

REMARQUES SUR LA SIMULATION DES FAILLES ET DU RESEAU
KARSTIQUE PAR ELEMENTS FINIS DANS LES MODELES
D'ECOULEMENT

par Laszlo KIRALY *

FONDS NATIONAL SUISSE
DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

PROGRAMME NATIONAL DE RECHERCHE
CYCLE DE L'EAU

Etude des caractéristiques structurales et hydrodynamiques
des aquifères karstiques
par leurs réponses naturelles et provoquées

(Requête N° 4 018 0 76 02)

Publication N° **3**.....

REMARQUES SUR LA SIMULATION DES FAILLES ET DU RESEAU
KARSTIQUE PAR ELEMENTS FINIS DANS LES MODELES
D'ECOULEMENT

par Laszlo KIRALY *

Résumé

Dans les modèles d'écoulement à éléments finis la simulation des failles ou du réseau karstique peut se faire à l'aide d'éléments bidimensionnels ou unidimensionnels plongés dans l'espace tridimensionnel ordinaire. Pour calculer les matrices élémentaires, en particulier la matrice des gradients, d'une façon relativement simple, on propose l'utilisation du tenseur métrique. Quelques exemples simples montrent que les résultats de tels modèles sont acceptables pour autant que la variation des courbures reste faible sur les éléments.

* Centre d'Hydrogéologie de l'Université de
Neuchâtel, Rue Emile-Argand 11, 2000 Neuchâtel 7

1. INTRODUCTION

La modélisation des aquifères fissurés et karstifiés exige presque toujours la simulation de zones de drainage très perméables telles que les failles recoupant plusieurs formations ou le réseau karstique ramifié. L'épaisseur (ou le diamètre) de ces zones très perméables étant négligeable par rapport à leur extension latérale (ou leur longueur) à l'échelle du bassin hydrogéologique, on doit les simuler soit par des éléments unidimensionnels (réseau karstique), soit par des éléments bidimensionnels (failles, décrochements) plongés dans l'espace tridimensionnel habituel. Si nous admettons que dans ces zones très perméables les gradients hydrauliques n'ont pas de composantes appréciables perpendiculairement aux "tuyaux" ou aux "feuilles" qui les simulent, nous pouvons calculer les matrices élémentaires d'une manière relativement simple pour chaque élément isoparamétrique unidimensionnel ou bidimensionnel plongés dans l'espace tridimensionnel.

L'allègement des calculs par rapport aux méthodes habituellement proposées dans les manuels sur les éléments finis provient du fait que les problèmes d'écoulement souterrain sont plus simples que les problèmes de déformation des coques ou des barres pour lesquels les ingénieurs ont originellement développé ces méthodes (voir par exemple ZIENKIEWICZ, 1971).

2. Définition du problème

Le principe des modèles à éléments finis est décrit en détail dans les traités (ZIENKIEWICZ, 1971); B.R.G.M., 1973; DESAI, 1974; etc.) et nous le supposons connu. Mentionnons seulement que l'équation générale valable pour les écoulements laminaires en milieu saturé

$$S \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^i} \left(K^{ij} \frac{\partial \varphi}{\partial x^j} \right) + q = 0$$

peut être intégrée sur chaque élément fini pour donner un système d'équations linéaires du type

$$D_{mn} \frac{\partial \varphi^n}{\partial t} + A_{mn} \varphi^n + Q_m = 0$$

que l'on peut résoudre pour trouver les potentiels φ^n ou les débits Q_m à chaque noeud des éléments. La matrice des porosités D_{mn} et la matrice des perméabilités A_{mn} se calculent par

$$D_{mn} = S \int_R N_m N_n dR \quad \text{et} \quad A_{mn} = \int_R \frac{\partial N_m}{\partial x^i} K^{ij} \frac{\partial N_n}{\partial x^j} dR$$

où S est la porosité et K^{ij} est le tenseur de perméabilité. Les $N_n(s^k)$ sont des fonctions d'interpolation dépendant des coordonnées "locales" curvilignes s^k et permettent l'utilisation des "valeurs nodales" pour définir des fonctions continues sur l'élément :

$$x^i(s^k) = N_n x^{in} \quad \text{et} \quad \varphi(s^k) = N_n \varphi^n$$

où x^{ni} = coordonnées "globales" des noeuds n

φ^n = valeur des potentiels aux noeuds n

La matrice $\partial N_n / \partial x^i = B_{in}$ est la "matrice des gradients" telle que

$$\vec{\text{grad}} \varphi = \left[\frac{\partial N_n}{\partial s^k} \frac{\partial s^k}{\partial x^i} \right] \varphi^n = B_{in} \varphi^n$$

Le problème qui nous intéresse ici est lié au calcul de la matrice des gradients B_{in} , car en un point (s^1, s^2) de l'élément seules les matrices

$$\frac{\partial N_n}{\partial s^k} \quad \text{et} \quad \frac{\partial x^i}{\partial s^k} = \frac{\partial N_n}{\partial s^k} x^{in}$$

peuvent être calculées directement. Toutefois, dans le cas "normal" on a autant de coordonnées locales s^k que de coordonnées globales x^i et la matrice $\partial x^i / \partial s^k$ est une matrice carrée invertible permettant de calculer B_{in} par

$$B_{in} = \left[\frac{\partial x^i}{\partial s^k} \right]^{-1} \left[\frac{\partial N_n}{\partial s^k} \right]$$

Par contre, en plongeant un élément bidimensionnel ou un élément unidimensionnel dans un espace tridimensionnel, le nombre des coordonnées locales sera inférieur au nombre des coordonnées globales, la matrice $\partial x^i / \partial s^k$ n'est plus invertible et le calcul de B_{in} présente des difficultés supplémentaires. Pour surmonter ces difficultés on propose, habituellement, l'introduction de vecteurs de base et de coordonnées locales complémentaires pour retrouver le cas "normal" et les schémas de calcul usuels.

Dans les problèmes d'écoulement souterrain l'introduction de coordonnées locales complémentaires ne semble pas une nécessité et nous suggérons plutôt l'utilisation du tenseur métrique pour calculer la matrice B_{in} de façon relativement simple.

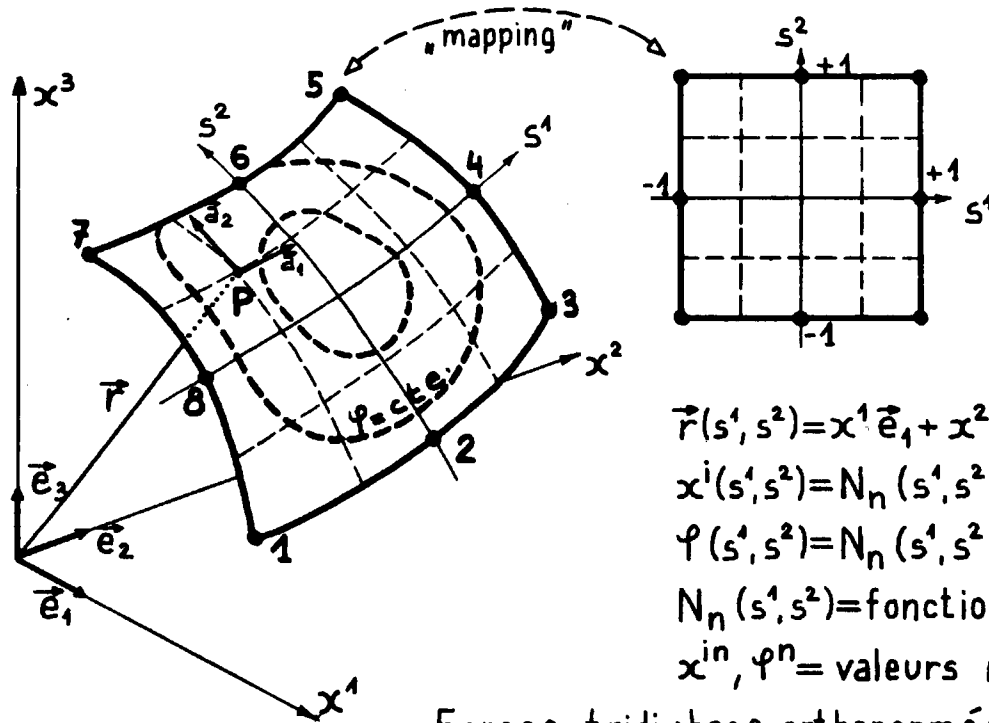
3. Élément bidimensionnel dans un espace tridimensionnel

La figure 1 montre un élément isoparamétrique quadratique à 8 noeuds qui simule une surface très perméable dans un espace tridimensionnel "global" donné par la base orthonormée $\{ \vec{e}_i \}$

D'après l'hypothèse proposée dans l'Introduction nous admettons que dans cet élément "très perméable" le vecteur gradient $\vec{\text{grad}} \varphi$ des potentiels hydrauliques φ est partout tangent à la surface de l'élément, donc nous pouvons exprimer $\vec{\text{grad}} \varphi$ en tout point $P(\vec{r})$ de l'élément à l'aide des vecteurs de

$$\varphi = \text{cte}$$

Figure 1



$$\vec{r}(s^1, s^2) = x^1 \vec{e}_1 + x^2 \vec{e}_2 + x^3 \vec{e}_3$$

$$x^i(s^1, s^2) = N_n(s^1, s^2) x^{in} \quad n=1,8; \quad i=1,3$$

$$\varphi(s^1, s^2) = N_n(s^1, s^2) \varphi^n \quad n=1,8$$

$$N_n(s^1, s^2) = \text{fonctions d'interpolation}$$

$$x^{in}, \varphi^n = \text{valeurs nodales}$$

Espace tridi: base orthonormée $\{\vec{e}_i\}$

Espace bidi: base covariante $\{\vec{a}_k\}$ $\vec{a}_k = \partial \vec{r} / \partial s^k$

Tenseur métrique contravariant $g^{ik} = g_{ik}^{-1} = [\vec{a}_i \quad \vec{a}_k]^{-1}$

$$\text{grad } \varphi = \frac{\partial \vec{r}}{\partial s^k} g^{ik} \frac{\partial \varphi}{\partial s^i}$$

base "locaux" covariants

$$\vec{a}_k = \frac{\partial \vec{r}}{\partial s^k} = \vec{e}_i \frac{\partial x^i}{\partial s^k}$$

et à l'aide des coordonnées locales contravariantes

$$s^k = g^{ik} \frac{\partial \varphi}{\partial s^i}$$

de la manière suivante (TEICHMANN, 1964) :

$$\vec{\text{grad}} \varphi = s^k \vec{a}_k = \frac{\partial \vec{r}}{\partial s^k} g^{ik} \frac{\partial \varphi}{\partial s^i} \quad (3-1)$$

La matrice g^{ik} est le tenseur métrique contravariant au point P ($\vec{r}$) que l'on calcule facilement à partir des vecteurs de base covariants par

$$g^{ik} = g_{ik}^{-1} = [\vec{a}_i \ \vec{a}_k]^{-1}$$

Si l'on introduit les fonctions d'interpolation $N_n(s^k)$ et les valeurs nodales φ^n dans la formule 3-1 on a :

$$\vec{\text{grad}} \varphi = \vec{e}_j \left[\frac{\partial x^j}{\partial s^k} g^{ik} \frac{\partial N_n}{\partial s^i} \right] \varphi^n = \vec{e}_j J^j$$

et l'on en déduit que la matrice des gradients B^j_n est

$$[B^j_n] = \left[x^{jn} \frac{\partial N_n}{\partial s^k} g^{ik} \frac{\partial N_n}{\partial s^i} \right]$$

et que les quantités $J^j = B^j_n \varphi^n$ sont les composantes contravariantes du vecteur gradient $\vec{\text{grad}} \varphi$ dans la base orthonormée $\{\vec{e}_j\}$ de l'espace "global" tridimensionnel.

Pour expliciter les opérations, revenons à une notation plus habituelle et posons :

$s = s^1$; $t = s^2$; $x = x^1$; $y = x^2$; $z = x^3$;
 n = numéro des noeuds.

Pour l'élément à 8 noeuds de la figure 1, la matrice des gradients $[B]$ sera une matrice 3×8 :

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

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

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

$$g_{12} = g_{21} = \frac{\partial x}{\partial s} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial y}{\partial s} \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial z}{\partial s} \frac{\partial z}{\partial t}$$

et

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

La seule opération "en plus" que l'on doit effectuer par rapport au cas "normal" est le calcul du tenseur métrique covariant g_{ij} , manifestement plus simple que l'introduction de coordonnées complémentaires. Remarquons enfin que l'élément de surface dR est, en tout point $P(\vec{r})$, donné par

$$dR = \sqrt{\det g_{ij}} \, ds \, dt$$

et nous pouvons calculer la matrice des perméabilités

A_{mn} par intégration numérique dans les coordonnées locales :

$$[A_{mn}] = \int_{s=-1}^{+1} \int_{t=-1}^{+1} K [B_{mj}] [B_{jn}] \sqrt{\det g_{ik}} \, ds \, dt$$

K étant la perméabilité (isotrope) dans l'élément bidimensionnel.

4. Segment unidimensionnel dans un espace tridimensionnel

Dans le cas d'un élément isoparamétrique unidimensionnel à 3 noeuds, par exemple, la situation est particulièrement simple car il n'y a qu'un seul vecteur de base local covariant ($\vec{a}_1$) et le tenseur métrique covariant n'a qu'un seul terme (g_{11}). En suivant le même raisonnement que précédemment le calcul de la matrice des gradients ne pose pas de problème.

L'élément de longueur dL nécessaire à l'intégration numérique est $dL = \sqrt{g_{11}} \, ds$.

Soulignons que sur un segment curviligne dont la géométrie est définie par les fonctions d'interpolation N_n habituellement utilisées, le tenseur métrique ne reste, généralement pas constant, mais varie en fonction de la courbure de l'élément, donc le rapport dL / ds variera aussi. Cela signifie que si le potentiel φ est une fonction linéaire de s (donc $\partial\varphi / \partial s = \text{const.}$), la variation de φ ne sera plus linéaire sur le segment curviligne du modèle et le gradient $\partial\varphi / \partial L$ variera à l'intérieur de l'élément. Ainsi, dans certaines situations le comportement ponctuel de l'élément ne sera pas forcément "juste", bien que globalement les résultats puissent être tout à fait raisonnables.

5. Exemples numériques simples

Deux exemples théoriques simples, ayant des résultats facilement contrôlables, montreront très clairement certains types de problèmes que l'on rencontre dans l'utilisation pratique des éléments bidimensionnels plongés dans un espace tridimensionnel.

Dans le premier exemple il s'agit d'un élément quadratique "plan" à 8 noeuds ayant une perméabilité $K = 1$. Les valeurs nodales des coordonnées globales et des potentiels imposés sont définis dans le tableau 1 et ce dernier montre que les potentiels devraient varier linéairement sur l'élément. Les débits sont calculés à chaque noeud par

$$A_{mn} \varphi^n = Q_m$$

où A_{mn} est la "matrice" des perméabilités que nous avons calculée selon la méthode du paragraphe 3, en utilisant 2×2 , puis 3×3 points de Gauss pour l'intégration numérique. Le tableau 1 montre (voir les débits Q (2G) et Q (3G)) que le flux aboutissant au côté 1-2-3 est de 3,535532 par unité de largeur de l'élément. Cette valeur est facilement contrôlable par la loi de Darcy: la longueur des lignes d'écoulement (= côté 1-8-7) est $L = \sqrt{8}$ pour une différence de potentiels $\Delta\varphi = 10$, ce qui donne un gradient moyen de $\Delta\varphi / L = \underline{3,535533}$. Puisque $K = 1$, c'est aussi le débit par unité de largeur de l'élément et la comparaison avec le résultat précédent montre que pour des éléments "plans" le modèle simule correctement le phénomène physique.

Dans le second exemple (voir tableau 2), l'élément est une surface cylindrique de perméabilité $K=1$, les potentiels imposés restant les mêmes que précédemment. L'écoulement se fait dans la direction des courbures maximales et l'on s'attend, intuitivement, à une variation linéaire des potentiels suivant les lignes d'écoulement.

Tableau 1

noeuds	1	2	3	4	5	6	7	8
x	2,00	2,00	2,00	1,00	0,00	0,00	0,00	1,00
y	0,00	1,00	2,00	2,00	2,00	1,00	0,00	0,00
z	0,00	0,00	0,00	1,00	2,00	2,00	2,00	1,00
φ	0	0	0	5	10	10	10	5
Q(2G)	1,1785	4,7140	1,1785	0,0000	-1,1785	-4,7140	-1,1785	0,0000
Q(3G)	1,1785	4,7140	1,1785	0,0000	-1,1785	-4,7140	-1,1785	0,0000

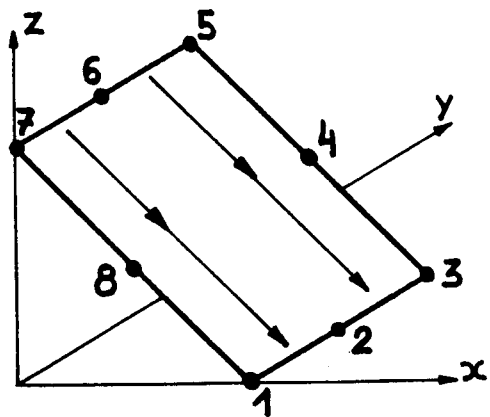
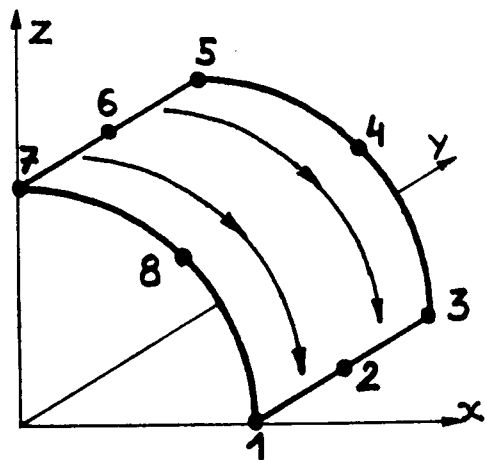


Tableau 2

noeuds	1	2	3	4	5	6	7	8
x	2,00	2,00	2,00	1,4142	0,00	0,00	0,00	1,4142
y	0,00	1,00	2,00	2,00	2,00	1,00	0,00	0,00
z	0,00	0,00	0,00	1,4142	2,00	2,00	2,00	1,4142
φ	0	0	0	5	10	10	10	5
Q(2G)	1,0631	4,2526	1,0631	0,0000	-1,0631	-4,2526	-1,0631	0,0000
Q(3G)	1,0748	4,2992	1,0748	0,0000	-1,0748	-4,2992	-1,0748	0,0000
Q(4G)	1,0735	4,2940	1,0735	0,0000	-1,0735	-4,2940	-1,0735	0,0000



Ce n'est, toutefois, pas le cas dans le modèle et les gradients ne sont pas constants sur l'élément. En calculant les composantes du gradient aux noeuds 3, 4 et 5 on obtient, en effet, les vecteurs suivants (soulignons que le côté 3-4-5 n'est pas un arc de cercle parfait !) :

$$\begin{aligned}\vec{\text{grad}} \varphi (3) &= [-0,254411 \quad 0,000000 \quad 2,710754]' \\ \vec{\text{grad}} \varphi (4) &= [-2,500000 \quad 0,000000 \quad 2,500000]' \\ \vec{\text{grad}} \varphi (5) &= [-2,710754 \quad 0,000000 \quad 0,254411]'\end{aligned}$$

La longueur de ces vecteurs étant 2,722666 au noeud 3, 3,535533 au noeud 4 et 2,722666 au noeud 5! Cette variation du gradient qui ne correspond manifestement pas au phénomène physique réel est, en fait, induite par les fonctions d'interpolation employées (voir tableau 3) qui déterminent une certaine "contraction" des coordonnées locales dans les régions à fortes courbures. Si les lignes d'écoulement étaient parallèles aux génératrices de la surface cylindrique (courbure = 0) nous aurions, bien entendu, partout les mêmes gradients de grandeur constante.

Calculons les débits à chaque noeuds de nouveau par la formule $A_{mn} \varphi^n = Q_m$.

Dans une première variante la "matrice des perméabilités" A_{mn} est calculée avec 2 x 2 points d'intégration et l'on obtient les débits nodaux Q (2G) du tableau 2: le débit aboutissant au côté 1-2-3 est de 3,189506 par unité de largeur de l'élément. Il est intéressant de comparer ce résultat au débit que l'on obtiendrait avec la loi de Darcy, en utilisant un gradient moyen constant suivant les lignes d'écoulement. La longueur du côté 3-4-5 (calculée avec deux points d'intégration) est $L = 3,135281$ pour une différence de potentiels $\Delta \varphi = 10$, donc le gradient moyen est de 3,189506. C'est aussi le débit par unité de largeur de l'élément ($K = 1$) et l'on constate

que le comportement "global" de l'élément simule bien le phénomène physique, bien que ponctuellement les gradients ne soient pas très "justes".

Dans une deuxième variante, la matrice A_{mn} est calculée avec 3 X 3 points de Gauss et l'on obtient les débits Q (3G) du tableau 2: le flux aboutissant au côté 1-2-3 est de 3,224459 par unité de largeur de l'élément. Avec trois points d'intégration la longueur du côté 3-4-5 est de 3,124106 ce qui donne un gradient moyen de 3,200915 parallèlement aux lignes d'écoulement. La comparaison des résultats montre qu'avec 3 X 3 points d'intégration, les débits calculés par le modèle sont légèrement supérieurs aux débits que l'on obtiendrait avec un gradient moyen uniforme, car les zones à fortes courbures et à forts gradients sont prises en considération avec un poids plus grand lors de l'intégration numérique (voir aussi : ZIENKIEWICZ, 1971, p.156).

Enfin, si la matrice A_{mn} est calculée avec 4 X 4 points d'intégration, on obtient des résultats semblables aux précédents (voir débits Q (4G) du tableau 2).

Dans l'ensemble, les résultats du modèle restent acceptables pour autant que l'on emploie des éléments à faibles courbures ou que l'on utilise le nombre minimum de points de Gauss pour l'intégration numérique de la matrice A_{mn} (deux points pour un élément quadratique, trois pour un élément cubique).

$N_1 = 0,25 (1-s) (1-t) (-s-t-1)$	$N_5 = 0,25 (1+s) (1+t) (s+t-1)$
$N_2 = 0,5 (1-s^2) (1-t)$	$N_6 = 0,5 (1-s^2) (1+t)$
$N_3 = 0,25 (1+s) (1-t) (s-t-1)$	$N_7 = 0,25 (1-s) (1+t) (-s+t-1)$
$N_4 = 0,5 (1+s) (1-t^2)$	$N_8 = 0,5 (1-s) (1-t^2)$

Tableau 3

REMERCIEMENTS :

Le travail décrit dans cette note fait partie du Programme National "Cycle de l'Eau", du Fonds National de la Recherche Scientifique, réalisé par le Centre d'Hydrogéologie de l'Université de Neuchâtel, sur l'évaluation des ressources en eau dans le milieu fissuré et karstifié. Mes remerciements vont à ces Institutions, ainsi qu'à Monsieur le Professeur Banderet et à Monsieur Piccini, du Centre de Calcul de l'Université de Neuchâtel, pour avoir bien voulu donner leur avis sur certains problèmes particuliers.

BIBLIOGRAPHIE

- B.R.G.M. (1973) - La méthode des éléments finis appliquée à l'hydrogéologie. Bull. du BRGM, Section III, 2ème série, No 4: 217-294
- DESAI, S.C., ABEL, J.F. (1972) - Introduction to the finite element methode. Van Nostrand Reinhold Co., London, 477 p.
- KLINGBEIL, E. (1966) - Tensorrechnung für Ingenieure. Bibl. Inst. Mannheim, 194 p.
- TEICHMANN, H. (1964) - Physikalische Anwendungen der Vektor - und Tensorrechnung. Bibl. Instit. Mannheim, 231 p.
- ZIENKIEWICZ, O.C. (1971) - The finite element method in engineering science. Mc Graw-Hill, London, 521 p.