OLD', FILE='FIPAR',
1FORM='FORMATTED', ACCESS='SEQUENTIAL')
      OPEN (UNIT=INRES, STATUS='NEW', FILE='FIRES',
1FORM='FORMATTED', ACCESS='SEQUENTIAL')
      OPEN (UNIT=INDST, STATUS='SCRATCH',
1FORM='UNFORMATTED', ACCESS='SEQUENTIAL')
      WRITE (INRES, 100) HD1, HD2, HD3, HD4, HD5, HD6, HD1
      READ (INELM, 1010) NAM
      REWIND INELM
      WRITE (INRES, 200) NAM
      READ (INCOR, 1010) NAM
      REWIND INCOR
      WRITE (INRES, 300) NAM
      READ (INPAR, 1010) NAM
      REWIND INPAR
      WRITE (INRES, 300) NAM
      WRITE (INRES, 400)
      CALL CODESYM(MXLM, MNNIC, MXNIC, MXNQ, MXND, MXNODE, MXLONG, NODE, ID,
+ISTOP)
      WRITE (INRES, 500)
      WRITE (INRES, 600) MNNIC, MXNIC, MXNQ, MXND
      WRITE (INRES, 700) MXLM, MXNODE, MXLONG
      IF (MXLONG.GT.MXFR) THEN
        WRITE (INRES, 800) MXFR
        ISTOP=ISTOP+1
      END IF
      IF (ISTOP.NE.0) THEN
        WRITE (INRES, 900)
        STOP
      END IF
      OPEN (UNIT=INMAT, STATUS='SCRATCH',
1FORM='UNFORMATTED', ACCESS='SEQUENTIAL')
C..Calcul de RECL pour le fichier des équations:
C Sur CRAY INTEGER*4, INTEGER*8, REAL*4 et REAL*8 occupent tous 64 bits chacun.
C Sur CRAY 1 mot = 64 bits. L'écriture suivante transfère:
C.. - 4 entiers -----> 4 mots
C.. - (2 * MXLONG + 1) réels -----> (2*MXLONG+1) mots
C dans un fichier à accès direct .
C.. WRITE (INEQU, REC=NEQ) LONG, M, IVM, KO, (B(M, II), II=1, LONG), RHSM,
C..1 (B(II, M), II=1, LONG)
C La longueur maximale d'un enregistrement s'évalue comme suit:
Nrl=8*(2*MXLONG+5) !RCL=8 fois le nbre de mots pour I/O unformatted (CRAY)
OPEN (UNIT=INEQU, STATUS='SCRATCH', ACCESS='DIRECT',
+FORM='UNFORMATTED', RECL=Nrl)
CALL LECCOR (INCOR, INRES, MXNIC, X, Y, Z, ID)
CALL LECDIS (INPAR, INRES, DIS, POR, MXND, LI)
CALL LECAL (INPAR, INRES, QDLEC, MXNQ, NLEC, ILEC) ! 16.08.87
IF (INDEX (LI, 'PERMEABILITE').EQ.0) THEN
  CALL LECVIT (INPAR, INRES, NVIT, VXX, VYY, VZZ) ! 16.08.87
  IF (NVIT.EQ.0) THEN ! 16.08.87
    CALL LECPOT (MXNODE, MXND, INRES, HLEC, NLEC, PER)
    DO 10 NIC=1, MXNIC

```

```

      H(NIC)=HLEC(NIC,1)
10    CONTINUE
      CALL VIT(MXNODE,NODE,VX,VY,VZ,MXND,X,Y,Z,ISTOP,MXLONG,
*      INEQU,INELM,INDST,INRES,H,PER)
      ELSE IF(NVIT.EQ.1) THEN ! 16.08.87
      CALL VITUNI(MXNODE,NODE,VXX,VYY,VZZ,VX,VY,VZ) ! 16.08.87
      END IF ! 16.08.87
      END IF
      CALL MATELM(X,Y,Z,DIS,VX,VY,VZ,ISTOP,POR)
      IF(ISTOP.NE.0) THEN
      STOP ' Erreur '
      END IF
      CALL LECOND(INPAR,INRES,CLEC,QLEC,KODE,NLEC)
      DO 20 I=1,MXNODE
      NIC=NODE(I)
      C(NIC)=CLEC(NIC,1)
      Q(NIC)=QLEC(NIC,1)
20    CONTINUE
      CALL LECTRANS(INPAR,INRES,IDT,ITPRINT,ITMAX)
      IF(IDT.EQ.0) THEN
      CALL STEADY(INDST,INMAT,INRES,INEQU,NODE,C,Q,MXNODE,
1      KODE,QD,QDLEC,MXLONG,MXNQ)
      ELSE IF(IDT.GT.0) THEN
      CALL TRANST(INDST,INMAT,INRES,INEQU,NODE,C,Q,MXNODE,
1      KODE,QD,IDT,ITPRINT,ITMAX,MXNIC,MXLONG,NLEC,CLEC,QLEC,QDLEC,
2      HLEC,H,ILEC,NVIT,VX,VY,VZ,MXND,MXNQ,PER,POR)
      END IF
      STOP ' Fin de TRANS3 '
      END

```

B.2.2 Elimination symbolique

```

SUBROUTINE CODESYM(MXLM,MNNIC,MXNIC,MXNQ,MXND,MXNODE,MXLONG,
1      NODE,ID,ISTOP)
CHARACTER*80 LINE
PARAMETER (MXFR=300)
DIMENSION LVB(27),LVBIV(27),ICODE(27)
DIMENSION IV(MXFR),IVB(27),ID(1),NODE(1)
DATA INELM,INRES,INDST/11,16,17/
100  FORMAT(A)
200  FORMAT(' LM=',I5,' NOD=',I6,' APPARAIT ',I2,' FOIS'/)
C..Procédure d'élimination symbolique
C..Block 1. Evaluation du nombre total d'apparition de chaque nœud.
MXLM=0
MNNIC=100000
MXNIC=0
MXNQ=0
MXND=0
MXNODE=0
MXLONG=1
ISTOP=0
LONG=0
DO 5 I=1,MXFR
  IV(I)=0
5  CONTINUE
10  READ(INELM,100)LINE
  IF(INDEX(LINE,'ELEMENTS').EQ.0)GO TO 10
15  READ(INELM,*,END=25)LM,NQ,ND,KR,NAR,(LVB(K),K=1,KR)
  MXLM=MXLM+1

```

```

DO 20 K=1, KR
  NIC=LVB(K)
  ID(NIC)=ID(NIC)+1
  IF(NIC.LT.MNNIC) MNNIC=NIC
  IF(NIC.GT.MXNIC) MXNIC=NIC
C..If NAR.GE.0: la répétition d'un numéro de nœud dans le même
C..      élément n'est pas permise.
C..If NAR.LT.0: des numéros de nœuds peuvent être répétés dans un
C..      même élément (réduction d'un bord à un point).
  IF(NAR.GE.0.AND.IVB(K).EQ.0) THEN
    KK=K+1
    IREP=1
16    IF(KK.LE.KR) THEN
      IF(NIC.EQ.LVB(KK)) THEN
        IVB(KK)=1
        IREP=IREP+1
      END IF
      KK=KK+1
      GOTO 16
    END IF
    IF(IREP.NE.1) THEN
      WRITE(INRES,200) LM, NIC, IREP
      IVB(K)=0
      ISTOP=ISTOP+1
    END IF
  END IF
20  CONTINUE
  IF(NQ.GT.MXNQ) MXNQ=NQ
  IF(ND.GT.MXND) MXND=ND
  GOTO 15
25  CONTINUE
  WRITE(INDST)MXLM
  DO 30 L=1, MXNIC
    IF(ID(L).GT.0) THEN
      MXNODE=MXNODE+1
      NODE(MXNODE)=L
    END IF
30  CONTINUE
C..Bloc 2. Construction du vecteur code d'apparition ICODE. La valeur de
C  ICODE montre s'il s'agit de la première apparition, de la dernière appa-
C  rition ou d'une apparition intermédiaire du nœud:
C.. ICODE=-1: apparition intermédiaire
C.. ICODE= 0: dernière apparition (et élimination!)
C.. ICODE= 1: première et dernière apparition (élimination!)
C.. ICODE= N: première des N apparitions
C..On place les nœuds du vecteur LVB en traitement dans le vecteur IV des
C  variables actives, puis on note leurs places respectives dans le vecteur
C  LVBIV. On élimine ensuite ceux qui sont apparus pour la dernière fois
C  (ICODE=0) , ou pour la première et la dernière fois (ICODE=1) .
  REWIND INELM
40  READ(INELM,100)LINE
  IF(INDEX(LINE,'ELEMENTS').EQ.0)GO TO 40
  I=0
41  READ(INELM,*,END=53) LM,NQ,ND,KR,NAR,(LVB(K),K=1,KR)
  I=I+1
  DO 50 K=1, KR
    NIC=LVB(K)
    IDK=ID(NIC)
    IF(IDK.GT.1) THEN
      ICODE(K)=IDK

```

```

      ID(NIC)=-IDK+1
      L=1
42    IF(IV(L).EQ.0) THEN
          IV(L)=LVB(K)
          LVBIV(K)=L
          IF(L.GT.LONG) LONG=L
          IF(LONG.GT.MXLONG) MXLONG=LONG
          GOTO 50
      ELSE IF(IV(L).NE.0) THEN
          L=L+1
          GOTO 42
      END IF
      ELSE IF(IDK.EQ.1) THEN
          ICODE(K)=1
          L=1
43    IF(IV(L).EQ.0) THEN
          IV(L)=LVB(K)
          LVBIV(K)=L
          IF(L.GT.LONG) LONG=L
          IF(LONG.GT.MXLONG) MXLONG=LONG
          GOTO 50
      ELSE IF(IV(L).NE.0) THEN
          L=L+1
          GOTO 43
      END IF
      ELSE IF(IDK.EQ.-1) THEN
          ICODE(K)=0
          L=1
44    IF(IV(L).EQ.LVB(K)) THEN
          LVBIV(K)=L
          GOTO 50
      ELSE IF(IV(L).NE.LVB(K)) THEN
          L=L+1
          GOTO 44
      END IF
      ELSE IF(IDK.LT.-1) THEN
          ICODE(K)=-1
          ID(NIC)=IDK+1
          L=1
45    IF(IV(L).EQ.LVB(K)) THEN
          LVBIV(K)=L
          GOTO 50
      ELSE IF(IV(L).NE.LVB(K)) THEN
          L=L+1
          GOTO 45
      END IF
      END IF
50    CONTINUE
      WRITE(INDST) LM,NQ,KR,(LVB(K),K=1,KR),(LVBIV(K),K=1,KR),
1      (ICODE(K),K=1,KR),LONG
      DO 52 K=1,KR
          IF(ICODE(K).EQ.0.OR.ICODE(K).EQ.1) THEN
              L=LVBIV(K)
              IV(L)=0
              IF(L.EQ.LONG.AND.I.LT.MXLM) THEN
51          LONG=L-1
              L=LONG
              IF(IV(L).EQ.0) GOTO 51
          END IF
      END IF
      END IF

```

```

52   CONTINUE
      GOTO 41
53   CONTINUE
      REWIND INELM
      REWIND INDST
      END

```

B.2.3 Lecture des fichiers

```

      SUBROUTINE LECCOR( INCOR, INRES, MXNIC, X, Y, Z, ID)
      IMPLICIT REAL*8 (F, X, Y, Z)
      CHARACTER LINE*80
      DIMENSION X(1), Y(1), Z(1), ID(1)

```

C..Lecture des coordonnées globales X,Y,Z.

```

700  FORMAT(A)
710  FORMAT(4X, ' LE NEUD', I6, ' N''A PAS DE COORDONNEES!')
      10 READ( INCOR, 700) LINE
         IF (INDEX(LINE, 'COORDONNEES') .EQ. 0) GO TO 10
         READ( INCOR, *) FACX, FACY, FACZ
      20  READ( INCOR, *, END=30) NIC, XX, YY, ZZ
         IF (NIC.LT.1) GOTO 30
         IF (ID(NIC) .NE. 0) THEN
            X(NIC)=XX*FACX
            Y(NIC)=YY*FACY
            Z(NIC)=ZZ*FACZ
            ID(NIC)=ID(NIC)+1000
         END IF
         GOTO 20
      30  CONTINUE
         DO 40 NIC=1, MXNIC
            IF (ID(NIC) .NE. 0 .AND. ID(NIC) .LT. 900) THEN
               WRITE( INRES, 710) NIC
               ISTOP=100
            END IF
      40  CONTINUE
         IF (ISTOP.NE.0) THEN
            STOP ' Calcul interrompu!'
         END IF
      END

```

```

      SUBROUTINE LECDIS( INPAR, INRES, DIS, POR, MXND, LI)
      IMPLICIT REAL*8 (D, P, Z)
      CHARACTER LINE*80, LI*(*)
      PARAMETER (ZER=0.00)
      DIMENSION DIS(6,1), DISP(6), POR(1)

```

C..Lecture des coefficients de conduction [D]=(d11,d12,d22,d13,d23,d33)

```

600  FORMAT(/5X, 'VALEURS DES CLASSES DE ', A13, ' ET DE POROSITE', /,
      +5X, 52(1H*)/)
700  FORMAT(A)
720  FORMAT(5X, I5, 5X, 3E14.5/29X, 2E14.5/43X, E14.5)
730  FORMAT(5X, I5, 5X, E14.7)
      DO 10 I=1, 6
         DISP(I)=ZER
      10  CONTINUE
      20  READ( INPAR, 700) LINE
         IF ((INDEX(LINE, 'CONDUCTION') .EQ. 0) .AND.
      + (INDEX(LINE, 'PERMEABILITE') .EQ. 0)) GOTO 20
         LI=LINE(1:15)
         WRITE( INRES, 600) LI(1:13)

```

```

DO 40 K=1, MXND
  READ (INPAR, *, END=40) ND, (DISP (I), I=1, 6)
  IF (DISP (3) .EQ. ZER. AND. DISP (6) .EQ. ZER) THEN
    DISP (3) = DISP (1)
    DISP (6) = DISP (1)
  END IF
  WRITE (INRES, 720) ND, DISP (1), DISP (2), DISP (4),
1      DISP (3), DISP (5), DISP (6)
  DO 30 I=1, 6
    DIS (I, ND) = DISP (I)
    DISP (I) = ZER
30  CONTINUE
  READ (INPAR, *) ND, PORO
  POR (ND) = PORO
  WRITE (INRES, 730) ND, PORO
40  CONTINUE
  REWIND INPAR
  END

  SUBROUTINE LECAL (INPAR, INRES, QDLEC, MXNQ, NLEC, ILEC)
  IMPLICIT REAL*8 (Q)
  PARAMETER (IV2=30)
  CHARACTER*80 LINE
  DIMENSION QDLEC (IV2, *), ILEC (*)
C..Lecture des alimentations distribuées
700  FORMAT (/4X, ' ALIMENTATIONS DISTRIBUEES '/5X, 25 (1H*)/)
710  FORMAT (A)
720  FORMAT (I8, 52 (1X, E14.7))
  WRITE (INRES, 700)
  10  READ (INPAR, 710) LINE
  IF (INDEX (LINE, 'ALIMENTATION') .EQ. 0) GO TO 10
  READ (INPAR, *) NLEC, (ILEC (I), I=1, NLEC)
  DO 30 K=1, MXNQ
    READ (INPAR, *, END=30) NQ, (QDLEC (NQ, I), I=1, NLEC)
    WRITE (INRES, 720) NQ, (QDLEC (NQ, I), I=1, NLEC)
30  CONTINUE
  REWIND INPAR
  END

  SUBROUTINE LECVIT (INPAR, INRES, NVIT, VXX, VYY, VZZ)
  IMPLICIT REAL*8 (V)
  CHARACTER*80 LINE
C..Lecture des paramètres contrôlant la vitesse.
700  FORMAT (/4X, ' VITESSE '/5X, 7 (1H*)/)
710  FORMAT (A)
720  FORMAT (5X, I5, 3 (2X, E14.7))
  WRITE (INRES, 700)
  10  READ (INPAR, 710) LINE
  IF (INDEX (LINE, 'VITESSE') .EQ. 0) GO TO 10
  READ (INPAR, *) NVIT, VXX, VYY, VZZ
  WRITE (INRES, 720) NVIT, VXX, VYY, VZZ
  REWIND INPAR
  END

  SUBROUTINE LECPOT (MXNODE, MXND, INRES, HLEC, NLEC, PER)
  IMPLICIT REAL*8 (H)
  PARAMETER (INPOT=18, IV1=20000)
  CHARACTER*80 LINE, NAM*50
  DIMENSION HLEC (IV1, *), PER (6, *)
1010  FORMAT (A)

```

```

1000 FORMAT(/4X,' FICHER DES POTENTIELS: ',/,5X,23(1H*),4X,A)
      OPEN(UNIT=INPOT,STATUS='OLD',FILE='FIPOT',
      1FORM='FORMATTED',ACCESS='SEQUENTIAL')
      READ(INPOT,1010) NAM
      REWIND INPOT
      WRITE(INRES,1000) NAM
C..Lecture des perméabilités
      REWIND INPOT
      10 READ(INPOT,1010) LINE
         IF(INDEX(LINE,'PERMEABILITE').EQ.0) GOTO 10
         READ(INPOT,1010) LINE
         DO 20 I=1,MXND
            READ(INPOT,*) NP,PER(1,NP),PER(2,NP),PER(4,NP),PER(3,NP),
            *                               PER(5,NP),PER(6,NP)
            READ(INPOT,*) NN,PP
      20 CONTINUE
      REWIND INPOT
C..Lecture des potentiels calculés
      30 READ(INPOT,1010) LINE
         IF(INDEX(LINE,'RESULTATS').EQ.0) GOTO 30
         READ(INPOT,1010) LINE
         READ(INPOT,*) (NIC,IDI,(HLEC(NIC,LEC),LEC=1,NLEC),QQ,K=1,MXNODE)
         RETURN
      END

      SUBROUTINE LECOND(INPAR,INRES,CLEC,QLEC,KODE,NLEC)
      IMPLICIT REAL*8 (C,Q,V)
      CHARACTER LINE*80
      PARAMETER (IV1=20000,IV4=52)
      DIMENSION CLEC(IV1,*),QLEC(IV1,*),KODE(1),VAL(IV4)
C..Lecture des conditions aux limites
      718 FORMAT(/4X,' CONDITIONS NODALES'/5X,18(1H*))
      700 FORMAT(A)
      720 FORMAT(4X,I5,5X,I6,1X,I2,5X,52(E14.7))
      WRITE(INRES,718)
      MXCON=0
      10 READ(INPAR,700) LINE
         IF(INDEX(LINE,'CONDITIONS').EQ.0) GO TO 10
      20 READ(INPAR,*,ERR=30,END=30) NIC,IDI,(VAL(LEC),LEC=1,NLEC)
         IF(NIC.LT.1) GOTO 30
         IF(IDI.LT.0) THEN
            DO 25 LEC=1,NLEC
               CLEC(NIC,LEC)=VAL(LEC)
      25 CONTINUE
         ELSE
            DO 26 LEC=1,NLEC
               QLEC(NIC,LEC)=VAL(LEC)
      26 CONTINUE
         END IF
         KODE(NIC)=IDI
         MXCON=MXCON+1
         WRITE(INRES,720)MXCON,NIC,IDI,(VAL(LEC),LEC=1,NLEC)
         GOTO 20
      30 CONTINUE
      REWIND INPAR
      END

      SUBROUTINE LECTRANS(INPAR,INRES,IDT,ITPRINT,ITMAX)
      CHARACTER LINE*80
      700 FORMAT(/4X,' INCREMENT TEMPOREL, TPRINT, TMAX',/5X,32(1H*))

```



```

710 FORMAT(A)
720 FORMAT(10X,I6,2X,I10,2X,I10)
WRITE(INRES,700)
10 READ(INPAR,710) LINE
IF(INDEX(LINE,'INCREMENT').EQ.0) GOTO 10
READ(INPAR,*) IDT,ITPRINT,ITMAX
WRITE(INRES,720) IDT,ITPRINT,ITMAX
REWIND INPAR
END

```

B.2.4 Calcul des vitesses

```

SUBROUTINE VITUNI(MXNODE,NODE,VXX,VYY,VZZ,VX,VY,VZ)
IMPLICIT REAL*8 (V)
DIMENSION VX(*),VY(*),VZ(*)
C..Attribution des vitesses identiques à tous les nœuds
DO 10 I=1,MXNODE
NOE=NODE(I)
VX(NOE)=VXX
VY(NOE)=VYY
VZ(NOE)=VZZ
10 CONTINUE
END

SUBROUTINE VIT(MXNODE,NODE,VX,VY,VZ,MXND,X,Y,Z,ISTOP,
* MXLONG,INEQU,INELM,INDST,INRES,H,PER)
IMPLICIT REAL*8 (B,G,H,P,Q,R,S,V,X,Y,Z)
PARAMETER (INPOT=18,IV2=30,MXFR=300,ZER=0.00)
CHARACTER*80 LINE,NAM*50
DIMENSION B(MXFR,MXFR),BM(MXFR),GMAT(27,27),H(*)
DIMENSION ICODE(27),IV(MXFR),LVB(27),LVBIV(27),NODE(1)
DIMENSION PER(6,*),PERM(6),RHSX(MXFR),RHSY(MXFR),RHSZ(MXFR)
DIMENSION VALX(MXFR),VALY(MXFR),VALZ(MXFR),VX(1),VXMAT(27,27)
DIMENSION VY(1),VYMAT(27,27),VZ(1),VZMAT(27,27),X(1),XN(27)
DIMENSION Y(1),YN(27),Z(1),ZN(27)
1010 FORMAT(A)
700 FORMAT(/' Pivot est zéro lors de l''élimination'/
1' de l''élément ',I5,'. Calcul interrompu!'/
2' Subroutine VIT...')
ISTOP=0
C..Initialisations
READ(INDST) MXLM
DO 35 I=1,MXLONG
IV(I)=0
BM(I)=ZER
RHSX(I)=ZER
RHSY(I)=ZER
RHSZ(I)=ZER
VALX(I)=ZER
VALY(I)=ZER
VALZ(I)=ZER
DO 35 J=1,MXLONG
B(I,J)=ZER
35 CONTINUE
40 READ(INELM,1010) LINE
IF(INDEX(LINE,'ELEMENTS').EQ.0) GOTO 40
NEQ=0
44 READ(INELM,*,END=125) LM,NQ,NP,KR,NAR,(LVB(K),K=1,KR)
C..Initialisations

```

```

DO 45 I=1, KR
  DO 45 J=1, KR
    GMAT (I, J) = ZER
    VXMAT (I, J) = ZER
    VYMAT (I, J) = ZER
    VZMAT (I, J) = ZER
45  CONTINUE
DO 50 I=1, 6
  PERM(I) = PER(I, NP)
50  CONTINUE
  IF (PERM(3) .EQ. ZER .AND. PERM(6) .EQ. ZER) THEN
    PERM(3) = PERM(1)
    PERM(6) = PERM(1)
  END IF
DO 60 K=1, KR
  NIC=LVB(K)
  XN(K) = X(NIC)
  YN(K) = Y(NIC)
  ZN(K) = Z(NIC)
60  CONTINUE
C..Calcul des matrices élémentaires de l'élément traité.
  IF (KR.EQ.3) THEN
    CALL VIT23 (KR, XN, YN, ZN, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, PERM)
  ELSE IF (KR.EQ.6) THEN
    CALL VIT36 (KR, XN, YN, ZN, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, PERM)
  ELSE IF (KR.EQ.8) THEN
    CALL VIT48 (KR, XN, YN, ZN, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, PERM)
  ELSE IF (KR.EQ.9) THEN
    CALL VIT49 (KR, XN, YN, ZN, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, PERM)
  ELSE IF (KR.EQ.10) THEN
    CALL VIT410 (KR, XN, YN, ZN, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, PERM)
  ELSE IF (KR.EQ.13) THEN
    CALL VIT513 (KR, XN, YN, ZN, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, PERM)
  ELSE IF (KR.EQ.15) THEN
    CALL VIT615 (KR, XN, YN, ZN, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, PERM)
  ELSE IF (KR.EQ.18) THEN
    CALL VIT618 (KR, XN, YN, ZN, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, PERM)
  ELSE IF (KR.EQ.20) THEN
    CALL VIT820 (KR, XN, YN, ZN, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, PERM)
  ELSE IF (KR.EQ.27) THEN
    CALL VIT827 (KR, XN, YN, ZN, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, PERM)
  ELSE
    STOP ' Erreur '
  END IF
C..Assemblage de la matrice de travail.
  READ (INDST) LM, NQ, KR, (LVB(K), K=1, KR), (LVBIV(K), K=1, KR),
1    (ICODE(K), K=1, KR), LONG
DO 80 I=1, KR
  M=LVBIV(I)
  IV(M) = LVB(I)
  IVM=IV(M)
DO 70 J=1, KR
  N=LVBIV(J)
  IVN=LVB(J)
  RMSX(M) = RMSX(M) + VXMAT(I, J) * H(IVN)
  RMSY(M) = RMSY(M) + VYMAT(I, J) * H(IVN)
  RHSZ(M) = RHSZ(M) + VZMAT(I, J) * H(IVN)
  B(M, N) = B(M, N) + GMAT(I, J)
70  CONTINUE
80  CONTINUE

```

C..Elimination frontale des variables actives.

```

DO 120 I=1,KR
  IC=ICODE(I)
  IF(IC.EQ.0.OR.IC.EQ.1) THEN
    M=LVBIV(I)
    IVM=IV(M)
    IV(M)=0
    PIVOT=B(M,M)
    NEQ=NEQ+1
    IF(PIVOT.EQ.ZER) THEN
      WRITE(INRES,700)LM
      STOP ' Erreur '
    END IF
    RHSXM=RHSX(M)
    RHSYM=RHSY(M)
    RHSZM=RHSZ(M)
    WRITE(INEQU,REC=NEQ) LONG,M,IVM,(B(M,II),II=1, LONG),
1      RHSXM,RHSYM,RHSZM
    RHSX(M)=ZER
    RHSY(M)=ZER
    RHSZ(M)=ZER
    B(M,M)=ZER
    DO 100 II=1, LONG
      CONST=B(II,M)/PIVOT
      DO 90 JJ=1, LONG
        B(II,JJ)=B(II,JJ)-CONST*B(M,JJ)
90      CONTINUE
        RHSX(II)=RHSX(II)-CONST*RHSXM
        RHSY(II)=RHSY(II)-CONST*RHSYM
        RHSZ(II)=RHSZ(II)-CONST*RHSZM
100     CONTINUE
        DO 110 II=1, LONG
          B(II,M)=ZER
          B(M,II)=ZER
110     CONTINUE
        END IF
120     CONTINUE
        GOTO 44
125     CONTINUE

```

C..Substitution inverse et résolution des équations.

```

DO 140 I=1,MXNODE
  NEQ=MXNODE-I+1
  READ(INEQU,REC=NEQ) LONG,M,IVM,(BM(J),J=1, LONG),RHSXM,RHSYM,
*      RHSZM
  PIVOT=BM(M)
  BM(M)=ZER
  SUMX=ZER
  SUMY=ZER
  SUMZ=ZER
  DO 130 J=1, LONG
    SUMX=SUMX+BM(J)*VALX(J)
    SUMY=SUMY+BM(J)*VALY(J)
    SUMZ=SUMZ+BM(J)*VALZ(J)
130  CONTINUE
  VALX(M)=(RHSXM-SUMX)/PIVOT
  VALY(M)=(RHSYM-SUMY)/PIVOT
  VALZ(M)=(RHSZM-SUMZ)/PIVOT
  VX(IVM)=VALX(M)
  VY(IVM)=VALY(M)
  VZ(IVM)=VALZ(M)

```

```

140 CONTINUE
    REWIND INELM
    REWIND INDST
    RETURN
    END

    SUBROUTINE MATVIT(KR,DETJ,W,BX,BY,BZ,GMAT,VXMAT,VYMAT,VZMAT,FN,
+PERM)
    IMPLICIT REAL*8 (B,C,D,F,G,P,V,W)
    DIMENSION VXMAT(27,1),VYMAT(27,1),VZMAT(27,1),GMAT(27,1)
    DIMENSION PERM(1),P(6),BX(1),BY(1),BZ(1),FN(1)
    CST=DETJ*W
    DO 10 I=1,6
        P(I)=PERM(I)*CST
10 CONTINUE
    DO 20 L=1,KR
        CST2=FN(L)*CST
        DO 20 I=1,KR
            VXMAT(L,I)=VXMAT(L,I)-FN(L)*(BX(I)*P(1)+BY(I)*P(2)+BZ(I)*P(4))
            VYMAT(L,I)=VYMAT(L,I)-FN(L)*(BX(I)*P(2)+BY(I)*P(3)+BZ(I)*P(5))
            VZMAT(L,I)=VZMAT(L,I)-FN(L)*(BX(I)*P(4)+BY(I)*P(5)+BZ(I)*P(6))
            GMAT(L,I)=GMAT(L,I)+CST2*FN(I)
20 CONTINUE
    END

    SUBROUTINE VIT23(KR,XN,YN,ZN,GMAT,VXMAT,VYMAT,VZMAT,PERM)
    IMPLICIT REAL*8 (A,B,C,D,F,G,P,S,V,W,X,Y,Z)
    DIMENSION XN(1),YN(1),ZN(1),GMAT(27,1),VXMAT(27,1),VYMAT(27,1)
    DIMENSION SI3(3),WI3(3),FN(3),FNDS(3),BX(3),BY(3),BZ(3)
    DIMENSION PERM(1),VZMAT(27,1)
    DATA SI3/-0.7745966692414834,0.00,0.7745966692414834/
    DATA WI3/0.5555555555555555,0.8888888888888888,
1      0.5555555555555555/
    DO 30 IS=1,3
        S=SI3(IS)
        W=WI3(IS)
        CALL FN23(FN,S)
        CALL FD23(FNDS,S)
        CALL GRATU(KR,FNDS,XN,YN,ZN,BX,BY,BZ,DTJ)
        CALL MATVIT(KR,DTJ,W,BX,BY,BZ,GMAT,VXMAT,VYMAT,VZMAT,FN,PERM)
30 CONTINUE
    END

    SUBROUTINE VIT36(KR,XN,YN,ZN,GMAT,VXMAT,VYMAT,VZMAT,PERM)
    IMPLICIT REAL*8 (A,B,C,D,F,G,P,V,W,X,Y,Z)
    DIMENSION AL7(7),BL7(7),CL7(7),WL7(7)
    DIMENSION XN(1),YN(1),ZN(1),VXMAT(27,1),VYMAT(27,1),VZMAT(27,1)
    DIMENSION BX(6),BY(6),BZ(6),FN(6),FNDS(6),FNDDT(6),GMAT(27,1)
    DIMENSION PERM(1)
    DATA AL7/0.3333333333333333,0.0597158717897698,
1      0.4701420641051151,0.4701420641051151,
2      0.7974269853530873,0.1012865073234563,
3      0.1012865073234563/
    DATA BL7/0.3333333333333333,0.4701420641051151,
1      0.0597158717897698,0.4701420641051151,
2      0.1012865073234563,0.7974269853530873,
3      0.1012865073234563/
    DATA CL7/0.3333333333333333,0.4701420641051151,
1      0.4701420641051151,0.0597158717897698,
2      0.1012865073234563,0.1012865073234563,

```

```

3          0.7974269853530873/
DATA WL7/0.11250,3*0.0661970763942531,3*0.0629695902724136/
DO 30 IT=1,7
  AL=AL7(IT)
  BL=BL7(IT)
  CL=CL7(IT)
  W=WL7(IT)
  CALL FN36(AL,BL,CL, FN)
  CALL FD36(AL,BL,CL, FNDS, FNDDT)
  CALL GRATB(KR, FNDS, FNDDT, XN, YN, ZN, BX, BY, BZ, DTJ)
  CALL MATVIT(KR,DTJ, W, BX, BY, BZ, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, FN, PERM)
30 CONTINUE
END

SUBROUTINE VIT48(KR, XN, YN, ZN, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, PERM)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F, G, P, S, T, V, W, X, Y, Z)
DIMENSION XN(1), YN(1), ZN(1), VXMAT(27,1), VYMAT(27,1), VZMAT(27,1)
DIMENSION SI3(3), WI3(3), FN(8), FNDS(8), FNDDT(8), GMAT(27,1)
DIMENSION BX(8), BY(8), BZ(8), PERM(1)
DATA SI3/-0.7745966692414834, 0.00, 0.7745966692414834/
DATA WI3/0.5555555555555555, 0.8888888888888888,
1          0.5555555555555555/
DO 50 IT=1,3
  T=SI3(IT)
  WT=WI3(IT)
  DO 40 IS=1,3
    S=SI3(IS)
    W=WT*WI3(IS)
    CALL FN48(S, T, FN, SM, SP, SQ, TM, TP, TQ)
    CALL FD48(S, T, SM, SP, SQ, TM, TP, TQ, FNDS, FNDDT)
    CALL GRATB(KR, FNDS, FNDDT, XN, YN, ZN, BX, BY, BZ, DTJ)
    CALL MATVIT(KR,DTJ, W, BX, BY, BZ, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, FN, PERM)
40 CONTINUE
50 CONTINUE
END

SUBROUTINE VIT49(KR, XN, YN, ZN, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, PERM)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F, G, P, S, T, V, W, X, Y, Z)
DIMENSION XN(1), YN(1), ZN(1), VXMAT(27,1), VYMAT(27,1), VZMAT(27,1)
DIMENSION SI3(3), WI3(3), FN(9), FNDS(9), FNDDT(9), GMAT(27,1)
DIMENSION BX(9), BY(9), BZ(9), PERM(1)
DATA SI3/-0.7745966692414834, 0.00, 0.7745966692414834/
DATA WI3/0.5555555555555555, 0.8888888888888888,
1          0.5555555555555555/
DO 50 IT=1,3
  T=SI3(IT)
  WT=WI3(IT)
  DO 40 IS=1,3
    S=SI3(IS)
    W=WT*WI3(IS)
    CALL FN49(S, T, FN, SQM, SQP, SQ, TQM, TQP, TQ)
    CALL FD49(S, T, SQM, SQP, SQ, TQM, TQP, TQ, FNDS, FNDDT)
    CALL GRATB(KR, FNDS, FNDDT, XN, YN, ZN, BX, BY, BZ, DTJ)
    CALL MATVIT(KR,DTJ, W, BX, BY, BZ, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, FN, PERM)
40 CONTINUE
50 CONTINUE
END

```

```

SUBROUTINE VIT410 (KR, XN, YN, ZN, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, PERM)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F, G, P, V, W, X, Y, Z)
DIMENSION XN(1), YN(1), ZN(1), VXMAT(27, 1), VYMAT(27, 1)
DIMENSION BX(10), BY(10), BZ(10), GMAT(27, 1), VZMAT(27, 1)
DIMENSION FN(10), FNDS(10), FNDDT(10), FNDDU(10), PERM(1)
DIMENSION AL5(5), BL5(5), CL5(5), DL5(5), WL5(5)
DATA AL5/0.25, 0.50, 3*0.16666666666666666/
DATA BL5/0.25, 0.16666666666666666, 0.50, 2*0.16666666666666666/
DATA CL5/0.25, 2*0.16666666666666666, 0.50, 0.16666666666666666/
DATA DL5/0.25, 3*0.16666666666666666, 0.50/
DATA WL5/-0.80, 0.45, 0.45, 0.45, 0.45/
DO 20 IP=1, 5
  AL=AL5(IP)
  BL=BL5(IP)
  CL=CL5(IP)
  DL=DL5(IP)
  W=-WL5(IP)/6.0
  CALL FN410 (AL, BL, CL, DL, A2, B2, C2, D2, FN)
  CALL DS410 (AL, BL, CL, DL, A2, B2, C2, D2, FNDS)
  CALL DT410 (AL, BL, CL, DL, A2, B2, C2, D2, FNDDT)
  CALL DU410 (AL, BL, CL, DL, A2, B2, C2, D2, FNDDU)
  CALL GRAT (KR, FNDS, FNDDT, FNDDU, XN, YN, ZN, BX, BY, BZ, DTJ)
  CALL MATVIT (KR, DTJ, W, BX, BY, BZ, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, FN, PERM)
20 CONTINUE
END

SUBROUTINE VIT513 (KR, XN, YN, ZN, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, PERM)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F, G, P, S, T, U, V, W, X, Y, Z)
DIMENSION XN(1), YN(1), ZN(1), VXMAT(27, 1), VYMAT(27, 1), VZMAT(27, 1)
DIMENSION SI3(3), WI3(3), BX(20), BY(20), BZ(20), GMAT(27, 1)
DIMENSION FN(20), FNDS(20), FNDDT(20), FNDDU(20), PERM(1)
DATA SI3/-0.7745966692414834, 0.00, 0.7745966692414834/
DATA WI3/0.5555555555555555, 0.8888888888888888,
1 0.5555555555555555/
DO 70 IU=1, 3
  U=SI3(IU)
  WU=WI3(IU)
  DO 60 IT=1, 3
    T=SI3(IT)
    WT=WI3(IT)
    DO 50 IS=1, 3
      S=SI3(IS)
      W=WU*WT*WI3(IS)
      CALL BRAUX (SM, SP, SQ, TM, TP, TQ, UM, UP, UQ, A1, A2, A3, A4,
1 S, T, U)
      CALL FN513 (SM, SP, SQ, TM, TP, TQ, UM, UP, UQ, A1, A2, A3, A4, FN)
      CALL DS513 (TM, TP, TQ, UM, UP, UQ, S, FNDS)
      CALL DT513 (SM, SP, SQ, UM, UP, UQ, T, FNDDT)
      CALL DU513 (SM, SP, SQ, TM, TP, TQ, U, FNDDU, A1, A2, A3, A4)
      CALL GRAT (KR, FNDS, FNDDT, FNDDU, XN, YN, ZN, BX, BY, BZ, DTJ)
      CALL MATVIT (KR, DTJ, W, BX, BY, BZ, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, FN, PERM)
50 CONTINUE
60 CONTINUE
70 CONTINUE
END

SUBROUTINE VIT615 (KR, XN, YN, ZN, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, PERM)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F, G, P, S, U, V, W, X, Y, Z)
DIMENSION XN(1), YN(1), ZN(1), VXMAT(27, 1), VYMAT(27, 1), VZMAT(27, 1)
DIMENSION SI3(3), WI3(3), AL7(7), BL7(7), CL7(7), WL7(7), GMAT(27, 1)

```

```

DIMENSION BX(15),BY(15),BZ(15),PERM(1)
DIMENSION FN(15),FNDS(15),FNDDT(15),FNDDU(15)
DATA SI3/-0.7745966692414834,0.00,0.7745966692414834/
DATA WI3/0.5555555555555555,0.8888888888888888,
1      0.5555555555555555/
DATA AL7/0.3333333333333333,0.0597158717897698,
1      0.4701420641051151,0.4701420641051151,
2      0.7974269853530873,0.1012865073234563,
3      0.1012865073234563/
DATA BL7/0.3333333333333333,0.4701420641051151,
1      0.0597158717897698,0.4701420641051151,
2      0.1012865073234563,0.7974269853530873,
3      0.1012865073234563/
DATA CL7/0.3333333333333333,0.4701420641051151,
1      0.4701420641051151,0.0597158717897698,
2      0.1012865073234563,0.1012865073234563,
3      0.7974269853530873/
DATA WL7/0.11250,3*0.0661970763942531,3*0.0629695902724136/
DO 50 IT=1,7
  AL=AL7(IT)
  BL=BL7(IT)
  CL=CL7(IT)
  WT=WL7(IT)
DO 40 IU=1,3
  U=SI3(IU)
  W=WT*WI3(IU)
  CALL PRAUX(AL,BL,CL,U,UM,UP,UQ,A1,A2,A3)
  CALL FN615(AL,BL,CL,UM,UP,UQ,A1,A2,A3,FN)
  CALL DS615(AL,BL,CL,UM,UP,UQ,FNDS)
  CALL DT615(AL,BL,CL,UM,UP,UQ,FNDDT)
  CALL DU615(AL,BL,CL,A1,A2,A3,U,FNDDU)
  CALL GRATT(KR,FNDS,FNDDT,FNDDU,XN,YN,ZN,BX,BY,BZ,DTJ)
  CALL MATVIT(KR,DTJ,W,BX,BY,BZ,GMAT,VXMAT,VYMAT,VZMAT,FN,PERM)
40 CONTINUE
50 CONTINUE
END

```

```

SUBROUTINE VIT618(KR,XN,YN,ZN,GMAT,VXMAT,VYMAT,VZMAT,PERM)
IMPLICIT REAL*8 (A,B,C,D,F,G,P,S,U,V,W,X,Y,Z)
DIMENSION XN(1),YN(1),ZN(1),VXMAT(27,1),VYMAT(27,1),VZMAT(27,1)
DIMENSION SI3(3),WI3(3),AL7(7),BL7(7),CL7(7),WL7(7),GMAT(27,1)
DIMENSION BX(18),BY(18),BZ(18),PERM(1)
DIMENSION FN(18),FNDS(18),FNDDT(18),FNDDU(18)
DATA SI3/-0.7745966692414834,0.00,0.7745966692414834/
DATA WI3/0.5555555555555555,0.8888888888888888,
1      0.5555555555555555/
DATA AL7/0.3333333333333333,0.0597158717897698,
1      0.4701420641051151,0.4701420641051151,
2      0.7974269853530873,0.1012865073234563,
3      0.1012865073234563/
DATA BL7/0.3333333333333333,0.4701420641051151,
1      0.0597158717897698,0.4701420641051151,
2      0.1012865073234563,0.7974269853530873,
3      0.1012865073234563/
DATA CL7/0.3333333333333333,0.4701420641051151,
1      0.4701420641051151,0.0597158717897698,
2      0.1012865073234563,0.1012865073234563,
3      0.7974269853530873/
DATA WL7/0.11250,3*0.0661970763942531,3*0.0629695902724136/
DO 50 IT=1,7

```

```

AL=AL7(IT)
BL=BL7(IT)
CL=CL7(IT)
WT=WL7(IT)
DO 40 IU=1,3
  U=SI3(IU)
  W=WT*WI3(IU)
  CALL FN618(AL,BL,CL,U,A2,B2,C2,A,B,C,
1      AA,BB,CC,UM,UQ,UP,FN)
  CALL FD618(A2,B2,C2,A,B,C,AA,BB,CC,U,UM,UQ,UP,
1      FNDS,FNDT,FNDU)
  CALL GRATT(KR,FNDS,FNDT,FNDU,XN,YN,ZN,BX,BY,BZ,DTJ)
  CALL MATVIT(KR,DTJ,W,BX,BY,BZ,GMAT,VXMAT,VYMAT,VZMAT,
40  FN,PERM)
50 CONTINUE
END

```

```

SUBROUTINE VIT820(KR,XN,YN,ZN,GMAT,VXMAT,VYMAT,VZMAT,PERM)
IMPLICIT REAL*8(A,B,C,D,F,G,P,S,T,U,V,W,X,Y,Z)
DIMENSION XN(1),YN(1),ZN(1),VXMAT(27,1),VYMAT(27,1),VZMAT(27,1)
DIMENSION SI3(3),WI3(3),BX(20),BY(20),BZ(20),GMAT(27,1)
DIMENSION FN(20),FNDS(20),FNDT(20),FNDU(20),PERM(1)
DATA SI3/-0.7745966692414834,0.00,0.7745966692414834/
DATA WI3/0.5555555555555555,0.8888888888888888,
1  0.5555555555555555/
DO 70 IU=1,3
  U=SI3(IU)
  WU=WI3(IU)
  DO 60 IT=1,3
    T=SI3(IT)
    WT=WI3(IT)
    DO 50 IS=1,3
      S=SI3(IS)
      W=WU*WT*WI3(IS)
      CALL BRAUX(SM,SP,SQ,TM,TP,TQ,UM,UP,UQ,A1,A2,A3,A4,
1      S,T,U)
      CALL FN820(SM,SP,SQ,TM,TP,TQ,UM,UP,UQ,A1,A2,A3,A4,
      FN)
      CALL DS820(TM,TP,TQ,UM,UP,UQ,S,FNDS)
      CALL DT820(SM,SP,SQ,UM,UP,UQ,T,FNDT)
      CALL DU820(SM,SP,SQ,TM,TP,TQ,U,FNDU,A1,A2,A3,A4)
      CALL GRATT(KR,FNDS,FNDT,FNDU,XN,YN,ZN,BX,BY,BZ,DTJ)
      CALL MATVIT(KR,DTJ,W,BX,BY,BZ,GMAT,VXMAT,VYMAT,VZMAT,
50  FN,PERM)
60 CONTINUE
70 CONTINUE
END

```

```

SUBROUTINE VIT827(KR,XN,YN,ZN,GMAT,VXMAT,VYMAT,VZMAT,PERM)
IMPLICIT REAL*8(A,B,C,D,F,G,P,S,T,U,V,W,X,Y,Z)
DIMENSION XN(1),YN(1),ZN(1),VXMAT(27,1),VYMAT(27,1),VZMAT(27,1)
DIMENSION SI3(3),WI3(3),BX(27),BY(27),BZ(27),GMAT(27,1),PERM(1)
DIMENSION FN(27),FNDS(27),FNDT(27),FNDU(27),SQ(3),TQ(3),UQ(3)
DATA SI3/-0.7745966692414834,0.00,0.7745966692414834/
DATA WI3/0.5555555555555555,0.8888888888888888,
1  0.5555555555555555/
DO 70 IU=1,3
  U=SI3(IU)
  WU=WI3(IU)
  DO 60 IT=1,3
    T=SI3(IT)

```



```

      WT=WI3(IT)
      DO 50 IS=1,3
        S=SI3(IS)
        W=WU*WT*WI3(IS)
        CALL FN827(S,T,U, FN, SQ, TQ, UQ)
        CALL FD827(S,T,U, SQ, TQ, UQ, FNDS, FNDD, FNDU)
        CALL GRATT(KR, FNDS, FNDD, FNDU, XN, YN, ZN, BX, BY, BZ, DTJ)
        CALL MATVIT(KR, DTJ, W, BX, BY, BZ, GMAT, VXMAT, VYMAT, VZMAT, FN, PERM)
50     CONTINUE
60     CONTINUE
70     CONTINUE
      END

```

B.2.5 Résolution des systèmes d'équations

```

      SUBROUTINE STEADY(INDST, INMAT, INRES, INEQU, NODE, C, Q, MXNODE,
1      KODE, QD, QDLEC, MXLONG, MXNQ)
      IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, P, Q, R, S, V, Z)
      PARAMETER (IV1=20000, IV2=30, MXFR=300, ZER=0.00)
      DIMENSION C(1), Q(1), KODE(1), QD(1), DMAT(27,27), QDLEC(IV2,*)
      DIMENSION LVB(27), LVBIV(27), DOMINF(27), ICODE(27), CMAT(27,27)
      DIMENSION IV(MXFR), BM(MXFR), B(MXFR, MXFR), RHS(MXFR)
      DIMENSION VAL(MXFR), PMAT(27,27), NODE(1)
C..*****
C..* ASSEMBLAGE ET SOLUTION DES EQUATIONS (ECOULEMENT PERMANENT) *
C..*****
C.. Si dans un élément plusieurs nœuds ont le même numéro,
C.. les lignes et les colonnes de la matrice élémentaire cor-
C.. respondant à ces nœuds occuperont la même ligne et la
C.. même colonne dans la grande matrice B.
700  FORMAT(/' Pivot est zéro lors de l''élimination'/
      +' de l''élément ',I5,'. Calcul interrompu!'/
      +' Subroutine STEADY...')
1100 FORMAT(/4X, ' !RESULTATS CALCULES!' /5X, 20(1H*) /)
      READ(INDST) MXLM
      NEQ=0
      QSUM=ZER
      DO 10 I=1, MXLONG
        IV(I)=0
        BM(I)=ZER
        RHS(I)=ZER
        VAL(I)=ZER
        DO 10 J=1, MXLONG
          B(I, J)=ZER
10     CONTINUE
      DO 11 NQ=1, MXNQ
        QD(NQ)=QDLEC(NQ, 1)
11     CONTINUE
      DO 100 L=1, MXLM
C..Assemblage de la matrice de travail B.
        READ(INDST) LM, NQ, KR, (LVB(K), K=1, KR), (LVBIV(K), K=1, KR),
1      (ICODE(K), K=1, KR), LONG
        READ(INMAT) KR, (DOMINF(K), K=1, KR), ((PMAT(I, J), I=1, KR), J=1, KR),
1      ((DMAT(I, J), I=1, KR), J=1, KR), ((CMAT(I, J), I=1, KR), J=1, KR)
        DO 30 I=1, KR
          M=LVBIV(I)
          IV(M)=LVB(I)
          IVM=IV(M)
          ALD=DOMINF(I)*QD(NQ)
30     CONTINUE
100    CONTINUE

```

```

      Q (IVM)=Q (IVM)+ALD
c....  QSUM=QSUM+ALD
      DO 20 J=1,KR
          N=LVBIV (J)
          B (M,N)=B (M,N)+DMAT (I,J)+CMAT (I,J)
20     CONTINUE
30     CONTINUE
C.. Elimination frontale des variables actives.
      DO 80 I=1,KR
          IC=ICODE (I)
          IF (IC.EQ.0.OR.IC.EQ.1) THEN
              M=LVBIV (I)
              IVM=IV (M)
              IV (M)=0
              PIVOT=B (M,M)
              NEQ=NEQ+1
              IF (PIVOT.EQ.ZER) THEN
                  WRITE (INRES,700) LM
                  STOP ' Erreur '
              END IF
              RHSM=RHS (M)+Q (IVM)
              KO=KODE (IVM)
              WRITE (INEQU,REC=NEQ) LONG,M,IVM,KO,(B (M,II),II=1,LONG),RHSM
              RHS (M)=ZER
              B (M,M)=ZER
              IF (KO.EQ.0.OR.KO.EQ.1) THEN
                  RHEL=RHSM
              ELSE IF (KO.EQ.-1) THEN
                  RHEL=C (IVM)
              END IF
              DO 50 II=1, LONG
                  CONST=B (II,M)
                  IF (KO.EQ.0.OR.KO.EQ.1) THEN
                      CONST=CONST/PIVOT
                      DO 40 JJ=1, LONG
                          B (II,JJ)=B (II,JJ)-CONST*B (M,JJ)
40                     CONTINUE
                      END IF
                      RHS (II)=RHS (II)-CONST*RHEL
50                     CONTINUE
              DO 70 II=1, LONG
                  B (II,M)=ZER
                  B (M,II)=ZER
70                     CONTINUE
              END IF
80                     CONTINUE
100                    CONTINUE
C..Substitution inverse et résolution des équations.
      DO 120 I=1,MXNODE
          NEQ=MXNODE-I+1
          READ (INEQU,REC=NEQ) LONG,M,IVM,KO,(BM (II),II=1,LONG),RHSM
          PIVOT=BM (M)
          BM (M)=ZER
          SUM=ZER
          DO 110 J=1, LONG
              SUM=SUM+BM (J)*VAL (J)
110                    CONTINUE
          IF (KO.EQ.0.OR.KO.EQ.1) THEN
              CC=(RHSM-SUM)/PIVOT
              VAL (M)=CC

```

```

      C (IVM)=CC
      qsum=qsum+q(ivm)
      ELSE IF (KO.EQ.-1) THEN
        VAL (M)=C (IVM)
        QQ=SUM+PIVOT*VAL (M) -RHSM
c...   QSUM=QSUM+QQ
        Q (IVM)=Q (IVM)+QQ
        qsum=qsum+q(ivm)
      END IF
120   CONTINUE
C..Impression des résultats.
      WRITE (INRES,1100)
      CALL WRITERES (INRES,MXNODE,NODE,KODE,C,Q,QSUM)
      END

      SUBROUTINE TRANST (INDST, INMAT, INRES, INEQU, NODE, C, Q,
1  MXNODE, KODE, QD, IDT, ITPRINT, ITMAX, MXNIC, MXLONG,
2  NLEC, CLEC, QLEC, QDLEC, HLEC, H, ILEC, NVIT, VX, VY, VZ, MXND,
3  MXNQ, PER, POR)
      IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, P, Q, R, S, V, Z)
      CHARACTER NAM*50, LINE*80
      PARAMETER (IV1=20000, MXFR=300, ZER=0.00, IV2=30)
      PARAMETER (ININI=19, INPOT=18)
      DIMENSION C (1), Q (1), KODE (1), QD (1), NODE (1), LVBIV (27)
      DIMENSION DMAT (27, 27), CMAT (27, 27), PMAT (27, 27), LVB (27)
      DIMENSION DOMINF (27), ICODE (27), IV (MXFR), BM (MXFR)
      DIMENSION B (MXFR, MXFR), RHS (MXFR), VAL (MXFR), C0 (IV1)
      DIMENSION C2 (IV1), Q2 (IV1), ILEC (*), H (*), HLEC (IV1, *)
      DIMENSION QDLEC (IV2, *), QLEC (IV1, *), CLEC (IV1, *)
      DIMENSION VX (*), VY (*), VZ (*), PER (6, *), POR (*)
550   FORMAT (A)
570   FORMAT (4X, ' Fichier des conditions initiales: ', /
*      5X, 33 (1H*), 1X, A50 //)
      DT2=IDT*86400/2.00
      OPEN (UNIT=ININI, STATUS='OLD', FILE='FIINI',
1FORM='FORMATTED', ACCESS='SEQUENTIAL')
      READ (ININI, 550) NAM
      REWIND ININI
      WRITE (INRES, 570) NAM
6     READ (ININI, 550) LINE
      IF (INDEX (LINE, 'RESULTATS').EQ.0) GOTO 6
C..Lecture des conditions initiales
      READ (ININI, 550) LINE ! Lecture de la ligne des astérisques.
      READ (ININI, *) (NIC, IDI, C0 (NIC), QQ, K=1, MXNODE)
      LEC=1
      DO 10 I=1, MXNODE
        NIC=NODE (I)
        KO=KODE (NIC)
        IF (KO.EQ.1) THEN
          QQ=QLEC (NIC, LEC)
          Q2 (NIC)=QQ*DT2 !Q2=(Q+Q0)/2.0*DT2 si Q=Q0=QQ alors Q2=QQ*DT2
        ELSE IF (KO.EQ.-1) THEN
          CC=CLEC (NIC, LEC)
          C0 (NIC)=CC
          C2 (NIC)=CC ! C2=(C+C0)/2 si C=C0=CC alors C2=CC
        END IF
10    CONTINUE
      DO 11 NQ=1, MXNQ
        QD (NQ)=QDLEC (NQ, LEC)
11    CONTINUE

```

```

IFLAG=1
DO 150 KSTOP=IDT, ITMAX, IDT
  DO 40 I=1, MXLONG
    IV(I)=0
    BM(I)=ZER
    RHS(I)=ZER
    VAL(I)=ZER
    DO 30 J=1, MXLONG
      B(I, J)=ZER
30    CONTINUE
40    CONTINUE
    REWIND INDST
    REWIND INMAT
    IF (KSTOP.EQ.ILEC(LEC+1)) THEN
      LEC=LEC+1
      DO 41 I=1, MXNODE
        NIC=NODE(I)
        KO=KODE(NIC)
        IF (KO.EQ.1) THEN
          QQ=QLEC(NIC, LEC)
          Q2(NIC)=QQ*DT2 !Q2=(Q+Q0)/2.0*DT2 si Q=Q0=QQ alors Q2=QQ*DT2
        ELSE IF (KO.EQ.-1) THEN
          CC=CLEC(NIC, LEC)
          C0(NIC)=CC
          C2(NIC)=CC ! C2=(C+C0)/2 si C=C0=CC alors C2=CC
        END IF
41    CONTINUE
      DO 42 NQ=1, MXNQ
        QD(NQ)=QDLEC(NQ, LEC)
42    CONTINUE
      IF (NVIT.EQ.0) THEN ! 16.08.87
        DO 43 I=1, MXNODE
          NIC=NODE(I)
          H(NIC)=HLEC(NIC, LEC)
43    CONTINUE
          CALL VIT(MXNODE, NODE, VX, VY, VZ, MXND, X, Y, Z, ISTOP, MXLONG,
*           INEQU, INELM, INDST, INRES, H, PER)
          CALL MATELM(X, Y, Z, DIS, VX, VY, VZ, ISTOP, POR)
        END IF
      END IF
      IF (KSTOP.EQ.IDT) CALL PAS1(QD, C0, C2, Q2, KODE, DT2, INDST,
1      INMAT, INEQU, INRES, IV, RHS, B)
      IF (KSTOP.GT.IDT) CALL PASSUIV(QD, C0, C2, Q2, DT2, INDST, INMAT,
1      INEQU, IV, RHS, BM)
C..Substitution inverse et résolution des équations.
DO 130 I=1, MXNODE
  NEQ=MXNODE-I+1
  READ(INEQU, REC=NEQ) LONG, M, IVM, KO, (BM(II), II=1, LONG), RHSM
  PIVOT=BM(M)
  BM(M)=ZER
  SUM=ZER
  DO 120 J=1, LONG
    SUM=SUM+BM(J)*VAL(J)
120  CONTINUE
  IF (KO.EQ.0.OR.KO.EQ.1) THEN
    CC=(RHSM-SUM)/PIVOT
    VAL(M)=CC
    C2(IVM)=CC
  ELSE IF (KO.EQ.-1) THEN
    VAL(M)=C2(IVM)

```

```

        QQ=SUM+PIVOT*VAL(M)-RHSM
        Q2(IVM)=Q2(IVM)+QQ
    END IF
130    CONTINUE
C..Ré-initialisation des variables.
    DO 140 I=1,MXNODE
        NIC=NODE(I)
        C(NIC)=2.00*C2(NIC)-C0(NIC)
        C0(NIC)=C(NIC)
140    CONTINUE
    KPRINT=MOD(KSTOP,ITPRINT) ! MOD(a,b) renvoie le reste de la
                                ! division de a par b.
    IF(KPRINT.EQ.0.OR.KSTOP.EQ.ITMAX) CALL IMPRESS(IDT,
1      KSTOP,MXNODE,NODE,DT2,KODE,C,Q,Q2)
150    CONTINUE
    RETURN
    END

    SUBROUTINE PAS1(QD,C0,C2,Q2,KODE,DT2,INDST,INMAT,INEQU,
1      INRES,IV,RHS,B)
    IMPLICIT REAL*8 (A,B,C,D,P,Q,R,S,V,Z)
    PARAMETER (ZER=0.00,MXFR=300)
    DIMENSION QD(1),PMAT(27,27),LVB(27),LVBIV(27),DOMINF(27)
    DIMENSION ICODE(27),IV(1),RHS(1),B(MXFR,1),DMAT(27,27)
    DIMENSION C0(1),C2(1),Q2(1),KODE(1),CMAT(27,27)
700  FORMAT(/' Pivot est zéro lors de l''élimination'/
+ ' de l''élément ',I5,'. Calcul interrompu!'/
+ ' Subroutine PAS1...')
    NEQ=0
    READ(INDST) MXLM
    DO 110 L=1,MXLM
C.. Assemblage de la matrice de travail B et du vecteur de droite RHS.
    READ(INDST) LM,NQ,KR,(LVB(K),K=1,KR),(LVBIV(K),K=1,KR),
1      (ICODE(K),K=1,KR),LONG
    READ(INMAT) KR,(DOMINF(K),K=1,KR),((PMAT(I,J),I=1,KR),J=1,KR),
1      ((DMAT(I,J),I=1,KR),J=1,KR),((CMAT(I,J),I=1,KR),J=1,KR)
    DO 60 I=1,KR
        M=LVBIV(I)
        IV(M)=LVB(I)
        IVM=IV(M)
        ALD=DOMINF(I)*QD(NQ)
        Q2(IVM)=Q2(IVM)+ALD/2.00*DT2
    DO 50 J=1,KR
        N=LVBIV(J)
        IVN=LVB(J)
        B(M,N)=B(M,N)+PMAT(I,J)+DT2*(DMAT(I,J)+CMAT(I,J))
        RHS(M)=RHS(M)+PMAT(I,J)*C0(IVN)
50    CONTINUE
60    CONTINUE
C..Elimination frontale des variables actives.
    DO 100 I=1,KR
        IC=ICODE(I)
        IF(IC.EQ.0.OR.IC.EQ.1) THEN
            M=LVBIV(I)
            IVM=IV(M)
            IV(M)=0
            PIVOT=B(M,M)
            NEQ=NEQ+1
            IF(PIVOT.EQ.ZER) THEN
                WRITE(INRES,700) LM

```

```

        STOP ' Erreur '
    END IF
    RHSM=RHS (M) +Q2 (IVM)
    KO=KODE (IVM)
1   WRITE (INEQU, REC=NEQ) LONG, M, IVM, KO, (B (M, II) , II=1, LONG) , RHSM,
        (B (II, M) , II=1, LONG)
        RHS (M) =ZER
        B (M, M) =ZER
        IF (KO.EQ.0.OR.KO.EQ.1) THEN
            RHEL=RHSM
        ELSE IF (KO.EQ.-1) THEN
            RHEL=C2 (IVM)
        END IF
        DO 80 II=1, LONG
            CONST=B (II, M)
            IF (KO.EQ.0.OR.KO.EQ.1) THEN
                CONST=CONST/PIVOT
                DO 70 JJ=1, LONG
                    B (II, JJ) =B (II, JJ) -CONST*B (M, JJ)
70                CONTINUE
            END IF
            RHS (II) =RHS (II) -CONST*RHEL
80        CONTINUE
        DO 90 II=1, LONG
            B (II, M) =ZER
            B (M, II) =ZER
90        CONTINUE
        END IF
100    CONTINUE
110    CONTINUE
    RETURN
    END

```

```

SUBROUTINE PASSUIV (QD, C0, C2, Q2, DT2, INDST, INMAT,
1   INEQU, IV, RHS, BM)
    IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, P, Q, R, S, V, Z)
    PARAMETER (ZER=0.00, MXFR=300)
    DIMENSION QD (1) , PMAT (27, 27) , LVB (27) , LVBIV (27) , DOMINF (27)
    DIMENSION ICODE (27) , IV (1) , BM (1) , BN (MXFR) , RHS (1)
    DIMENSION C0 (1) , C2 (1) , Q2 (1)

```

C..Assemblage et élimination pour les pas de temps suivants.

```

    NEQ=0
    READ (INDST) MXLM
    DO 110 L=1, MXLM

```

C..Assemblage du vecteur de droite RHS.

```

    READ (INDST) LM, NQ, KR, (LVB (K) , K=1, KR) , (LVBIV (K) , K=1, KR) ,
1   (ICODE (K) , K=1, KR) , LONG
    READ (INMAT) KR, (DOMINF (K) , K=1, KR) , ((PMAT (I, J) , I=1, KR) , J=1, KR)
    DO 60 I=1, KR
        M=LVBIV (I)
        IV (M) =LVB (I)
        IVM=IV (M)
        ALD=DOMINF (I) *QD (NQ)
        Q2 (IVM) =Q2 (IVM) +ALD/2.00*DT2
        DO 50 J=1, KR
            N=LVBIV (J)
            IVN=LVB (J)
            RHS (M) =RHS (M) +PMAT (I, J) *C0 (IVN)
50        CONTINUE
60    CONTINUE

```

C.. Elimination frontale des variables actives.

```

DO 100 I=1,KR
  IC=ICODE(I)
  IF(IC.EQ.0.OR.IC.EQ.1) THEN
    M=LVBIV(I)
    IVM=IV(M)
    IV(M)=0
    NEQ=NEQ+1
    RHSM=RHS(M)+Q2(IVM)

```

C..On remplace dans INEQU, RHSMA par RHSM en même temps que l'on

C..lit les (ligne et colonne) de la variable à éliminer.

```

  READ(INEQU,REC=NEQ) LONG,M,IVM,KO,(BM(II),II=1,LONG),RHSMA,
1      (BN(II),II=1,LONG)
  PIVOT=BM(M)
  WRITE(INEQU,REC=NEQ) LONG,M,IVM,KO,(BM(II),II=1,LONG),RHSM,
1      (BN(II),II=1,LONG)
  RHS(M)=ZER
  BM(M)=ZER
  BN(M)=ZER
  IF(KO.EQ.0.OR.KO.EQ.1) THEN
    RHEL=RHSM
  ELSE IF(KO.EQ.-1) THEN
    RHEL=C2(IVM)
  END IF
  DO 80 II=1, LONG
    CONST=BN(II)
    IF(KO.EQ.0.OR.KO.EQ.1) THEN
      CONST=CONST/PIVOT
    END IF
    RHS(II)=RHS(II)-CONST*RHEL
80  CONTINUE
  DO 90 II=1, LONG
    BM(II)=ZER
    BN(II)=ZER
90  CONTINUE
  END IF
100 CONTINUE
110 CONTINUE
  RETURN
  END

```

SUBROUTINE IMPRESS (IDT,KSTOP,MXNODE,NODE,DT2,

1 KODE,C,Q,Q2)

IMPLICIT REAL*8 (C,D,Q)

PARAMETER (ZER=0.00,INRES=16)

DIMENSION NODE(1),KODE(1),C(1),Q(1),Q2(1)

C..Impression des résultats.

```

1100 FORMAT(/4X,' !RESULTATS CALCULES!'/5X,20(1H*))
  WRITE(INRES,*) ' INCREMENT DU TEMPS: DT= ',IDT,' JOURS.'
  WRITE(INRES,*) ' PERIODE TRANSITOIRE DE ',KSTOP,' JOURS.'
  QSUM=ZER
  DO 160 I=1,MXNODE
    NIC=NODE(I)
    Q(NIC)=Q2(NIC)/DT2
    QSUM=QSUM+Q(NIC)
160 CONTINUE
  WRITE(INRES,1100)
  CALL WRITERES(INRES,MXNODE,NODE,KODE,C,Q,QSUM)
  RETURN
  END

```

```

SUBROUTINE WRITERES (INRES, MXNODE, NODE, KODE, C, Q, QSUM)
IMPLICIT REAL*8 (C, Q)
DIMENSION C (1), KODE (1), NODE (1), Q (1)
700 FORMAT (3 (4X, I6, I3, F9.3, 1X, E14.7))
710 FORMAT (//4X, ' SOMME DES DEBITS = ', E14.7)
WRITE (INRES, 700) (NODE (K), KODE (NODE (K)), C (NODE (K)), Q (NODE (K)),
+K=1, MXNODE)
WRITE (INRES, 710) QSUM
END

```

B.2.6 Calcul des vecteurs et matrices élémentaires

```

SUBROUTINE MATELM (X, Y, Z, DIS, VX, VY, VZ, ISTOP, POR)
IMPLICIT REAL*8 (C, D, P, S, V, X, Y, Z)
CHARACTER*80 LINE
PARAMETER (ZER=0.00)
DIMENSION XN (27), YN (27), ZN (27), X (1), Y (1), Z (1), LVB (27)
DIMENSION CMAT (27, 27), PMAT (27, 27), DMAT (27, 27), DOMINF (27)
DIMENSION DIS (6, 1), DISP (6), VX (1), VY (1), VZ (1), POR (1)
DIMENSION VXN (27), VYN (27), VZN (27)
DATA INELM, INMAT, INRES/11, 14, 16/
C..CALCUL DES MATRICES ELEMENTAIRES
C..Les DOMINF (I) sont des longueurs pour les éléments 1-D,
C..      des surfaces pour les éléments 2-D,
C..      et des volumes pour les éléments 3-D.
C..DMAT: matrice carrée du terme conducteur;
C..CMAT: matrice carrée du terme advectif;
C..PMAT: matrice carrée du terme transitoire.
700 FORMAT (A)
710 FORMAT (' VOLUME NUL OU NEGATIF POUR: ' /
1I5, 3X, 3I4, 5X, 6I7/25X, 6I7/25X, 6I7/25X, 6I7)
ISTOP=0
10 READ (INELM, 700) LINE
IF (INDEX (LINE, 'ELEMENTS') .EQ. 0) GO TO 10
15 READ (INELM, *, END=60) LM, NQ, ND, KR, NAR, (LVB (K), K=1, KR)
DO 20 I=1, 6
DISP (I) = DIS (I, ND)
20 CONTINUE
PORO = POR (ND)
DO 30 K=1, KR
NIC = LVB (K)
XN (K) = X (NIC)
YN (K) = Y (NIC)
ZN (K) = Z (NIC)
VXN (K) = VX (NIC)
VYN (K) = VY (NIC)
VZN (K) = VZ (NIC)
30 CONTINUE
IF (KR .EQ. 3) THEN
CALL SHAPE23 (KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
* VXN, VYN, VZN, PORO)
ELSE IF (KR .EQ. 6) THEN
CALL SHAPE36 (KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
* VXN, VYN, VZN, PORO)
ELSE IF (KR .EQ. 8) THEN
CALL SHAPE48 (KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
* VXN, VYN, VZN, PORO)
ELSE IF (KR .EQ. 9) THEN

```



```

      CALL SHAPE49 (KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
*                VXN, VYN, VZN, PORO)
    ELSE IF (KR.EQ.10) THEN
      CALL SHAPE410 (KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
*                VXN, VYN, VZN, PORO)
    ELSE IF (KR.EQ.13) THEN
      CALL SHAPE513 (KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
*                VXN, VYN, VZN, PORO)
    ELSE IF (KR.EQ.15) THEN
      CALL SHAPE615 (KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
*                VXN, VYN, VZN, PORO)
    ELSE IF (KR.EQ.18) THEN
      CALL SHAPE618 (KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
*                VXN, VYN, VZN, PORO)
    ELSE IF (KR.EQ.20) THEN
      CALL SHAPE820 (KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
*                VXN, VYN, VZN, PORO)
    ELSE IF (KR.EQ.27) THEN
      CALL SHAPE827 (KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
*                VXN, VYN, VZN, PORO)
    ELSE
      STOP ' Erreur '
    END IF
    SUM=ZER
    DO 40 K=1, KR
      SUM=SUM+DOMINF (K)
40  CONTINUE
    IF (SUM.LE.ZER) THEN
      ISTOP=ISTOP+100
      WRITE (INRES, 710) LM, NQ, ND, KR, (LVB (K), K=1, KR)
    END IF
    WRITE (INMAT) KR, (DOMINF (K), K=1, KR), ((PMAT (I, J), I=1, KR), J=1, KR),
1      ((DMAT (I, J), I=1, KR), J=1, KR), ((CMAT (I, J), I=1, KR), J=1, KR)
    DO 50 I=1, KR
      XN (I)=ZER
      YN (I)=ZER
      ZN (I)=ZER
      DOMINF (I)=ZER
      DO 50 J=1, KR
        DMAT (I, J)=ZER
        CMAT (I, J)=ZER
        PMAT (I, J)=ZER
50  CONTINUE
      GOTO 15
60  CONTINUE
    REWIND INMAT
    END

  SUBROUTINE SHAPE23 (KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
*                VXN, VYN, VZN, PORO)
    IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F, P, S, V, W, X, Y, Z)
    PARAMETER (ZER=0.00)
    DIMENSION XN (1), YN (1), ZN (1), DMAT (27, 1), CMAT (27, 1), PMAT (27, 1)
    DIMENSION SI3 (3), WI3 (3), FN (3), FNDS (3), BX (3), BY (3), BZ (3), DOMINF (1)
    DIMENSION DISP (6), VXN (1), VYN (1), VZN (1)
    DATA SI3 /-0.7745966692414834, 0.00, 0.7745966692414834/
    DATA WI3 /0.5555555555555555, 0.8888888888888888,
1      0.5555555555555555/
    DO 30 IS=1, 3
      S=SI3 (IS)

```

```

W=WI3 (IS)
V1=ZER
V2=ZER
V3=ZER
CALL FN23 (FN, S)
DO 10 I=1, KR
  V1=V1+VXN (I) *FN (I)
  V2=V2+VYN (I) *FN (I)
  V3=V3+VZN (I) *FN (I)
10 CONTINUE
CALL FD23 (FNDS, S)
CALL GRATU (KR, FNDS, XN, YN, ZN, BX, BY, BZ, DTJ)
CALL MAT (KR, DTJ, W, BX, BY, BZ, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, FN, DISP,
*
V1, V2, V3, PORO)
30 CONTINUE
END

SUBROUTINE SHAPE36 (KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
*
VXN, VYN, VZN, PORO)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F, P, V, W, X, Y, Z)
PARAMETER (ZER=0.00)
DIMENSION AL7 (7), BL7 (7), CL7 (7), WL7 (7)
DIMENSION XN (1), YN (1), ZN (1), DMAT (27, 1), CMAT (27, 1), PMAT (27, 1)
DIMENSION BX (6), BY (6), BZ (6), FN (6), FNDS (6), FNDS (6), FNDS (6), DOMINF (1)
DIMENSION DISP (6), VXN (1), VYN (1), VZN (1)
DATA AL7/0.3333333333333333, 0.0597158717897698,
1 0.4701420641051151, 0.4701420641051151,
2 0.7974269853530873, 0.1012865073234563,
3 0.1012865073234563/
DATA BL7/0.3333333333333333, 0.4701420641051151,
1 0.0597158717897698, 0.4701420641051151,
2 0.1012865073234563, 0.7974269853530873,
3 0.1012865073234563/
DATA CL7/0.3333333333333333, 0.4701420641051151,
1 0.4701420641051151, 0.0597158717897698,
2 0.1012865073234563, 0.1012865073234563,
3 0.7974269853530873/
DATA WL7/0.11250, 3*0.0661970763942531, 3*0.0629695902724136/

DO 30 IT=1, 7
  AL=AL7 (IT)
  BL=BL7 (IT)
  CL=CL7 (IT)
  W=WL7 (IT)
  V1=ZER
  V2=ZER
  V3=ZER
  CALL FN36 (AL, BL, CL, FN)
  DO 10 I=1, KR
    V1=V1+VXN (I) *FN (I)
    V2=V2+VYN (I) *FN (I)
    V3=V3+VZN (I) *FN (I)
10 CONTINUE
CALL FD36 (AL, BL, CL, FNDS, FNDS)
CALL GRATB (KR, FNDS, FNDS, XN, YN, ZN, BX, BY, BZ, DTJ)
CALL MAT (KR, DTJ, W, BX, BY, BZ, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, FN, DISP,
*
V1, V2, V3, PORO)
30 CONTINUE
END

```

```

SUBROUTINE SHAPE48 (KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
*
*                               VXN, VYN, VZN, PORO)
  IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F, P, S, T, V, W, X, Y, Z)
  PARAMETER (ZER=0.00)
  DIMENSION XN(1), YN(1), ZN(1), DMAT(27, 1), CMAT(27, 1), PMAT(27, 1)
  DIMENSION SI3(3), WI3(3), FN(8), FNDS(8), FNDD(8), DOMINF(1)
  DIMENSION BX(8), BY(8), BZ(8)
  DIMENSION DISP(6), VXN(1), VYN(1), VZN(1)
  DATA SI3/-0.7745966692414834, 0.00, 0.7745966692414834/
  DATA WI3/0.5555555555555555, 0.8888888888888888,
1    0.5555555555555555/
  DO 50 IT=1, 3
    T=SI3(IT)
    WT=WI3(IT)
    DO 40 IS=1, 3
      S=SI3(IS)
      W=WT*WI3(IS)
      V1=ZER
      V2=ZER
      V3=ZER
      CALL FN48 (S, T, FN, SM, SP, SQ, TM, TP, TQ)
    DO 10 I=1, KR
      V1=V1+VXN(I)*FN(I)
      V2=V2+VYN(I)*FN(I)
      V3=V3+VZN(I)*FN(I)
10  CONTINUE
      CALL FD48 (S, T, SM, SP, SQ, TM, TP, TQ, FNDS, FNDD)
      CALL GRATEB (KR, FNDS, FNDD, XN, YN, ZN, BX, BY, BZ, DTJ)
      CALL MAT (KR, DTJ, W, BX, BY, BZ, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, FN, DISP,
*                               V1, V2, V3, PORO)
40  CONTINUE
50  CONTINUE
  END

SUBROUTINE SHAPE49 (KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
*
*                               VXN, VYN, VZN, PORO)
  IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F, P, S, T, V, W, X, Y, Z)
  PARAMETER (ZER=0.00)
  DIMENSION XN(1), YN(1), ZN(1), DMAT(27, 1), CMAT(27, 1), PMAT(27, 1)
  DIMENSION SI3(3), WI3(3), FN(9), FNDS(9), FNDD(9), DOMINF(1)
  DIMENSION BX(9), BY(9), BZ(9)
  DIMENSION DISP(6), VXN(1), VYN(1), VZN(1)
  DATA SI3/-0.7745966692414834, 0.00, 0.7745966692414834/
  DATA WI3/0.5555555555555555, 0.8888888888888888,
1    0.5555555555555555/
  DO 50 IT=1, 3
    T=SI3(IT)
    WT=WI3(IT)
    DO 40 IS=1, 3
      S=SI3(IS)
      W=WT*WI3(IS)
      V1=ZER
      V2=ZER
      V3=ZER
      CALL FN49 (S, T, FN, SQM, SQP, SQ, TQM, TQP, TQ)
    DO 10 I=1, KR
      V1=V1+VXN(I)*FN(I)
      V2=V2+VYN(I)*FN(I)
      V3=V3+VZN(I)*FN(I)
10  CONTINUE

```

```

      CALL FD49(S,T,SQM,SQP,SQ,TQM,TQP,TQ,FNDS,FNDT)
      CALL GRATB(KR,FNDS,FNDT,XN,YN,ZN,BX,BY,BZ,DTJ)
      CALL MAT(KR,DTJ,W,BX,BY,BZ,DMAT,CMAT,PMAT,DOMINF, FN, DISP,
*
40  CONTINUE
50  CONTINUE
    END

    SUBROUTINE SHAPE410(KR,XN,YN,ZN,DMAT,CMAT,PMAT,DOMINF,DISP,
*
      IMPLICIT REAL*8 (A,B,C,D,F,P,V,W,X,Y,Z)
      PARAMETER (ZER=0.00)
      DIMENSION XN(1),YN(1),ZN(1),DMAT(27,1),CMAT(27,1),PMAT(27,1)
      DIMENSION BX(10),BY(10),BZ(10),DOMINF(1)
      DIMENSION FN(10),FNDS(10),FNDT(10),FNDU(10)
      DIMENSION AL5(5),BL5(5),CL5(5),DL5(5),WL5(5)
      DIMENSION DISP(6),VXN(1),VYN(1),VZN(1)
      DATA AL5/0.25,0.50,3*0.166666666666666666/
      DATA BL5/0.25,0.166666666666666666,0.50,2*0.166666666666666666/
      DATA CL5/0.25,2*0.166666666666666666,0.50,0.166666666666666666/
      DATA DL5/0.25,3*0.166666666666666666,0.50/
      DATA WL5/-0.80,0.45,0.45,0.45,0.45/
      DO 20 IP=1,5
        AL=AL5(IP)
        BL=BL5(IP)
        CL=CL5(IP)
        DL=DL5(IP)
        W=-WL5(IP)/6.0
        V1=ZER
        V2=ZER
        V3=ZER
        CALL FN410(AL,BL,CL,DL,A2,B2,C2,D2, FN)
        DO 10 I=1,KR
          V1=V1+VXN(I)*FN(I)
          V2=V2+VYN(I)*FN(I)
          V3=V3+VZN(I)*FN(I)
10  CONTINUE
        CALL DS410(AL,BL,CL,DL,A2,B2,C2,D2,FNDS)
        CALL DT410(AL,BL,CL,DL,A2,B2,C2,D2,FNDT)
        CALL DU410(AL,BL,CL,DL,A2,B2,C2,D2,FNDU)
        CALL GRAT(KR,FNDS,FNDT,FNDU,XN,YN,ZN,BX,BY,BZ,DTJ)
        CALL MAT(KR,DTJ,W,BX,BY,BZ,DMAT,CMAT,PMAT,DOMINF, FN, DISP,
*
20  CONTINUE
    END

    SUBROUTINE SHAPE5I3(KR,XN,YN,ZN,DMAT,CMAT,PMAT,DOMINF,DISP,
*
      IMPLICIT REAL*8 (A,B,C,D,F,P,S,T,U,V,W,X,Y,Z)
      PARAMETER (ZER=0.00)
      DIMENSION XN(1),YN(1),ZN(1),DMAT(27,1),CMAT(27,1),PMAT(27,1)
      DIMENSION SI3(3),WI3(3),BX(20),BY(20),BZ(20),DOMINF(1)
      DIMENSION FN(20),FNDS(20),FNDT(20),FNDU(20)
      DIMENSION DISP(6),VXN(1),VYN(1),VZN(1)
      DATA SI3/-0.7745966692414834,0.00,0.7745966692414834/
      DATA WI3/0.5555555555555555,0.8888888888888888,
1  0.5555555555555555/
      DO 70 IU=1,3
        U=SI3(IU)
        WU=WI3(IU)

```

```

DO 60 IT=1,3
  T=SI3(IT)
  WT=WI3(IT)
  DO 50 IS=1,3
    S=SI3(IS)
    W=WU*WT*WI3(IS)
    V1=ZER
    V2=ZER
    V3=ZER
    CALL BRAUX(SM,SP,SQ,TM,TP,TQ,UM,UP,UQ,A1,A2,A3,A4,
1      S,T,U)
    CALL FN513(SM,SP,SQ,TM,TP,TQ,UM,UP,UQ,A1,A2,A3,A4, FN)
    DO 10 I=1, KR
      V1=V1+VXN(I)*FN(I)
      V2=V2+VYN(I)*FN(I)
10     V3=V3+VZN(I)*FN(I)
    CONTINUE
    CALL DS513(TM,TP,TQ,UM,UP,UQ,S,FNDS)
    CALL DT513(SM,SP,SQ,UM,UP,UQ,T,FNDT)
    CALL DU513(SM,SP,SQ,TM,TP,TQ,U,FNDU,A1,A2,A3,A4)
    CALL GRAT(KR,FNDS,FNDT,FNDU,XN,YN,ZN,BX,BY,BZ,DTJ)
    CALL MAT(KR,DTJ,W,BX,BY,BZ,DMAT,CMAT,PMAT,DOMINF, FN, DISP,
*          V1,V2,V3,PORO)
50   CONTINUE
60   CONTINUE
70  CONTINUE
    END

```

```

SUBROUTINE SHAPE615(KR,XN,YN,ZN,DMAT,CMAT,PMAT,DOMINF,DISP,
*          VXN,VYN,VZN,PORO)

```

```

IMPLICIT REAL*8 (A,B,C,D,F,P,S,U,V,W,X,Y,Z)
PARAMETER (ZER=0.00)
DIMENSION XN(1),YN(1),ZN(1),DMAT(27,1),CMAT(27,1),PMAT(27,1)
DIMENSION SI3(3),WI3(3),AL7(7),BL7(7),CL7(7),WL7(7),DOMINF(1)
DIMENSION BX(15),BY(15),BZ(15)
DIMENSION FN(15),FNDS(15),FNDT(15),FNDU(15)
DIMENSION DISP(6),VXN(1),VYN(1),VZN(1)
DATA SI3/-0.7745966692414834,0.00,0.7745966692414834/
DATA WI3/0.5555555555555555,0.8888888888888888,
1      0.5555555555555555/
DATA AL7/0.3333333333333333,0.0597158717897698,
1      0.4701420641051151,0.4701420641051151,
2      0.7974269853530873,0.1012865073234563,
3      0.1012865073234563/
DATA BL7/0.3333333333333333,0.4701420641051151,
1      0.0597158717897698,0.4701420641051151,
2      0.1012865073234563,0.7974269853530873,
3      0.1012865073234563/
DATA CL7/0.3333333333333333,0.4701420641051151,
1      0.4701420641051151,0.0597158717897698,
2      0.1012865073234563,0.1012865073234563,
3      0.7974269853530873/
DATA WL7/0.11250,3*0.0661970763942531,3*0.0629695902724136/
DO 50 IT=1,7
  AL=AL7(IT)
  BL=BL7(IT)
  CL=CL7(IT)
  WT=WL7(IT)
DO 40 IU=1,3
  U=SI3(IU)

```

```

W=WT*WI3(IU)
V1=ZER
V2=ZER
V3=ZER
CALL PRAUX(AL, BL, CL, U, UM, UP, UQ, A1, A2, A3)
CALL FN615(AL, BL, CL, UM, UP, UQ, A1, A2, A3, FN)
DO 10 I=1, KR
    V1=V1+VXN(I)*FN(I)
    V2=V2+VYN(I)*FN(I)
    V3=V3+VZN(I)*FN(I)
10 CONTINUE
CALL DS615(AL, BL, CL, UM, UP, UQ, FNDS)
CALL DT615(AL, BL, CL, UM, UP, UQ, FNDT)
CALL DU615(AL, BL, CL, A1, A2, A3, U, FNDU)
CALL GRATT(KR, FNDS, FNDT, FNDU, XN, YN, ZN, BX, BY, BZ, DTJ)
CALL MAT(KR, DTJ, W, BX, BY, BZ, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, FN, DISP,
    V1, V2, V3, PORO)
*
40 CONTINUE
50 CONTINUE
END

SUBROUTINE SHAPE618(KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
*
    VXN, VYN, VZN, PORO)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F, P, S, U, V, W, X, Y, Z)
PARAMETER (ZER=0.00)
DIMENSION XN(1), YN(1), ZN(1), DMAT(27, 1), CMAT(27, 1), PMAT(27, 1)
DIMENSION SI3(3), WI3(3), AL7(7), BL7(7), CL7(7), WL7(7), DOMINF(1)
DIMENSION BX(18), BY(18), BZ(18)
DIMENSION FN(18), FNDS(18), FNDT(18), FNDU(18)
DIMENSION DISP(6), VXN(1), VYN(1), VZN(1)
DATA SI3/-0.7745966692414834, 0.00, 0.7745966692414834/
DATA WI3/0.5555555555555555, 0.8888888888888888,
1    0.5555555555555555/
DATA AL7/0.3333333333333333, 0.0597158717897698,
1    0.4701420641051151, 0.4701420641051151,
2    0.7974269853530873, 0.1012865073234563,
3    0.1012865073234563/
DATA BL7/0.3333333333333333, 0.4701420641051151,
1    0.0597158717897698, 0.4701420641051151,
2    0.1012865073234563, 0.7974269853530873,
3    0.1012865073234563/
DATA CL7/0.3333333333333333, 0.4701420641051151,
1    0.4701420641051151, 0.0597158717897698,
2    0.1012865073234563, 0.1012865073234563,
3    0.7974269853530873/
DATA WL7/0.11250, 3*0.0661970763942531, 3*0.0629695902724136/
DO 50 IT=1, 7
    AL=AL7(IT)
    BL=BL7(IT)
    CL=CL7(IT)
    WT=WL7(IT)
    DO 40 IU=1, 3
        U=SI3(IU)
        W=WT*WI3(IU)
        V1=ZER
        V2=ZER
        V3=ZER
        CALL FN618(AL, BL, CL, U, A2, B2, C2, A, B, C,
1            AA, BB, CC, UM, UQ, UP, FN)
        DO 10 I=1, KR

```

```

      V1=V1+VXN(I)*FN(I)
      V2=V2+VYN(I)*FN(I)
      V3=V3+VZN(I)*FN(I)
10    CONTINUE
      CALL FD618 (A2, B2, C2, A, B, C, AA, BB, CC, U, UM, UQ, UP,
1      FNDS, FNDT, FNDU)
      CALL GRATT (KR, FNDS, FNDT, FNDU, XN, YN, ZN, BX, BY, BZ, DTJ)
      CALL MAT (KR, DTJ, W, BX, BY, BZ, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, FN, DISP,
*      V1, V2, V3, PORO)
40    CONTINUE
50    CONTINUE
      END

      SUBROUTINE SHAPE820 (KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
*      VXN, VYN, VZN, PORO)
      IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F, P, S, T, U, V, W, X, Y, Z)
      PARAMETER (ZER=0.00)
      DIMENSION XN(1), YN(1), ZN(1), DMAT(27,1), CMAT(27,1), PMAT(27,1)
      DIMENSION SI3(3), WI3(3), BX(20), BY(20), BZ(20), DOMINF(1)
      DIMENSION FN(20), FNDS(20), FNDT(20), FNDU(20)
      DIMENSION DISP(6), VXN(1), VYN(1), VZN(1)
      DATA SI3/-0.7745966692414834, 0.00, 0.7745966692414834/
      DATA WI3/0.5555555555555555, 0.8888888888888888,
1      0.5555555555555555/
      DO 70 IU=1,3
        U=SI3(IU)
        WU=WI3(IU)
        DO 60 IT=1,3
          T=SI3(IT)
          WT=WI3(IT)
          DO 50 IS=1,3
            S=SI3(IS)
            W=WU*WT*WI3(IS)
            V1=ZER
            V2=ZER
            V3=ZER
            CALL BRAUX (SM, SP, SQ, TM, TP, TQ, UM, UP, UQ, A1, A2, A3, A4,
1            S, T, U)
            CALL FN820 (SM, SP, SQ, TM, TP, TQ, UM, UP, UQ, A1, A2, A3, A4, FN)
            DO 10 I=1, KR
              V1=V1+VXN(I)*FN(I)
              V2=V2+VYN(I)*FN(I)
              V3=V3+VZN(I)*FN(I)
10          CONTINUE
            CALL DS820 (TM, TP, TQ, UM, UP, UQ, S, FNDS)
            CALL DT820 (SM, SP, SQ, UM, UP, UQ, T, FNDT)
            CALL DU820 (SM, SP, SQ, TM, TP, TQ, U, FNDU, A1, A2, A3, A4)
            CALL GRATT (KR, FNDS, FNDT, FNDU, XN, YN, ZN, BX, BY, BZ, DTJ)
            CALL MAT (KR, DTJ, W, BX, BY, BZ, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, FN, DISP,
*            V1, V2, V3, PORO)
50          CONTINUE
60          CONTINUE
70          CONTINUE
            END

      SUBROUTINE SHAPE827 (KR, XN, YN, ZN, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, DISP,
*      VXN, VYN, VZN, PORO)
      IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F, P, S, T, U, V, W, X, Y, Z)
      PARAMETER (ZER=0.00)
      DIMENSION XN(1), YN(1), ZN(1), DMAT(27,1), CMAT(27,1), PMAT(27,1)

```

```

DIMENSION SI3(3), WI3(3), BX(27), BY(27), BZ(27), DOMINF(1)
DIMENSION FN(27), FNDS(27), FNDDT(27), FNDDU(27), SQ(3), TQ(3), UQ(3)
DIMENSION DISP(6), VXN(1), VYN(1), VZN(1)
DATA SI3/-0.7745966692414834, 0.00, 0.7745966692414834/
DATA WI3/0.5555555555555555, 0.8888888888888888,
1      0.5555555555555555/
DO 70 IU=1, 3
  U=SI3(IU)
  WU=WI3(IU)
  DO 60 IT=1, 3
    T=SI3(IT)
    WT=WI3(IT)
    DO 50 IS=1, 3
      S=SI3(IS)
      W=WU*WT*WI3(IS)
      V1=ZER
      V2=ZER
      V3=ZER
      CALL FN827(S, T, U, FN, SQ, TQ, UQ)
      DO 10 I=1, KR
        V1=V1+VXN(I)*FN(I)
        V2=V2+VYN(I)*FN(I)
        V3=V3+VZN(I)*FN(I)
10      CONTINUE
      CALL FD827(S, T, U, SQ, TQ, UQ, FNDS, FNDDT, FNDDU)
      CALL GRATT(KR, FNDS, FNDDT, FNDDU, XN, YN, ZN, BX, BY, BZ, DTJ)
      CALL MAT(KR, DTJ, W, BX, BY, BZ, DMAT, CMAT, PMAT, DOMINF, FN, DISP,
*          V1, V2, V3, PORO)
50      CONTINUE
60      CONTINUE
70      CONTINUE
      END

```

B.2.7 Calcul des matrices des gradients

```

SUBROUTINE GRATT(KR, FNDS, XN, YN, ZN, BX, BY, BZ, DETJ)
IMPLICIT REAL*8 (B, D, F, G, X, Y, Z)
PARAMETER (ZER=0.00)
DIMENSION FNDS(1), XN(1), YN(1), ZN(1), BX(1), BY(1), BZ(1)
C..Matrice des gradients - Segment unidim. en espace tridi
D11=ZER
D12=ZER
D13=ZER
DO 10 K=1, KR
  FS=FNDS(K)
  D11=D11+FS*XN(K) ! D1J: composantes du vecteur
  D12=D12+FS*YN(K) ! de la base covariante
  D13=D13+FS*ZN(K)
10 CONTINUE
G11=D11*D11+D12*D12+D13*D13 ! tenseur métrique covariant
GV11=1.00/G11 ! tenseur métrique contravariant
F11=D11*GV11 ! F1J: composantes du vecteur
F12=D12*GV11 ! de la base contravariante
F13=D13*GV11
DO 20 K=1, KR
  FS=FNDS(K)
  BX(K)=F11*FS
  BY(K)=F12*FS ! lignes de la matrice des gradients
  BZ(K)=F13*FS

```



```

20 CONTINUE
  DETJ=SQRT(G11)    ! élément de longueur
  END

  SUBROUTINE GRATB(KUREL, FNDS, FNDDT, XN, YN, ZN, BX, BY, BZ, DETJ)
  IMPLICIT REAL*8 (B,D,F,G,X,Y,Z)
  PARAMETER (ZER=0.00)
  DIMENSION FNDS(1), FNDDT(1), BX(1), BY(1), BZ(1), XN(1), YN(1)
  DIMENSION ZN(1), D(6)
  EQUIVALENCE (D11,D(1)), (D12,D(2)), (D13,D(3)), (D21,D(4))
  EQUIVALENCE (D22,D(5)), (D23,D(6))
C..Matrice des gradients - Feuille bidi en espace tridi
  DO 8 I=1, 6
    D(I)=ZER
  8 CONTINUE
  DO 10 I=1, KUREL
    FS=FNDS(I)
    FT=FNDDT(I)
    D11=D11+FS*XN(I)  ! DIJ: composantes des vecteurs
    D12=D12+FS*YN(I)  !      de la base covariante
    D13=D13+FS*ZN(I)
    D21=D21+FT*XN(I)
    D22=D22+FT*YN(I)
    D23=D23+FT*ZN(I)
  10 CONTINUE
  G11=D11*D11+D12*D12+D13*D13  ! GIJ: tenseur métrique
  G12=D11*D21+D12*D22+D13*D23  !      covariant
  G22=D21*D21+D22*D22+D23*D23
  DETJ=G11*G22-G12*G12
  DETJV=1.00/DETJ
  GV11=G22*DETJV              ! GVIJ: tenseur métrique
  GV12=-G12*DETJV            !      contravariant
  GV22=G11*DETJV
  F11=D11*GV11+D21*GV12      ! FIJ: composantes des vecteurs
  F12=D12*GV11+D22*GV12      !      de la base contravariante
  F13=D13*GV11+D23*GV12
  F21=D11*GV12+D21*GV22
  F22=D12*GV12+D22*GV22
  F23=D13*GV12+D23*GV22
  DO 20 I=1, KUREL
    FS=FNDS(I)
    FT=FNDDT(I)
    BX(I)=F11*FS+F21*FT      ! lignes de la matrice
    BY(I)=F12*FS+F22*FT      ! des gradients
    BZ(I)=F13*FS+F23*FT
  20 CONTINUE
  DETJ=SQRT(DETJ)    ! élément de surface
  END

  SUBROUTINE GRATD(KUREL, FNDS, FNDDT, FNDDU, XN, YN, ZN,
  1 BX, BY, BZ, DETJ)
  IMPLICIT REAL*8 (B,D,F,X,Y,Z)
  PARAMETER (ZER=0.00)
  DIMENSION D(9), FNDS(1), FNDDT(1), FNDDU(1), BX(1), BY(1), BZ(1)
  DIMENSION XN(1), YN(1), ZN(1)
  EQUIVALENCE (D11,D(1)), (D12,D(2)), (D13,D(3))
  EQUIVALENCE (D21,D(4)), (D22,D(5)), (D23,D(6))
  EQUIVALENCE (D31,D(7)), (D32,D(8)), (D33,D(9))
C..Matrice des gradients - Elément tridi en espace tridi
  DO 8 I=1, 9

```

```

      D(I)=ZER
8 CONTINUE
  DO 10 I=1,KUREL
    XX=XN(I)
    YY=YN(I)
    ZZ=ZN(I)
    FS=FNDS(I)
    FT=FNDT(I)
    FU=FNDU(I)
    D11=D11+FS*XX ! DIJ: matrice de transformation
    D12=D12+FS*YY
    D13=D13+FS*ZZ
    D21=D21+FT*XX
    D22=D22+FT*YY
    D23=D23+FT*ZZ
    D31=D31+FU*XX
    D32=D32+FU*YY
    D33=D33+FU*ZZ
10 CONTINUE
  DM11=D22*D33-D23*D32 ! DMIJ: mineures de DIJ
  DM12=-(D21*D33-D23*D31)
  DM13=D21*D32-D22*D31
  DM21=-(D12*D33-D13*D32)
  DM22=D11*D33-D13*D31
  DM23=-(D11*D32-D12*D31)
  DM31=D12*D23-D13*D22
  DM32=-(D11*D23-D13*D21)
  DM33=D11*D22-D12*D21
  DETJ=D11*DM11+D12*DM12+D13*DM13 ! élément de volume
  DETJV=1.00/DETI
  DV11=DM11*DETI ! DVIJ: inverse de DIJ à partir des
  DV12=DM21*DETI ! mineures transposées DMIJ
  DV13=DM31*DETI
  DV21=DM12*DETI
  DV22=DM22*DETI
  DV23=DM32*DETI
  DV31=DM13*DETI
  DV32=DM23*DETI
  DV33=DM33*DETI
  DO 20 I=1,KUREL
    FS=FNDS(I)
    FT=FNDT(I)
    FU=FNDU(I)
    BX(I)=DV11*FS+DV12*FT+DV13*FU ! lignes de la matrice
    BY(I)=DV21*FS+DV22*FT+DV23*FU ! des gradients
    BZ(I)=DV31*FS+DV32*FT+DV33*FU
20 CONTINUE
  END

```

B.2.8 Fonctions d'Interpolation et leurs dérivées

```

SUBROUTINE FN23(FN,S)
IMPLICIT REAL*8 (A,F,S)
DIMENSION FN(3)
A=S*S
FN(1)=0.5*(A-S)
FN(2)=1.0-A
FN(3)=0.5*(A+S)
END

```

```

SUBROUTINE FD23(FNDS, S)
IMPLICIT REAL*8 (F, S)
DIMENSION FNDS(3)
FNDS(1)=S-0.5
FNDS(2)=-S-S
FNDS(3)=S+0.5
END

```

```

SUBROUTINE FN36(AL, BL, CL, FN)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, F)
DIMENSION FN(6)
A=AL*BL*2.0
B=BL*CL*2.0
C=CL*AL*2.0
FN(1)=AL-C-A
FN(3)=BL-A-B
FN(5)=CL-B-C
FN(2)=A+A
FN(4)=B+B
FN(6)=C+C
END

```

```

SUBROUTINE FD36(AL, BL, CL, FNDS, FNDT)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, F)
DIMENSION FNDS(6), FNDT(6)
AS=BL+BL
AT=AL+AL
BS=-AS
BT=CL+CL-AS
CS=CL+CL-AT
CT=-AT
FNDS(1)=1.0-CS-AS
FNDT(1)=0.0
FNDS(3)=0.0
FNDT(3)=1.0-AT-BT
FNDS(5)=-1.0-BS-CS
FNDT(5)=-1.0-BT-CT
FNDS(2)=AS+AS
FNDT(2)=AT+AT
FNDS(4)=BS+BS
FNDT(4)=BT+BT
FNDS(6)=CS+CS
FNDT(6)=CT+CT
END

```

```

SUBROUTINE FN48(S, T, FN, SM, SP, SQ, TM, TP, TQ)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, E, S, T)
DIMENSION FN(8)
CS=0.5*S
CT=0.5*T
SM=0.5-CS
SP=0.5+CS
TM=0.5-CT
TP=0.5+CT
SQ=0.5-S*CS
TQ=0.5-T*CT
A=SQ*TM
B=SP*TQ
C=SQ*TP

```

```

D=SM*TQ
FN(1)=SM*TM-D-A
FN(3)=SP*TM-A-B
FN(5)=SP*TP-B-C
FN(7)=SM*TP-C-D
FN(2)=A+A
FN(4)=B+B
FN(6)=C+C
FN(8)=D+D
END

```

```

SUBROUTINE FD48 (S, T, SM, SP, SQ, TM, TP, TQ, FNDS, FNDT)
IMPLICIT REAL*8 (A,B,C,D,F,S,T)
DIMENSION FNDS(8),FNDT(8)
AS=-S*TM
AT=-0.5*SQ
BS=0.5*TQ
BT=-T*SP
CS=-S*TP
CT=0.5*SQ
DS=-0.5*TQ
DT=-T*SM
FNDS(1)=-0.5*TM-DS-AS
FNDT(1)=-0.5*SM-DT-AT
FNDS(3)=0.5*TM-AS-BS
FNDT(3)=-0.5*SP-AT-BT
FNDS(5)=0.5*TP-BS-CS
FNDT(5)=0.5*SP-BT-CT
FNDS(7)=-0.5*TP-CS-DS
FNDT(7)=0.5*SM-CT-DT
FNDS(2)=AS+AS
FNDT(2)=AT+AT
FNDS(4)=BS+BS
FNDT(4)=BT+BT
FNDS(6)=CS+CS
FNDT(6)=CT+CT
FNDS(8)=DS+DS
FNDT(8)=DT+DT
END

```

```

SUBROUTINE FN49 (S, T, FN, SQM, SQP, SQ, TQM, TQP, TQ)
IMPLICIT REAL*8 (A,B,F,S,T)
DIMENSION FN(9)
A=S*S
B=T*T
SQM=0.5*(A-S)
SQP=0.5*(A+S)
SQ=1.0-A
TQM=0.5*(B-T)
TQP=0.5*(B+T)
TQ=1.0-B
FN(1)=SQM*TQM
FN(2)=SQ*TQM
FN(3)=SQP*TQM
FN(4)=SQP*TQ
FN(5)=SQP*TQP
FN(6)=SQ*TQP
FN(7)=SQM*TQP
FN(8)=SQM*TQ
FN(9)=SQ*TQ
END

```

```

SUBROUTINE FD49 (S, T, SQM, SQP, SQ, TQM, TQP, TQ, FNDS, FNDT)
IMPLICIT REAL*8 (D, F, S, T)
DIMENSION FNDS (9), FNDT (9)
DSQM=S-0.5
DSQP=S+0.5
DSQ=-S-S
DTQM=T-0.5
DTQP=T+0.5
DTQ=-T-T
FNDS (1) =DSQM*TQM
FNDT (1) =SQM*DTQM
FNDS (2) =DSQ*TQM
FNDT (2) =SQ*DTQM
FNDS (3) =DSQP*TQM
FNDT (3) =SQP*DTQM
FNDS (4) =DSQP*TQ
FNDT (4) =SQP*DTQ
FNDS (5) =DSQP*TQP
FNDT (5) =SQP*DTQP
FNDS (6) =DSQ*TQP
FNDT (6) =SQ*DTQP
FNDS (7) =DSQM*TQP
FNDT (7) =SQM*DTQP
FNDS (8) =DSQM*TQ
FNDT (8) =SQM*DTQ
FNDS (9) =DSQ*TQ
FNDT (9) =SQ*DTQ
END

```

```

SUBROUTINE FN410 (AL, BL, CL, DL, A2, B2, C2, D2, FN)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F)
DIMENSION FN (10)
A2=AL+AL
B2=BL+BL
C2=CL+CL
D2=DL+DL
FN (1) =AL*(A2-1.0)
FN (3) =BL*(B2-1.0)
FN (5) =CL*(C2-1.0)
FN (10) =DL*(D2-1.0)
FN (2) =A2*B2
FN (4) =B2*C2
FN (6) =C2*A2
FN (7) =A2*D2
FN (8) =B2*D2
FN (9) =C2*D2
END

```

```

SUBROUTINE DS410 (AL, BL, CL, DL, A2, B2, C2, D2, FNDS)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F)
DIMENSION FNDS (10)
FNDS (1) =A2+A2-1.0
FNDS (3) =0.0
FNDS (5) =0.0
FNDS (10) =-D2-D2+1.0
FNDS (2) =B2+B2
FNDS (4) =0.0
FNDS (6) =C2+C2
FNDS (7) =D2+D2-A2-A2

```

```

FNDS (8)=-FNDS (2)
FNDS (9)=-FNDS (6)
END

```

```

SUBROUTINE DT410(AL,BL,CL,DL,A2,B2,C2,D2,FNDT)
IMPLICIT REAL*8 (A,B,C,D,F)
DIMENSION FNDT(10)
FNDT(1)=0.0
FNDT(3)=B2+B2-1.0
FNDT(5)=0.0
FNDT(10)=-D2-D2+1.0
FNDT(2)=A2+A2
FNDT(4)=C2+C2
FNDT(6)=0.0
FNDT(7)=-FNDT(2)
FNDT(8)=D2+D2-B2-B2
FNDT(9)=-FNDT(4)
END

```

```

SUBROUTINE DU410(AL,BL,CL,DL,A2,B2,C2,D2,FNDU)
IMPLICIT REAL*8 (A,B,C,D,F)
DIMENSION FNDU(10)
FNDU(1)=0.0
FNDU(3)=0.0
FNDU(5)=C2+C2-1.0
FNDU(10)=-D2-D2+1.0
FNDU(2)=0.0
FNDU(4)=B2+B2
FNDU(6)=A2+A2
FNDU(7)=-FNDU(6)
FNDU(8)=-FNDU(4)
FNDU(9)=D2+D2-C2-C2
END

```

```

SUBROUTINE BRAUX(SM,SP,SQ,TM,TP,TQ,UM,UP,UQ,A1,A2,A3,A4,
1 S,T,U)
IMPLICIT REAL*8 (A,C,D,S,T,U)
C=0.5
D=1.0
SM=C*(D-S)
SP=C*(D+S)
TM=C*(D-T)
TP=C*(D+T)
UM=C*(D-U)
UP=C*(D+U)
SQ=D-S*S
TQ=D-T*T
UQ=D-U*U
A1=SM*TM
A2=SP*TM
A3=SP*TP
A4=SM*TP
END

```

```

SUBROUTINE PRAUX(AL,BL,CL,U,UM,UP,UQ,A1,A2,A3)
IMPLICIT REAL*8 (A,B,C,U)
A1=4.0*AL*BL
A2=4.0*BL*CL
A3=4.0*CL*AL
UM=0.5*(1.0-U)

```

```

UP=0.5*(1.0+U)
UQ=1.0-U*U
END

```

```

SUBROUTINE FN513(SM, SP, SQ, TM, TP, TQ, UM, UP, UQ, A1, A2, A3, A4, FN)
IMPLICIT REAL*8 (A, F, S, T, U)
DIMENSION FN(20)

```

C Pyramide de 13 nœuds conçue à partir d'une brique de 20 nœuds

```

FN(2)=SQ*TM*UM
FN(4)=TQ*SP*UM
FN(6)=SQ*TP*UM
FN(8)=TQ*SM*UM
FN(9)=UQ*A1
FN(10)=UQ*A2
FN(11)=UQ*A3
FN(12)=UQ*A4
FN(1)=A1*UM-0.5*(FN(2)+FN(8)+FN(9))
FN(3)=A2*UM-0.5*(FN(4)+FN(2)+FN(10))
FN(5)=A3*UM-0.5*(FN(6)+FN(4)+FN(11))
FN(7)=A4*UM-0.5*(FN(8)+FN(6)+FN(12))
FN(13)=UP-0.5*UQ
END

```

```

SUBROUTINE DS513(TM, TP, TQ, UM, UP, UQ, S, FNDS)
IMPLICIT REAL*8 (D, F, S, T, U)
DIMENSION FNDS(20)
DATA DSM, DSP / -0.5, 0.5 /

```

C Pyramide de 13 nœuds conçue à partir d'une brique de 20 nœuds

```

DSQ=-S-S
DSA=DSM*TM
DSB=-DSA
DSC=DSP*TP
DSD=-DSC
FNDS(2)=DSQ*TM*UM
FNDS(4)=DSP*TQ*UM
FNDS(6)=DSQ*TP*UM
FNDS(8)=DSM*TQ*UM
FNDS(9)=UQ*DSA
FNDS(10)=UQ*DSB
FNDS(11)=UQ*DSC
FNDS(12)=UQ*DSD
FNDS(1)=DSA*UM-0.5*(FNDS(2)+FNDS(8)+FNDS(9))
FNDS(3)=DSB*UM-0.5*(FNDS(4)+FNDS(2)+FNDS(10))
FNDS(5)=DSC*UM-0.5*(FNDS(6)+FNDS(4)+FNDS(11))
FNDS(7)=DSD*UM-0.5*(FNDS(8)+FNDS(6)+FNDS(12))
FNDS(13)=0.0
END

```

```

SUBROUTINE DT513(SM, SP, SQ, UM, UP, UQ, T, FNDDT)
IMPLICIT REAL*8 (D, F, S, T, U)
DIMENSION FNDDT(20)
DATA DTM, DTP / -0.5, 0.5 /

```

C Pyramide de 13 nœuds conçue à partir d'une brique de 20 nœuds

```

DTQ=-T-T
DTA=SM*DTM
DTB=SP*DTM
DTC=SP*DTP
DTD=SM*DTP
FNDDT(2)=SQ*DTM*UM
FNDDT(4)=SP*DTQ*UM

```

```

FNDT (6) =SQ*DTP*UM
FNDT (8) =SM*DTQ*UM
FNDT (9) =UQ*DTA
FNDT (10) =UQ*DTB
FNDT (11) =UQ*DTC
FNDT (12) =UQ*DTD
FNDT (1) =DTA*UM-0.5*(FNDT (2)+FNDT (8)+FNDT (9))
FNDT (3) =DTB*UM-0.5*(FNDT (4)+FNDT (2)+FNDT (10))
FNDT (5) =DTC*UM-0.5*(FNDT (6)+FNDT (4)+FNDT (11))
FNDT (7) =DTD*UM-0.5*(FNDT (8)+FNDT (6)+FNDT (12))
FNDT (13) =0.0
END

```

```

SUBROUTINE DU513(SM, SP, SQ, TM, TP, TQ, U, FNDU, A1, A2, A3, A4)
IMPLICIT REAL*8 (A, D, F, S, T, U)
DIMENSION FNDU(20)
DATA DUM, DUP /-0.5, 0.5/

```

C Pyramide de 13 nœuds conçue à partir d'une brique de 20 nœuds

```

DUQ=-U-U
FNDU (2) =SQ*TM*DUM
FNDU (4) =SP*TQ*DUM
FNDU (6) =SQ*TP*DUM
FNDU (8) =SM*TQ*DUM
FNDU (9) =A1*DUQ
FNDU (10) =A2*DUQ
FNDU (11) =A3*DUQ
FNDU (12) =A4*DUQ
FNDU (1) =A1*DUM-0.5*(FNDU (2)+FNDU (8)+FNDU (9))
FNDU (3) =A2*DUM-0.5*(FNDU (4)+FNDU (2)+FNDU (10))
FNDU (5) =A3*DUM-0.5*(FNDU (6)+FNDU (4)+FNDU (11))
FNDU (7) =A4*DUM-0.5*(FNDU (8)+FNDU (6)+FNDU (12))
FNDU (13) =DUP+U
END

```

```

SUBROUTINE FN615(AL, BL, CL, UM, UP, UQ, A1, A2, A3, FN)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, F, U)
DIMENSION FN(15)
FN (2) =A1*UM
FN (4) =A2*UM
FN (6) =A3*UM
FN (7) =AL*UQ
FN (8) =BL*UQ
FN (9) =CL*UQ
FN (11) =A1*UP
FN (13) =A2*UP
FN (15) =A3*UP
FN (1) =AL*UM-0.5*(FN (2)+FN (6)+FN (7))
FN (3) =BL*UM-0.5*(FN (4)+FN (2)+FN (8))
FN (5) =CL*UM-0.5*(FN (6)+FN (4)+FN (9))
FN (10) =AL*UP-0.5*(FN (11)+FN (15)+FN (7))
FN (12) =BL*UP-0.5*(FN (13)+FN (11)+FN (8))
FN (14) =CL*UP-0.5*(FN (15)+FN (13)+FN (9))
END

```

```

SUBROUTINE DS615(AL, BL, CL, UM, UP, UQ, FNDS)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F, U)
DIMENSION FNDS(15)
DSA1=4.0*BL
DSA2=-DSA1
DSA3=4.0*(CL-AL)

```



```

FNDS (2)=DSA1*UM
FNDS (4)=DSA2*UM
FNDS (6)=DSA3*UM
FNDS (7)=UQ
FNDS (8)=0.0
FNDS (9)=-UQ
FNDS (11)=DSA1*UP
FNDS (13)=DSA2*UP
FNDS (15)=DSA3*UP
FNDS (1)=UM-0.5*(FNDS (2)+FNDS (6)+FNDS (7))
FNDS (3)=0.0-0.5*(FNDS (4)+FNDS (2)+FNDS (8))
FNDS (5)=-UM-0.5*(FNDS (6)+FNDS (4)+FNDS (9))
FNDS (10)=UP-0.5*(FNDS (11)+FNDS (15)+FNDS (7))
FNDS (12)=0.0-0.5*(FNDS (13)+FNDS (11)+FNDS (8))
FNDS (14)=-UP-0.5*(FNDS (15)+FNDS (13)+FNDS (9))
END

```

```

SUBROUTINE DT615 (AL, BL, CL, UM, UP, UQ, FNDS)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F, U)
DIMENSION FNDS (15)
DTA1=4.0*AL
DTA2=4.0*(CL-BL)
DTA3=-DTA1
FNDS (2)=DTA1*UM
FNDS (4)=DTA2*UM
FNDS (6)=DTA3*UM
FNDS (7)=0.0
FNDS (8)=UQ
FNDS (9)=-UQ
FNDS (11)=DTA1*UP
FNDS (13)=DTA2*UP
FNDS (15)=DTA3*UP
FNDS (1)=0.0-0.5*(FNDS (2)+FNDS (6)+FNDS (7))
FNDS (3)=UM-0.5*(FNDS (4)+FNDS (2)+FNDS (8))
FNDS (5)=-UM-0.5*(FNDS (6)+FNDS (4)+FNDS (9))
FNDS (10)=0.0-0.5*(FNDS (11)+FNDS (15)+FNDS (7))
FNDS (12)=UP-0.5*(FNDS (13)+FNDS (11)+FNDS (8))
FNDS (14)=-UP-0.5*(FNDS (15)+FNDS (13)+FNDS (9))
END

```

```

SUBROUTINE DU615 (AL, BL, CL, A1, A2, A3, U, FNDS)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F, U)
DIMENSION FNDS (15)
DATA DUM, DUP /-0.5, 0.5/
DUQ=-U-U
FNDS (2)=A1*DUM
FNDS (4)=A2*DUM
FNDS (6)=A3*DUM
FNDS (7)=AL*DUQ
FNDS (8)=BL*DUQ
FNDS (9)=CL*DUQ
FNDS (11)=A1*DUP
FNDS (13)=A2*DUP
FNDS (15)=A3*DUP
FNDS (1)=AL*DUM-0.5*(FNDS (2)+FNDS (6)+FNDS (7))
FNDS (3)=BL*DUM-0.5*(FNDS (4)+FNDS (2)+FNDS (8))
FNDS (5)=CL*DUM-0.5*(FNDS (6)+FNDS (4)+FNDS (9))
FNDS (10)=AL*DUP-0.5*(FNDS (11)+FNDS (15)+FNDS (7))
FNDS (12)=BL*DUP-0.5*(FNDS (13)+FNDS (11)+FNDS (8))
FNDS (14)=CL*DUP-0.5*(FNDS (15)+FNDS (13)+FNDS (9))
END

```

```

SUBROUTINE FN618 (AL, BL, CL, U, A2, B2, C2, A, B, C,
1          AA, BB, CC, UM, UQ, UP, FN)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, F, R, U)
PARAMETER (R0=0.00, R1=1.00, R2=2.00, RD=0.50)
DIMENSION FN(18)
A2=R2*AL
B2=R2*BL
C2=R2*CL
U2=U*U
A=AL*(A2-R1)
B=BL*(B2-R1)
C=CL*(C2-R1)
AA=A2*B2
BB=B2*C2
CC=C2*A2
UM=RD*(U2-U)
UP=RD*(U2+U)
UQ=R1-U2
FN(1)=A*UM
FN(3)=B*UM
FN(5)=C*UM
FN(7)=A*UQ
FN(9)=B*UQ
FN(11)=C*UQ
FN(13)=A*UP
FN(15)=B*UP
FN(17)=C*UP
FN(2)=AA*UM
FN(4)=BB*UM
FN(6)=CC*UM
FN(8)=AA*UQ
FN(10)=BB*UQ
FN(12)=CC*UQ
FN(14)=AA*UP
FN(16)=BB*UP
FN(18)=CC*UP
END

SUBROUTINE FD618 (A2, B2, C2, A, B, C, AA, BB, CC, U, UM, UQ, UP,
1          FNDS, FNDT, FNDU)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, C, D, F, R, U)
PARAMETER (R0=0.00, R1=1.00, R2=2.00, RD=0.50)
DIMENSION FNDS(18), FNDT(18), FNDU(18)
AS=R2*A2-R1
BS=R0
CS=R1-R2*C2
AAS=R2*B2
BBS=-AAS
CCS=R2*(C2-A2)
FNDS(1)=AS*UM
FNDS(3)=BS*UM
FNDS(5)=CS*UM
FNDS(7)=AS*UQ
FNDS(9)=BS*UQ
FNDS(11)=CS*UQ
FNDS(13)=AS*UP
FNDS(15)=BS*UP
FNDS(17)=CS*UP
FNDS(2)=AAS*UM

```

```

FNDS (4) =BBS*UM
FNDS (6) =CCS*UM
FNDS (8) =AAS*UQ
FNDS (10) =BBS*UQ
FNDS (12) =CCS*UQ
FNDS (14) =AAS*UP
FNDS (16) =BBS*UP
FNDS (18) =CCS*UP
AT=R0
BT=R2*B2-R1
CT=R1-R2*C2
AAT=R2*A2
BBT=R2*(C2-B2)
CCT=-AAT
FNDDT (1) =AT*UM
FNDDT (3) =BT*UM
FNDDT (5) =CT*UM
FNDDT (7) =AT*UQ
FNDDT (9) =BT*UQ
FNDDT (11) =CT*UQ
FNDDT (13) =AT*UP
FNDDT (15) =BT*UP
FNDDT (17) =CT*UP
FNDDT (2) =AAT*UM
FNDDT (4) =BBT*UM
FNDDT (6) =CCT*UM
FNDDT (8) =AAT*UQ
FNDDT (10) =BBT*UQ
FNDDT (12) =CCT*UQ
FNDDT (14) =AAT*UP
FNDDT (16) =BBT*UP
FNDDT (18) =CCT*UP
DUM=U-RD
DUP=U+RD
DUQ=-U-U
FNDDU (1) =A*DUM
FNDDU (3) =B*DUM
FNDDU (5) =C*DUM
FNDDU (7) =A*DUQ
FNDDU (9) =B*DUQ
FNDDU (11) =C*DUQ
FNDDU (13) =A*DUP
FNDDU (15) =B*DUP
FNDDU (17) =C*DUP
FNDDU (2) =AA*DUM
FNDDU (4) =BB*DUM
FNDDU (6) =CC*DUM
FNDDU (8) =AA*DUQ
FNDDU (10) =BB*DUQ
FNDDU (12) =CC*DUQ
FNDDU (14) =AA*DUP
FNDDU (16) =BB*DUP
FNDDU (18) =CC*DUP
END

```

```

SUBROUTINE FN820 (SM, SP, SQ, TM, TP, TQ, UM, UP, UQ, A1, A2, A3, A4, FN)
IMPLICIT REAL*8 (A, F, S, T, U)
DIMENSION FN(20)
FN(2) =SQ*TM*UM
FN(4) =TQ*SP*UM

```

```

FN(6)=SQ*TP*UM
FN(8)=TQ*SM*UM
FN(9)=UQ*A1
FN(10)=UQ*A2
FN(11)=UQ*A3
FN(12)=UQ*A4
FN(14)=SQ*TM*UP
FN(16)=TQ*SP*UP
FN(18)=SQ*TP*UP
FN(20)=TQ*SM*UP
FN(1)=A1*UM-0.5*(FN(2)+FN(8)+FN(9))
FN(3)=A2*UM-0.5*(FN(4)+FN(2)+FN(10))
FN(5)=A3*UM-0.5*(FN(6)+FN(4)+FN(11))
FN(7)=A4*UM-0.5*(FN(8)+FN(6)+FN(12))
FN(13)=A1*UP-0.5*(FN(14)+FN(20)+FN(9))
FN(15)=A2*UP-0.5*(FN(16)+FN(14)+FN(10))
FN(17)=A3*UP-0.5*(FN(18)+FN(16)+FN(11))
FN(19)=A4*UP-0.5*(FN(20)+FN(18)+FN(12))
END

SUBROUTINE DS820(TM,TP,TQ,UM,UP,UQ,S,FNDS)
IMPLICIT REAL*8 (D,F,S,T,U)
DIMENSION FNDS(20)
DATA DSM,DSP/-0.5,0.5/
DSQ=-S-S
DSA=DSM*TM
DSB=-DSA
DSC=DSP*TP
DSD=-DSC
FNDS(2)=DSQ*TM*UM
FNDS(4)=DSP*TQ*UM
FNDS(6)=DSQ*TP*UM
FNDS(8)=DSM*TQ*UM
FNDS(9)=UQ*DSA
FNDS(10)=UQ*DSB
FNDS(11)=UQ*DSC
FNDS(12)=UQ*DSD
FNDS(14)=DSQ*TM*UP
FNDS(16)=DSP*TQ*UP
FNDS(18)=DSQ*TP*UP
FNDS(20)=DSM*TQ*UP
FNDS(1)=DSA*UM-0.5*(FNDS(2)+FNDS(8)+FNDS(9))
FNDS(3)=DSB*UM-0.5*(FNDS(4)+FNDS(2)+FNDS(10))
FNDS(5)=DSC*UM-0.5*(FNDS(6)+FNDS(4)+FNDS(11))
FNDS(7)=DSD*UM-0.5*(FNDS(8)+FNDS(6)+FNDS(12))
FNDS(13)=DSA*UP-0.5*(FNDS(14)+FNDS(20)+FNDS(9))
FNDS(15)=DSB*UP-0.5*(FNDS(16)+FNDS(14)+FNDS(10))
FNDS(17)=DSC*UP-0.5*(FNDS(18)+FNDS(16)+FNDS(11))
FNDS(19)=DSD*UP-0.5*(FNDS(20)+FNDS(18)+FNDS(12))
END

SUBROUTINE DT820(SM,SP,SQ,UM,UP,UQ,T,FNDT)
IMPLICIT REAL*8 (D,F,S,T,U)
DIMENSION FNDT(20)
DATA DTM,DTP/-0.5,0.5/
DTQ=-T-T
DTA=SM*DTM
DTB=SP*DTM
DTC=SP*DTP
DTD=SM*DTP

```

```

FNDT (2)=SQ*DTM*UM
FNDT (4)=SP*DTQ*UM
FNDT (6)=SQ*DTP*UM
FNDT (8)=SM*DTQ*UM
FNDT (9)=UQ*DTA
FNDT (10)=UQ*DTB
FNDT (11)=UQ*DTC
FNDT (12)=UQ*DTD
FNDT (14)=SQ*DTM*UP
FNDT (16)=SP*DTQ*UP
FNDT (18)=SQ*DTP*UP
FNDT (20)=SM*DTQ*UP
FNDT (1)=DTA*UM-0.5*(FNDT (2)+FNDT (8)+FNDT (9))
FNDT (3)=DTB*UM-0.5*(FNDT (4)+FNDT (2)+FNDT (10))
FNDT (5)=DTC*UM-0.5*(FNDT (6)+FNDT (4)+FNDT (11))
FNDT (7)=DTD*UM-0.5*(FNDT (8)+FNDT (6)+FNDT (12))
FNDT (13)=DTA*UP-0.5*(FNDT (14)+FNDT (20)+FNDT (9))
FNDT (15)=DTB*UP-0.5*(FNDT (16)+FNDT (14)+FNDT (10))
FNDT (17)=DTC*UP-0.5*(FNDT (18)+FNDT (16)+FNDT (11))
FNDT (19)=DTD*UP-0.5*(FNDT (20)+FNDT (18)+FNDT (12))
END

```

```

SUBROUTINE DU820 (SM, SP, SQ, TM, TP, TQ, U, FNDU, A1, A2, A3, A4)
IMPLICIT REAL*8 (A, D, F, S, T, U)
DIMENSION FNDU(20)
DATA DUM, DUP /-0.5, 0.5/
DUQ=-U-U
FNDU (2)=SQ*TM*DUM
FNDU (4)=SP*TQ*DUM
FNDU (6)=SQ*TP*DUM
FNDU (8)=SM*TQ*DUM
FNDU (9)=A1*DUQ
FNDU (10)=A2*DUQ
FNDU (11)=A3*DUQ
FNDU (12)=A4*DUQ
FNDU (14)=SQ*TM*DUP
FNDU (16)=SP*TQ*DUP
FNDU (18)=SQ*TP*DUP
FNDU (20)=SM*TQ*DUP
FNDU (1)=A1*DUM-0.5*(FNDU (2)+FNDU (8)+FNDU (9))
FNDU (3)=A2*DUM-0.5*(FNDU (4)+FNDU (2)+FNDU (10))
FNDU (5)=A3*DUM-0.5*(FNDU (6)+FNDU (4)+FNDU (11))
FNDU (7)=A4*DUM-0.5*(FNDU (8)+FNDU (6)+FNDU (12))
FNDU (13)=A1*DUP-0.5*(FNDU (14)+FNDU (20)+FNDU (9))
FNDU (15)=A2*DUP-0.5*(FNDU (16)+FNDU (14)+FNDU (10))
FNDU (17)=A3*DUP-0.5*(FNDU (18)+FNDU (16)+FNDU (11))
FNDU (19)=A4*DUP-0.5*(FNDU (20)+FNDU (18)+FNDU (12))
END

```

```

SUBROUTINE FN827 (S, T, U, FN, SQ, TQ, UQ)
IMPLICIT REAL*8 (A, B, F, S, T, U)
DIMENSION FN(27), SQ(3), TQ(3), UQ(3), NUM(27)
DATA NUM/1, 2, 3, 8, 9, 4, 7, 6, 5, 10, 11, 12, 17, 18, 13, 16, 15, 14,
119, 20, 21, 26, 27, 22, 25, 24, 23/
A=0.5
B=S*S
SQ (1)=A*(B-S)
SQ (2)=A+A-B
SQ (3)=A*(B+S)
B=T*T

```

```

TQ(1)=A*(B-T)
TQ(2)=A+A-B
TQ(3)=A*(B+T)
B=U*U
UQ(1)=A*(B-U)
UQ(2)=A+A-B
UQ(3)=A*(B+U)
L=0
DO 30 IU=1,3
  UQI=UQ(IU)
  DO 20 IT=1,3
    TQI=TQ(IT)
    DO 10 IS=1,3
      L=L+1
      N=NUM(L)
      FN(N)=UQI*TQI*SQ(IS)
10  CONTINUE
20  CONTINUE
30  CONTINUE
END

```

```

SUBROUTINE FD827(S,T,U,SQ,TQ,UQ,FNDS,FNDT,FNDU)
IMPLICIT REAL*8 (A,D,F,S,T,U)
DIMENSION FNDS(27),FNDT(27),FNDU(27),SQ(3),TQ(3),UQ(3)
DIMENSION DSQ(3),DTQ(3),DUQ(3),NUM(27)
DATA NUM/1,2,3,8,9,4,7,6,5,10,11,12,17,18,13,16,15,14,
119,20,21,26,27,22,25,24,23/
A=0.5
DSQ(1)=S-A
DSQ(2)=-S-S
DSQ(3)=S+A
DTQ(1)=T-A
DTQ(2)=-T-T
DTQ(3)=T+A
DUQ(1)=U-A
DUQ(2)=-U-U
DUQ(3)=U+A
L=0
DO 30 IU=1,3
  UQI=UQ(IU)
  DUQI=DUQ(IU)
  DO 20 IT=1,3
    TQI=TQ(IT)
    DTQI=DTQ(IT)
    DO 10 IS=1,3
      L=L+1
      N=NUM(L)
      FNDS(N)=UQI*TQI*DSQ(IS)
      FNDT(N)=UQI*DTQI*SQ(IS)
      FNDU(N)=DUQI*TQI*SQ(IS)
10  CONTINUE
20  CONTINUE
30  CONTINUE
END

```

B.3 Listing des procédures de commandes VAX et CRAY

B.3.1 Procédure de commandes VAX

a) Procédure de commandes TRANS3.COM

```

$      TYPE SYSS$INPUT
      *****
      *   "TRANS3" - MODELE A ELEMENTS FINIS           *
      * TRANSPORT CONDUCTIF/ADVECTIF PERMANENT OU TRAN- *
      * SITOIRE - TRIDI - DE MASSE OU D'ENERGIE         *
      * CENTRE D'HYDROGEOLOGIE (UNIVERSITE DE NEUCHATEL) *
      *                               VERSION DU 09-04-1989 *
      *****

$      DI:='F$LOGICAL("SYS$DISK") '
$      IF DI .EQS. "SCRATCH:" THEN GOTO A1
$      TYPE SYSS$INPUT
      Pour travailler avec ce programme il faut vous mettre
      sur le disque "SCRATCH" ("VERT"). Les fichiers utilisés
      sont, en effet, assez grands et il n'est pas certain
      qu'il y ait assez de place sur les disques permanents.
      Faites CTRL/C pour arrêter le job si c'est nécessaire.

$A1:
$      INQUIRE SUITE " Presser RETURN pour continuer... "
$      TYPE SYSS$INPUT
      Vous devez donner le nom des fichiers suivants:
      1. Fichier des éléments
      2. Fichier des coordonnées
      3. Fichier des paramètres
      4. Fichier des potentiels
      5. Fichier des conditions initiales
      6. Fichier des résultats

      ATTENTION! Dans le fichier des éléments on lit LM,NQ,NP,KR,NAR
      ou NAR est le nombre d'arêtes dans l'élément!
      Si NAR.GE.0: répétition des noeuds non admise dans l'élément
      Si NAR.LT.0: répétition des noeuds admise (réduction des arêtes).

$A2:
$      INQUIRE FIELM " Nom du fichier des éléments           "
$      EXIST == F$SEARCH(FIELM) .NES. ""
$      IF EXIST THEN GOTO A3
$      TYPE SYSS$INPUT
      Ce fichier n'existe pas! Controlez encore une fois
      le nom, le type et le numéro de version!

$GOTO A2
$A3:
$      INQUIRE FICOR " Nom du fichier des coordonnées         "
$      EXIST == F$SEARCH(FICOR) .NES. ""
$      IF EXIST THEN GOTO A4
$      TYPE SYSS$INPUT
      Ce fichier n'existe pas! Controlez encore une fois
      le nom, le type et le numéro de version!

$GOTO A3
$A4:

```

```

$ INQUIRE FIPAR " Nom du fichier des paramètres          "
$ EXIST == F$SEARCH(FIPAR) .NES. ""
$ IF EXIST THEN GOTO A5
$ TYPE SYS$INPUT
    Ce fichier n'existe pas! Controlez encore une fois
    le nom, le type et le numéro de version!

$GOTO A4
$A5:
$ COPY 'FIELM' FIELM.DAT
$ COPY 'FICOR' FICOR.DAT
$ COPY 'FIPAR' FIPAR.DAT
$ INQUIRE REP " Hydrodynamique ou transport ? [H/T] (def:T) "
$ IF REP .EQS. "H" THEN GOTO A8
$A6:
$ INQUIRE FIPOT " Nom du fichier des potentiels          "
$ EXIST == F$SEARCH(FIPOT) .NES. ""
$ IF EXIST THEN GOTO A7
$ TYPE SYS$INPUT
    Ce fichier n'existe pas! Controlez encore une fois
    le nom, le type et le numéro de version!

$GOTO A6
$A7:
$ COPY 'FIPOT' FIPOT.DAT
$A8:
$ INQUIRE REP " Régime permanent ou transitoire? [P/T] (def:T) "
$ IF REP .EQS. "P" THEN GOTO A11
$   A9:
$     INQUIRE FIINI " Nom du fichier des cond. initiales "
$     EXIST == F$SEARCH(FIINI) .NES. ""
$     IF EXIST THEN GOTO A10
$     TYPE SYS$INPUT
    Ce fichier n'existe pas! Controlez encore une fois
    le nom, le type et le numéro de version!

$   GOTO A9
$   A10:
$     COPY 'FIINI' FIINI.DAT
$A11:
$ INQUIRE FIRES " Nom du fichier des résultats          "
$ REP:='F$LOGICAL("SYS$DISK")' 'F$DIRECTORY()'
$ INQUIRE ANS "EXECUTION INTERACTIVE(I) OU EN BATCH(B) (def:I) "
$ IF ANS .EQS. "B" THEN GOTO A12
$   ASS SCRATCH:'F$DIRECTORY()' SYS$SCRATCH
$   SPAW/NOW/NOTIFY/INPUT=NL:/OUT='REP'TRANS3.SPW -
$   @DISK$GEOL:[SOUMA.COM]TRANS3A 'FIRES' 'REP'
$EXIT
$A12:
$ INQUIRE ANS3 " Durée du Job inférieure a 10 min. ? (O/N) "
$ IF ANS3 .EQS. "O" .OR. ANS3 .EQS. "N" THEN GOTO A13
$GOTO A12
$A13:
$ INQUIRE ANS2 " SIRIUS ALTAIR ou BIG_JOB (S/A/B) "
$ IF ANS2 .EQS. "S" .AND. ANS3 .EQS. "O" THEN GOTO SIFAST
$ IF ANS2 .EQS. "S" .AND. ANS3 .EQS. "N" THEN GOTO SIRIUS
$ IF ANS2 .EQS. "A" .AND. ANS3 .EQS. "O" THEN GOTO ALFAST
$ IF ANS2 .EQS. "A" .AND. ANS3 .EQS. "N" THEN GOTO ALTAIR
$ IF ANS2 .EQS. "B" .AND. ANS3 .EQS. "O" THEN GOTO BIG_JOB
$ IF ANS2 .EQS. "B" .AND. ANS3 .EQS. "N" THEN GOTO BIG_JOB

```



```

$GOTO A11
$$SIFAST:
$ SUBMIT/QUEUE=SIRIUS_FASTBATCH/NOPRINT/NOTIFY/ -
  LOG='REP'TRANS3.BAT -
  /PARAMETERS=('FIRES','REP') -
  DISK$GEOL:[SOUMA.COM]TRANS3A
$EXIT
$$SIRIUS:
$ SUBMIT/QUEUE=BIG_JOB/NOPRINT/NOTIFY/ -
  LOG='REP'TRANS3.BAT -
  /PARAMETERS=('FIRES','REP') -
  DISK$GEOL:[SOUMA.COM]TRANS3A
$EXIT
$$BIG_JOB:
$ SUBMIT/QUEUE=BIG_JOB/NOPRINT/NOTIFY/ -
  LOG='REP'TRANS3.BAT -
  /PARAMETERS=('FIRES','REP') -
  DISK$GEOL:[SOUMA.COM]TRANS3A
$EXIT
$$ALFAST:
$ SUBMIT/QUEUE=ALTAIR_FASTBATCH/NOPRINT/NOTIFY/ -
  LOG='REP'TRANS3.BAT -
  /PARAMETERS=('FIRES','REP') -
  DISK$GEOL:[SOUMA.COM]TRANS3A
$EXIT
$$ALTAIR:
$ SUBMIT/QUEUE=ALTAIR_BATCH/NOPRINT/NOTIFY/ -
  LOG='REP'TRANS3.BAT -
  /PARAMETERS=('FIRES','REP') -
  DISK$GEOL:[SOUMA.COM]TRANS3A
$EXIT

```

b) Procédure de commandes TRANS3A.COM

```

$ ! Cette procédure est appelée par TRANS3.COM qui transmet
$ ! les 2 paramètres: P1=fichier des résultats
$ ! P2=nom du répertoire utilisé
$SET DEF 'P2'
$RUN DISK$GEOL:[SOUMA.PROG]TRANS3
$COPY FIRES.DAT 'P1'
$DELETE FI*.*;*
$EXIT

```

B.3.2 Procédure de commandes CRAY-2

```

#USER=username PW=password
# @$-r TRANS3
# @$-lt 300
# @$
fetch fielm -t'disk$geol:[souma.fe]test.ele'
fetch ficor -t'disk$geol:[souma.fe]test.cor'
fetch fipar -t'disk$geol:[souma.fe]test.par'
fetch fipot -t'disk$geol:[souma.fe]test.pot'
fetch fiini -t'disk$geol:[souma.fe]test.ini'
ln fielm fort.1
ln fipot fort.8
ln ficor fort.2
ln fipar fort.3
ln fires fort.6

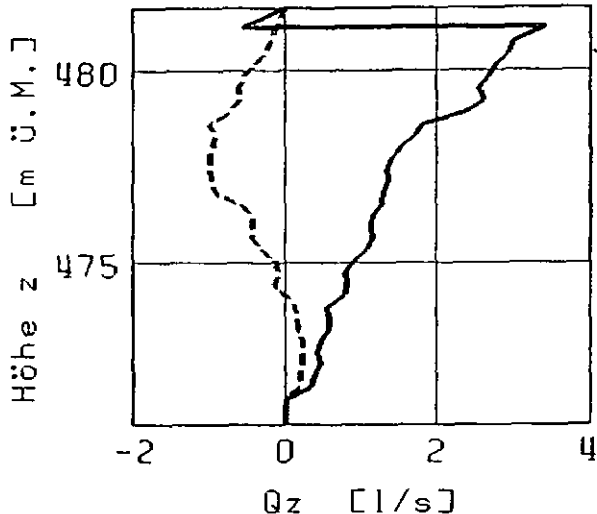
```

```
ln fiini fort.9
cft77 trans3.f
segldr trans3.o
a.out
dispose fires -fCB -t'scratch:[souma]test.res
```


Aufschlussbohrung UB050

Versuch vom 08.10.85
Pumpmenge $Q = 3.98 [l/s]$

Vertikaler Volumenstrom Q_z im
Filterrohr: ohne und mit Pumpen



- c. 5 -

AUFSCHLUSSBOHRUNG UB120

Koordinaten 607603.90 217802.00 (m)
OK Terrain 482.57 (m ü.M.)
Ortsbezeichnung Utzenstorf, Altwidien

Auftraggeber HEA des Kantons Bern
Zweck: Rückgabebrunnen Wasserpumpe

BOHRUNG:
Ausgeführt vom 17.09.85 bis 18.09.85
Bohrfirma Dicht AG Bern
Bohrverfahren Rotationskernbohrung

BOHRLOCH:
Tiefe Durchmess.
(m u.T.) (mm)
6.0 180

GENESE:
Tiefe Genetische Deutung
(m u.T.)
.3 Humus
1.2 Stillwassersediment
6.0 Schotter

FILTERROHR:

Filterrohrtyp Kunststofffilterrohr mit vert. Schlitzung
Bezeichnung Boade
Nennweite 115 (mm)
Schlitzweite 1.0 (mm)
Innendurchmesser 113.0 (mm)
Filterkies 04/08 (mm)
Messpunkthöhe 483.018 (m ü.M.)
OK Lochung 482.02 (m ü.M.)
UK Lochung 477.02 (m ü.M.)
UK Rohr 477.02 (m ü.M.)

KLEINPUMPVERSUCH:

Versuchsdatum 08.10.85 Versuchsleiter: ME OH
Abstieg auf den Ruhewasserspiegel 1.48 (m)
Abstieg auf Sohle im Filterrohr 5.83 (m)
Massgeb. Grundwassermächtigkeit 4.37 (m)
Pumpenfließ 481.02 (m ü.M.)
Pumpentyp: Horizontalachsige Saugpumpe
Speicherkoeffizient S .1200 (-)
Temperatur des Grundwassers 14.5 (°C)

STUFENPUMPVERSUCH:

Stufe	Pump- Beginn (h min)	Pump- Ende (h min)	Förder- Leistung (l/s)	Zeitpunkt der Messung (h min)	Abenkung im Filterrohr (m)
1	14 16	14 20	1.991	14 20	0.020

- c. 7 -

GRUNDWASSERTEMPORATUR UND PFLANZENWACHSTUM UTZENSTORF-ADFLUGEN

BOHRKAMPAGNE 1985

ROTATIONSBOHRUNG UB050

Bohrfirma: Dicht AG, Bern	Station
Bohrverfahren: Rotationskernbohrung	Legt:
Bohrmeister: Gustar	Bohrgerät: URHOG
Ausgeführt vom 20.9. bis 24.9.1985	
Koordinaten: 607603.90/217802.00	OK Terrain: 482.70 m ü.M. OK Rohr: 483.05 m ü.M.
Genet. Aufnahme: Dr. Blee / LGH / Oberholzer	1:50

Bohrungstiefe (m)	Bohrer Ø (mm)	Kernhöhe (mm)	Kernhöhe unterhalb des Filter- rohrs (mm)	Tiefe m ü.M.	Tiefe m ü.M. (Trenn- linie)	Lithologie	Genet. Deutung	Eigenschaften des Grundwasser- leiters	Bemerkungen
482.70				482.70	482.70	Humus, sandig, siltig, braun			Eingebaute Piezometerrohr
482.40	100			482.40	482.40	Silt, sandig, mit verstreuten Geröll- und organischen Resten, geschichtet, braun	Schlitzmess- eröffnung	Gung. m 08.10.1985	Tylo Boade Schlitzweite: 1.0 mm, verstell.
482.00				482.00	482.00	Kies, sandig, leicht siltig, unterge- ordnetes sandig, Steine bis Ø 8 cm, braungrau			
481.00				481.00	481.00	Kies, sandig, vorwiegend sauber, untergeordnet leicht siltig, Steine bis Ø 12 cm, braungrau			
479.50				479.50	479.50	Kies, sandig, leicht siltig, unter- geordnetes sandig, verstreute Steine bis Ø 12 cm, beige-grau			
477.20				477.20	477.20	Kies, sandig, sauber, Steine bis Ø 11 cm, beige-grau	Schotter		
476.40				476.40	476.40	Kies, sandig, leicht siltig bis siltig, mit verstreuten, selten die Reste zahl- reicher Steine bis Ø 15 cm, beige-grau			
475.20				475.20	475.20	Kies, sandig (vorwiegend Grobsand), sauber, mit verstreuten Steinen bis Ø 9 cm, beige-grau			
474.70				474.70	474.70	Kies, grobsandig, leicht siltig, beige-grau			
474.30				474.30	474.30	Kies, sandig, stellenweise stark sandig, sauber, mit zahlreichen Steinen bis Ø 11 cm, grau-beige			
473.80				473.80	473.80	Kies, sandig, leicht siltig, Steine bis Ø 10 cm, beige-grau			
470.90				470.90	470.90	Kies, sandig, siltig bis stark siltig, verstreute Steine bis Ø 9 cm, beige-grau	Überhangs- bohrung		
470.40				470.40	470.40	Kies, stark sandig, stark siltig, gegen die Basis mit verstreuten mergeligen Sandsteinabdrücken, verstreute Steine bis Ø 10 cm, beige-grau	Überhangs- bohrung für Malterie		
469.90				469.90	469.90	Sandstein, mergelig, braun	Malterie		

- c. 6 -

PROFIL- UND BEREICHS-K- WERTE AUFSCHLUSSBOHRUNG UB120

Tiefe z (m ü.M.)	Vertikale Strömung im Filterrohr		Radiale Strömung zum Filterrohr		Absenkung Delta (m)	Bereichs- k-Wert (m/s)	Ruhe- k-Wert spiegel h (m ü.M.)
	Qz(1) (l/s)	Qz(2) (l/s)	Qr(1) (l/s/m)	Qr(2) (l/s/m)			
481.54	.000	.000	.000	.000			
481.02	.000	-.740	.000	1.419	-.0475	26.87	481.540
480.32	.000	.548	.000	1.416	-.0471	27.04	481.540
480.22	.000	.428	.000	.387	-.0539	5.68	481.540
479.92	.000	.404	.000	.081	-.0557	.97	481.540
479.62	.000	.382	.000	.071	-.0557	.84	481.540
479.32	.000	.344	.000	.129	-.0554	1.63	481.540
479.02	.000	.334	.000	.033	-.0559	.35	481.540
478.72	.000	.335	.000	-.005	-.0561	5.30	481.540
478.42	.000	.336	.000	-.004	-.0561	5.30	481.540
478.12	.000	.307	.000	.097	-.0555	1.18	481.540
477.82	.000	.326	.000	-.063	-.0564	5.29	481.540
477.52	.000	.373	.000	-.154	-.0570	5.29	481.540
477.17	.000	.000	.000	1.064	-.0490	19.02	481.540

Profil - Durchlässigkeitswert KP 8.35 (mm/s)
Massgebende Grundwassermächtigkeit H 4.37 (m)
Transmissivität T 3.74 ($10^{-4} m^2/s$)
Grundwasserspiegel im Filterrohr h 481.54 (m ü.M.)
Mittleres Grundwasserpotential Φ 481.54 (m ü.M.)

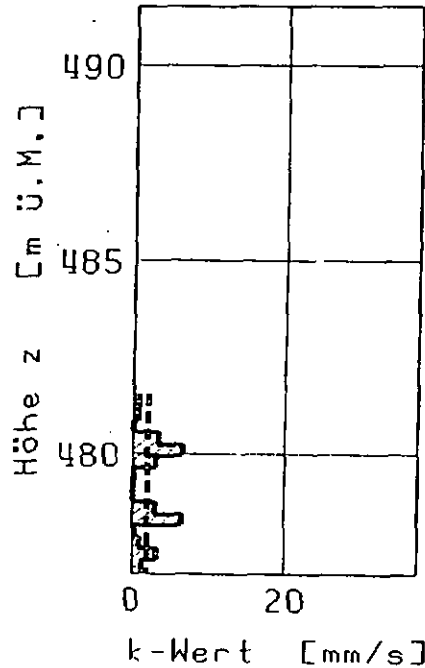
- c. 8 -

Tiefe (m ü.M.)	Vertikale Strömung im Filterrohr		Radiale Strömung zum Filterrohr		Absenkung 0ella (m)	Bereichs- k-Wert (mm/s)	Ruhe- tiefe h (m ü.M.)
	Qz(1) (l/s)	Qz(2) (l/s)	Qr(1) (l/cm)	Qr(2) (l/cm)			
481.53	.000	.000					
481.25	.000	-.045	.000	.161	.1790	.57	481.53
480.85	.000	1.795	.000	.161	.1789	.57	481.53
480.55	.000	1.846	.000	.169	.1807	1.09	481.53
480.25	.000	1.612	.000	.170	.1742	3.40	481.53
479.95	-.325	.888	1.004	2.413	1.665	6.45	481.70
479.65	-.353	.634	.092	.761	.1925	3.01	481.56
479.35	-.356	.643	.011	.654	.1765	1.09	481.53
479.05	-.360	.658	.014	.618	.1765	1.09	481.53
478.75	-.353	.660	.011	.672	.1770	1.09	481.53
478.45	-.244	.570	.096	.787	.1755	3.03	481.39
478.15	-.166	.238	-.262	1.107	.1674	6.62	481.49
477.85	-.160	.224	-.020	.048	.1759	.22	481.44
477.55	-.115	.204	-.150	.064	.1750	.81	481.34
477.25	.000	.108	-.382	.320	.1720	3.08	481.40
476.90	.000	.000	.000	.310	.1744	1.23	481.53

Profil - Durchlässigkeitswert KP 1.91 (mm/s)
 Massgebende Grundwassermächtigkeit H 4.63 (m)
 Transmissivität T .88 (10⁻² m²/s)
 Grundwasserspiegel im Filterrohr h 481.53 (m ü.M.)
 Mittleres Grundwasserpotential ϕ 481.53 (m ü.M.)

Aufschlussbohrung UB150

Versuch vom 08.10.85
 Pumpmenge Q = 1.90 [l/s]
 Durchlässigkeiten: k:
 Bereichs- und Profil- k - Wert



WÄRMENUTZUNG AUS ÖFFENTLICHEN GEWÄSSERN		Wasser- und Energieversorgungsamt des Kantons Bern		Bohle Nr.	
GRUNDWASSTEMPÉRATUR UND PFLANZENWACHSTUM UTZENSTORF-NEFLICH		Bohrfirma: Dicht AG, Bern		Situation:	
BOHRKAMPAGNE 1985		Bohrverfahren: Rotationskernbohrung		Ortsbezeichnung: Utzenstorf, Altwiden	
ROTATIONSKERNBOHRUNG UB150		Bohrmeister: Keller		Bohrgerät: UZ100	
		Ausgeführt von: 18.9.85 bis 18.9.1985		Zweck: WEA des Kantons Bern Rückgabebrunnen Wärmepumpe	
		Koordinaten: 607627/217801 OK Terrain 482.45 m ü.M. OK Rohr 482.75 m ü.M.		BOHRUNG:	
		Geol. Aufnahme: Dr. Blum / Löhli / Oberholzer 1:50		Ausgeführt von: 19.09.85 bis 19.09.85	
				Bohrfirma: Dicht AG Bern	
				Bohrverfahren: Rotationskernbohrung	
				BOHRLOCH:	
				Tiefe (m u.T.): 6.0	
				Durchmesser (mm): 180	
				GENESE:	
				Tiefe (m u.T.): 4	
				Genetische Deutung: Humus	
				1.6 Stillwassersediment	
				6.0 Schotter	
				FILTERROHR:	
				Filterrohrtyp: Kunststofffilterrohr mit vert. Schlitzung	
				Bezeichnung: Boode	
				Nennweite: 115 (mm)	
				Schlitzweite: 1.0 (mm)	
				Innendurchmesser: 115.0 (mm)	
				Filterkies: 04/08 (mm)	
				Messpunkthöhe: 482.885 (m ü.M.)	
				OK Lochung: 481.90 (m ü.M.)	
				UK Lochung: 476.90 (m ü.M.)	
				UK Rohr: 476.90 (m ü.M.)	
				KLEINPUMPVERSUCH:	
				Versuchsdatum: 08.10.85	
				Versuchsleiter: ME 00	
				Abstich auf den Ruhewasserspiegel: 1.36 (m)	
				Abstich auf Sohle im Filterrohr: 5.85 (m)	
				Massgeb. Grundwassermächtigkeit: 4.49 (m)	
				Pumpenselher: 480.98 (m ü.M.)	
				Pumpentyp: Horizontalachsige Saugpumpe	
				Speicherkoefizient S: .1200 (-)	
				Temperatur des Grundwassers: 14.2 (°C)	
				STUFENPUMPVERSUCH:	
				Stufe	
				Pump-Region	
				Pump-Ende	
				Förder- Leistung	
				Zeitpunkt der Messung	
				Absenkung im Filterrohr	
				(m)	
				1	
				15.50	
				16.10	
				1.904	
				16.10	
				.0760	

AUFSCHLUSSBOHRUNG UB180

Koordinaten 607639.90 217800.20 (m)
 OK Terrain 482.50 (m ü.M.)
 Ortsbezeichnung Utzenstorf, Altwiden

Auftraggeber WEA des Kantons Bern
 Zweck: Rückgabebrunnen Wärmepumpe

BOHRUNG:
 Ausgeführt von 19.09.85 bis 19.09.85
 Bohrfirma Dicht AG Bern
 Bohrverfahren Rotationskernbohrung

BOHRLOCH:
 Tiefe (m u.T.) 6.0
 Durchmesser (mm) 180

GENESE:
 Tiefe (m u.T.) 4
 Genetische Deutung: Humus
 1.6 Stillwassersediment
 6.0 Schotter

FILTERROHR:
 Filterrohrtyp Kunststofffilterrohr mit vert. Schlitzung
 Bezeichnung Boode
 Nennweite 115 (mm)
 Schlitzweite 1.0 (mm)
 Innendurchmesser 115.0 (mm)
 Filterkies 04/08 (mm)
 Messpunkthöhe 482.885 (m ü.M.)
 OK Lochung 481.90 (m ü.M.)
 UK Lochung 476.90 (m ü.M.)
 UK Rohr 476.90 (m ü.M.)

KLEINPUMPVERSUCH:
 Versuchsdatum: 08.10.85 Versuchsleiter: ME 00
 Abstich auf den Ruhewasserspiegel: 1.36 (m)
 Abstich auf Sohle im Filterrohr: 5.85 (m)
 Massgeb. Grundwassermächtigkeit: 4.49 (m)
 Pumpenselher: 480.98 (m ü.M.)
 Pumpentyp: Horizontalachsige Saugpumpe
 Speicherkoefizient S: .1200 (-)
 Temperatur des Grundwassers: 14.2 (°C)

STUFENPUMPVERSUCH:

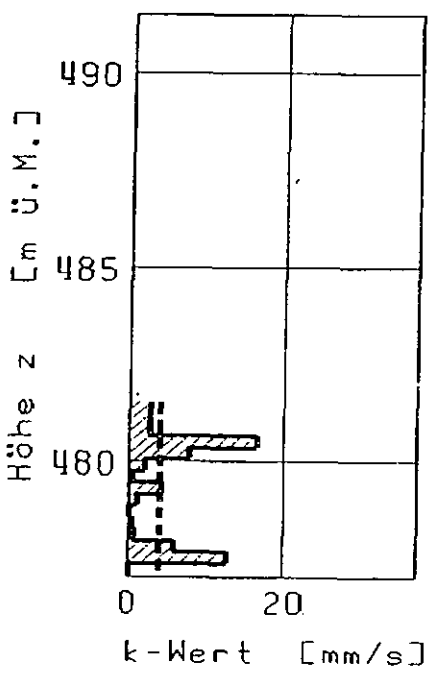
Stufe	Pump-Region (h min)	Pump-Ende (h min)	Förder- Leistung (l/s)	Zeitpunkt der Messung (h min)	Absenkung im Filterrohr (m)
1	15.50	16.10	1.904	16.10	.0760

Aufschlussbohrung UB180

Versuch vom 08.10.85
 Pumpmenge Q = 1.90 [l/s]
 Durchlässigkeiten k:
 Bereichs- und Profil- k - Wert

Tiefe z [m ü.M.]	Vertikale Strömung Im Filterrohr Qz(1) [l/s]	Vertikale Strömung Qz(2) [l/s]	Radiäre Strömung zum Filterrohr Qr(1) [l/sm]	Radiäre Strömung Qr(2) [l/sm]	Absenkung Delta [m]	Bereichs- k - Wert KB [mm/s]	Ruhe- spiege h [m ü.M.]
481.52	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	481.52
480.90	0.000	-0.184	0.000	0.343	0.0939	2.73	481.51
480.68	0.000	0.619	0.000	0.342	0.0938	2.73	481.51
480.38	-0.395	0.768	1.318	2.837	0.0808	16.49	481.60
480.08	-0.471	0.440	0.252	1.091	0.0875	7.90	481.55
479.78	-0.461	0.370	-0.033	0.235	0.0914	2.14	481.50
479.48	-0.454	0.355	-0.025	0.049	0.0925	1.50	481.46
479.18	-0.375	0.289	-0.262	0.222	0.0900	1.19	481.45
478.88	-0.386	0.234	0.035	0.183	0.0921	1.10	481.55
478.58	-0.382	0.234	-0.012	0.001	0.0929	1.18	481.51
478.28	-0.377	0.218	-0.017	0.053	0.0925	1.48	481.48
477.98	-0.351	0.219	-0.085	0.002	0.0924	1.57	481.37
477.68	-0.200	0.175	-0.506	0.146	0.0890	5.89	481.42
477.38	0.000	0.000	-0.666	0.583	0.0851	12.58	481.40
477.03	0.000	0.000	0.000	0.000	0.0930	1.15	481.51

Profil - Durchlässigkeitswert kP 3.98 [mm/s]
 massgebende Grundwassermächtigkeit H 4.49 [m]
 Transmissivität T 1.79 [10⁻² m²/s]
 Grundwasserspiegel im Filterrohr h 481.52 [m ü.M.]
 mittleres Grundwasserpotential ϕ 481.52 [m ü.M.]



KERNENTZUG AUS ÖFFENTLICHEN GEWÄSSERN GRUNDWASSERTEMPORATUR UND PFLANZENWACHSTUM UTZENSTORF-AEFLIGEN DURCHFÜHRUNG 1985 STATIONSKERNBOHRUNG UB180	Wasser- und Energiewirtschaftsamt des Kantons Bern	Anlage Nr.
	Behelfsname: Dickt AG, Bern	Situation:
	Bohrverfahren: Rotationsbohrung	Lage:
	Bohrmaster: Keller	Bohrgerät: DRINEG
ausgeführt am 19.1.1985	Koordinaten: 607640/217800 OK Terrain 482.50 m ü.M. OK Rohr 482.08 m ü.M.	Geol. Aufnahme: Dr. Biss / LBHM / Oberholzer
		1:50

Tiefe z [m ü.M.]	Tiefe nach OK Terrain [m ü.M.]	Lithologie	USCS		Eigenschaften des Grundwasserleiters k in m/s	Bemerkungen
			Stein	Locke		
482.50	0.00	Humus, leicht siltig, mit verstreuten Steinen bis Ø 7 cm, braun				Eingebohrte Piezometerrohr Typ Booge Schlitzweite: 1.0 mm vertikal
482.10	0.40	Feldsand, leicht siltig bis siltig, mit verstreuten Geröll bis Ø 3 cm, organische Reste, braun-beige				
480.90	1.60	Kies, sandig, siltig, mit Steinen bis Ø 10 cm, grau-beige				kP = 6,0 · 10 ⁻²
180.50	2.00	Kies, sandig, leicht siltig, mit zahlreichem Steinen bis Ø 11 cm, beige-grau				
479.60	2.90	Kies, sandig, sauber, untergeordnet leicht siltig, braun-beige				
478.50	4.00	Kies, sandig, leicht siltig, mit zahlreichem Steinen bis Ø 10 cm, grau-beige				
477.20	5.30	Stein- oder Blocklage, grau				
476.90	5.60	Kies, stark sandig, leicht siltig, mit Steinen bis Ø 10 cm, beige				
476.50	6.00					

- Abriola, L.M., Pinder, G.F., 1981. Calculation of velocity in three space dimensions from Hydraulic Head measurements.
- Ackerer, P., 1985. Propagation d'un fluide miscible en aquifère poreux saturé en eau. Prise en compte et localisation des hétérogénéités par des outils théoriques et expérimentaux. Thèse. Université Louis Pasteur. Strasbourg.
- Bachmat, Y., Bear, J., 1983. The dispersive flux in transport phenomena in porous media. *Advances in water resources*. Vol. 6 No 3. CML publication, Pinder Brebbia.
- Bachmat, Y., Bear, J., 1986. Macroscopique modelling of phenomena in porous media. *Transport in porous media*, 1, 3.
- Bear, J., 1969. Hydrodynamic dispersion in flow through porous media. R.J.M. de Wiest. Academic Press.
- Bear, J., 1979. *Hydraulics of groundwater*. Mc Graw-Hill series in water resources and environmental engineering. Advanced Book program.
- Bear, J., Verruijt, A., 1987. Modelling groundwater flow and pollution. Theory and application of transport in porous media. D. Reidel Publishing company.
- Bear, J., Zaslavsky, D., Irmay, S., 1968. Physical principles of water percolation and seepage. *Arid zone research*. Unesco.
- Berkowitz, B., Bachmat, Y., 1988. A scale-dependant equation for solute transport in porous media. *Transport in porous media*, 3, 2.
- Bibby, R., 1979. A numerical model of contamination by mine drainage water of the chalk aquifer, Tilmanstone, Kent. Water research center.
- Blau, R.V., Projektleitung, et al., 1987. Natuerlicher und kuenstlicher waerme-Eintrag. Auswirkungen auf den Grundwasserhaushalt im Testgebiet Kirchberg. Nationales Forschungsprogramm Wasserhaushalt. Wasser-und Energiewirtschaftsamt des Kantons Bern (WEA), 4 vol.
- Bluepack 3-D, 1982. User guide. Ecole nationale supérieure des mines de Paris.
- Bonnet, M., 1978. Méthodologie des modèles de simulation en hydrogéologie. Thèse. Institut de Lorraine. BRGM, 78 SGN 655 Hyd.
- Boonstra, J., Ridder, N.A. de, 1981. Numerical modelling of groundwater bassins. International institute for Land Reclamation and Improvement (ILRI) publication 29, Netherlands.
- Bouzelboudjen, M., 1987. Hydrogéologie et bilan de la nappe d'El Amra-El Abadia par modèles mathématiques (bassin du moyen Cheliff, Algérie). Thèse de Doct. Ing. Université Franche-Comté (France).
- Bovet, D., Cotton, L., Menjot, A., Recordon, E., 1976. Recherches expérimentales sur les propriétés thermiques et hydrauliques des sols. *Bull. soc. Vaud., Sc. Nat.*, No. 350, vol. 73.
- Bovet, J., de los Cobos, G., Gaillard, G., 1988. Le LPM (langage de programmation matriciel), un outil informatique spécialement adapté à la résolution de problèmes par la méthode des éléments finis. EPFL. IGR. Milieu non saturé : transfert et comportement.
- Burnett, R.D., Frind, E.O., 1987. Simulation of contaminant transport in three dimensions. The alternating direction Galerkin technique. *Water resources research*, 23, 4.
- Cameron, R.D., Klute, A., 1977. Convective-dispersive solute transport with a combined equilibrium and kinetic adsorption model. *Water resources research*, 13. Washington.
- Castany, G., 1967. *Traité pratique des eaux souterraines*. Dunod.
- Castany, G., 1968. *Prospection et exploitation des eaux souterraines*. Dunod.
- Castany, G., 1982. *Principes et méthodes de l'hydrogéologie*. Dunod université.
- Chappa, S., Canale, R.P., 1985. Numerical methods for engineers; with personal computer application.
- Cherry, J.A., Gillham, R.W., Pickens, J.F., 1975. Contaminant hydrogeology, 1. Physical processes. Geosci. Canada.
- Chow, 1964. *Handbook of applied hydrology*. Mc Graw Hill.
- Cuvelier, C., Descloux, J., Rappaz, J., Stuart, C., Zwahlen, B., 1988. *Eléments d'équations aux dérivées partielles pour ingénieurs*. Lausanne. Presses polytechniques romandes.

- Dagan, G., 1971. Perturbation solutions of the dispersion equation in porous medium. Water resources research, 7.
- Dagan, G., 1972. Some aspects of heat and mass transfert in porous media. In : Fundamentals of transport phenomena in porous media. Elsevier.
- Davis, De Wiest, R.J.M., 1966. Hydrogeology. J. Wiley and Sons.
- De Wiest, R.J.M., 1969. Flow through porous media. Academic Press.
- Delhomme, J.P., 1978. Kriging in the hydrosciences. Advances in water resources. 1 (5).
- Delhomme, J.P., 1979. Spatial variability and uncertainty in groundwater flow parameters : a geostatistical approach. Water resources research, 15 (2).
- Desai, C.S., Abel, J.F., 1972. Introduction to finite element method. Van Nostrand Reinhold, London.
- Descloux, J., 1973. Méthode des éléments finis. EPFL.
- Dhatt, G., Touzot, G., 1987. une représentation de la méthode des éléments finis. Les presses de l'université de Laval. Maloigne S.A.
- Dieulin, A., 1980. Propagation de pollution dans un aquifère alluvial. L'effet de parcours. Thèse. Ecole nationale supérieure des mines de Paris.
- Dieulin, A., Matheron, G., de Marsily, G., 1981. Growth of the dispersion coefficient with the mean travelled distance in porous media. The science of the total environment, 21. Amsterdam.
- Eldor, M., Dagan, G., 1972. solutions for hydrodynamic dispersion in porous media. Water resources research, 8. Washington.
- Engesgaard, P., Christensen, Th.H., 1988. A review of chemical solute transport models. Nordic hydrology, 19.
- EPRI, 1985. A review of field-scale physical solute transport processes in saturated and unsaturated porous media. Electric power research institute EA-4190 Project 2485. Tennessee.
- Fetter, C.W.Jr, 1980. Applied hydrogeology. Merrill.
- Freeze, A.R., Cherry, J.A., 1979. Groundwater. Prentice Hall.
- Fried, J.J., 1975. Pollution due aux fluides miscibles : pollutions miscibles des nappes souterraines. réunion internationale AIRH/SIA sur les nappes souterraines. E.P.F.Zurich.
- Fried, J.J., 1975. Groundwater pollution. Theory, methodology, modelling and practical rules. Elsevier. Scient. publ. Amsterdam. Developments in water sc. 4.
- Fried, J.J., Combarous, M.A., 1971. Dispersion in porous media. Advanced in hydroscience, vol. 7. Academic Press.
- Fried, J.J., Muntzer, P., Zilliox, L., 1979. Groundwater pollution by transfer of oil hydrocarbons. Groundwater, 17, 6.
- Fried, J.J., Zilliox, L., 1977. Contamination d'une nappe phréatique par des saumures. Exemple de l'aquifère alsacien. Gaz/Eaux/Eaux usées, 57 JG, 9.
- Gallagher, Oden, Taylor, Zienkiewicz, 1975. Finite elements in fluids. Vol. 1. A Wiley-Interscience publication. J. Wiley and Sons.
- Gambolati, G., Galeati, G., 1987. On the finite element integration of the dispersive-convection equation. Congrès Amsterdam, octobre 1987.
- Gastinel, N., 1970. Mathématiques pour l'informatique. Tome 2 : Equations différentielles. Collection U. Armand Collin.
- Genuchten, M.T. Van, 1980. Determining transport parameters from solute displacement experiments. U.S. salinity labor. Res. Rep. No 118. Riverside.
- Genuchten, M.T. Van, Davidson, J.M., Wierenga, P.J., 1974. An evaluation of kinetic and equilibrium equations for prediction of pesticide movement through porous media. Soil soc. amer. proc., 38.
- Goblet, P., 1981. Thèse.
- Gribben, R.J., 1975. Elementary partial differential equations. Van Nostrand Reinhold company.
- Gruber, R., Rappaz, J., 1985. Finite element methods in linear ideal magneto-hydrodynamics. Springer serie in computational physics.
- Hubbert, M.K., 1940. The theory of ground water motion, journal geology, 48.
- Hubbert, M.K., 1957. Darcy law and the field equation of flow of underground fluids. Bull. A.J.H.S., No 5.

- Hughes, T.J.R., Brooks, A., 1982. A theoretical framework for Petrov-Galerkin methods with discontinuous weighting functions : application to streamline upwind procedure. Finite elements in fluids, vol. 4. R.H. Gallagher (ed.) , J. Wiley and Sons.
- Hughes, T.J.R., Brooks, A., 1983. A multidimensional upwind Scheme with no crossing diffusion. Division of engineering and applied science, California Institute of Technologie (Caltec), Pasadena.
- Hussain, M., 1978. Méthode des éléments finis. EPFL. GC. 3e cycle.
- Huyakorn, P.S., 1984. Techniques for making finite elements competitive in modelling three-dimensional flow and transport.
- Huyakorn, P.S., Lester, B.H., Mercer, J.W., 1983. An efficient finite element technique for modelling transport in fractured porous media, 1. Single species transport. Water resources research, 19 (3). Washington.
- Huyakorn, P.S., Pinder, G.F., 1983. Computational methods in subsurface flow. Academic Press.
- Hwang, J.C., Chen, C.-J., Sheikholeslami, M., Panigrahi, B.K., 1985. Finite analytic numerical solution for two-dimensional groundwater solute transport. Water resources research, 21, 9.
- IAHR, 1972. Fundamentals of transport phenomena in porous media. Development in soil science 2. Elsevier.
- Intera environmental consultants, Inc., 1983. Swent : a three dimensional finite difference code for the simulation of waste, energy and nuclide transport, ONWI-457 (office of nuclear waste isolation), Columbus, OH.
- Irons, B.M., 1970. A frontal solution program for finite element analysis. International journal for numerical methods in engineering. Vol. 2 (5).
- Irons, B.M., 1970. A frontal solution for finite element analysis. Int. Journ. Num. Meth. Eng., vol 2.
- Javandel, I., Doughty, C., Tsang, C.F., 1984. Groundwater transport : Handbook of mathematical models. American geophysical union. Water resources monograph series, 10. Washington, DC.
- Kimmeier, F., Wacker, C., Perrochet, P., Hufschmid, P., Kiraly, L., 1986. Code verification of the groundwater flow model FEM301. Hydrocoin level 1, case 2 and case 6. Technical report, NTB86-22. Cédra.
- Kinzelbach, W., 1986. Groundwater modelling. An introduction with sample programs in basic. Developments in water science. Elsevier.
- Kiraly, L., 1978. La notion d'unité hydrogéologique. Essai de définition. Thèse. Uni Neuchâtel.
- Kiraly, L., 1979. Remarques sur la simulation des failles et du réseau karstique par éléments finis dans les modèles d'écoulement. Bull. du centre d'hydrogéologie Uni Neuchâtel, No 3.
- Kiraly, L., 1985. FEM301-A three dimensional model for groundwater flow simulation. Technical report NTB84-49. Cédra.
- Kiraly, L., Müller, I., 1979. Hétérogénéité de la perméabilité et de l'alimentation dans le karst : effet sur la variation du chimisme des sources karstiques. Bull. du centre d'hydrogéologie de Neuchâtel, No 3. Fonds national.
- Lipidus, L., Pinder, G., 1982. Numerical solution of partial differential equations in science and engineering.
- Lateltin, O., Souma, G.A.R., Thierin, J., 1983. Etude hydrogéologique de la plaine de l'Orbe : campagne de mesure et analyse de quelques paramètres physico-chimiques des sources recensées. Cours post-grade d'hydrogéologie.
- Legras, J., 1971. Méthodes et techniques de l'analyse numérique. Vol 1, 2 et 3. Dunod.
- Lewis, R.W., Johnson, J.A., Smith, W.R., 1983. Numerical methods in thermal problems. Proceedings of the third international conference held in Seattle. USA.
- Lignelet, P., 1985. FORTRAN 77. Langage FORTRAN V. 3e éd. Masson.
- Lignelet, P., 1985. La pratique du FORTRAN 77. 2e éd. Masson.
- Mania, J., 1978. Gestion des systèmes aquifères. Application au Nord de la France. Société géologique du Nord. Mémoires tome XV.

- Mariño, M.A., 1974. Models of dispersive in a granular medium. J. of hydrol., 23.
- Mariño, M.A., 1981. Analysis of the transient movement of water and solutes in stream-aquifère system. J. of hydrol. 49 (1/2).
- Marsily, G. de, 1981. Hydrogéologie quantitative. Collection Sciences de la terre. Masson.
- Mercado, A., 1977. The use of models in groundwater quality management, groundwater quality measurement, prediction and protection. Proc. of the WCR. Conf. reading.
- Mermoud, A., 1982. Contribution à l'étude des transferts simultanés d'eau et de soluté en milieux poreux. Thèse No 432. Lausanne E.P.F.L., IGR 160.
- Musy, A., 1974. Contribution à l'étude par simulation des écoulements souterrains en milieu poreux. Thèse E.P.F.L.
- Peck, A., Gorelick, S., de Marsily, G., Foster, S., Kovalevsky, V., 1988. Consequences of spatial variability in aquifer properties and data limitations for groundwater modelling practice. IAHS publication No 175.
- Pinder, G.F., Gray, W.G., 1977. Finite element simulation in surface and sub-surface hydrology. Academic press.
- Rapports scientifiques et techniques sur le comportement des nappes souterraines, 1977. Groupe d'étude sur le comportement thermique des nappes souterraines. Inst. product. energie EPFL, Lab. geotechn. EPFL, C. hydro. Neuchâtel, et al.
- Raviart, P.-A., 1979. Finite element approximation of the Navier-Stokes equations. Berlin Springer.
- Raviart, P.-A., 1981. Les méthodes d'éléments finis en mécanique des fluides. Eyrolles.
- Raviart, P.-A., 1983. Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles. Masson.
- Richtmyer, R.D., Morton, K.W., 1967. Difference methods for initial-value problems. Interscience tracts in pure and applied mathematics. No 4. J. Wiley and sons. 2nd ed.
- Rieu, M., 1983. Simulation numérique des flux hydriques et prédiction de la salinité des sols. Orstom.
- Roache, P.J., 1972. Computational fluid dynamics. Aerodynamics Research department, Sandia laboratories, Albuquerque, New Mexico. Hermosa publishers.
- Rodier, J., 1984. L'analyse de l'eau. Dunod technique. 7e éd.
- Sauty, J.P., 1981. Du comportement thermique des réservoirs aquifères exploitées pour le stockage d'eau chaude ou la géothermie à base enthalpie. Thèse. Institut national polytechnique de Grenoble.
- Scheid, F., 1968. Numerical analysis. Mc Graw Hill.
- Schwarz, H.R., 1980. Methode der finiten elemente. B.G. Teubner, Stuttgart.
- Sène, A., 1982. Recharge artificielle et modèle d'étude des systèmes aquifères. Projet de maîtrise en ingénierie hydraulique. Ecole polytechnique de Montréal.
- Souma, G.A.R., 1983. Utilisation de la télédétection en hydrogéologie. Exposé de séminaire, Chyn.
- Strohmeier, A., 1984. FORTRAN 77. Approche systématique illustrée d'exemples. 2e éd. Eyrolles.
- Stroud, A.H., 1971. Approximate calculation of multiple integrals. Englewood Cliffs : Prentice Hall.
- Thomasset, F., 1981. Implementation of finite element methods for Navier-Stokes equations. Springer series in computational physics.
- Todd, D.K., 1972. Ground water studies. Unesco.
- Todd, D.K., 1976. Groundwater hydrology. John Wiley, 2e éd.
- UNIRAS (Unimap, Uniedit, Raspack), 1982. Users manual. European software contractors.
- Van Rooy, D., 1987. An evaluation of the importance of transmissivity, Head and concentration data for contaminant transport modelling. Nordic hydrology, 18.

- Wang, H., Anderson, M.P., 1982. Introduction to groundwater modelling. Finite difference and finite element methods. W.H. Freeman. San francisco.
- Wang, M.-S., Cheng, R.T.-S., 1975. A study of convective-dispersion equation by isoparametric finite elements. J. of hydrology, 24, 1/2.
- Wang, S.Y., Alonso, C.V., Brebbia, C.A., Gray, W.G., Pinder, G.F., 1980. Finite elements in water resources : proceedings of the 3rd international conference, Univ. of Mississippi, may 19-23, 1980.
- Wen-Sen Chu, Strecker, E.W., Lettenmaier, D.P., 1987. An evaluation of data requirements for groundwater contaminant. Transport modelling. Water resources research, 23, 3.
- Werner, A., 1987. Grundwasser temperatur und Pflanzenwachstum Utzenstorf-Aefligen. Fachbereich Hydrogeologie. Kurzbericht 1. Zwischenseminar 27.1.87. Wasser-und Energiewirtschaftsamt des Kantons Bern.
- Wheatcraft, S.W., Tyler, S.W., 1988. An exporation of scale dependant dispersivity in heterogeneous aquifers using concepts of fractal geometry. Water resources research, 24, 4.
- Zienkiewicz, O.C., 1979. La méthode des éléments finis. 3e éd. Traduit de l'anglais par Armand, J.L., Mc Graw hill.