Record Number: Author, Monographic: Author Role:	18910 Heniche, M.//Secretan, Y.//Leclerc, M.
Title, Monographic:	DISPERSIM : Un outil de modélisation par éléments finis de la dispersion de contaminants en milieu fluvial
Translated Title: Reprint Status: Edition: Author, Subsidiary: Author Role:	
Place of Publication:	Québec
Publisher Name:	INRS-Eau
Date of Publication:	2000
Original Publication Date	ate: Mars 2000
Volume Identification:	
Extent of Work:	viii, 62
Packaging Method:	pages incluant un annexe
Series Editor:	
Series Editor Role:	
Series Title:	INRS-Eau, rapport de recherche
Series Volume ID:	558
Location/URL:	
ISBN:	2-89146-335-8
Notes:	Rapport annuel 1999-2000
Abstract:	Réalisé pour Pêches et Océans Canada, Garde Côtière 10.00\$
Call Number:	R000558
Keywords:	rapport/ ok/ dl

DISPERSIM un outil de modélisation par éléments finis de la dispersion de contaminants en milieu fluvial

DISPERSIM UN OUTIL DE MODÉLISATION PAR ÉLÉMENTS FINIS DE LA DISPERSION DE CONTAMINANTS EN MILIEU FLUVIAL

pour:

Pêche et Océans Canada

Garde côtière

Rapport INRS-Eau No. R558

Mars 2000

©INRS-Eau, 2000 ISBN : 2-89146-335-8

Pour fins de citation : Secretan, Y., M. Heniche et M. Leclerc (2000). DISPERSIM : un outil de modélisation par éléments finis de la dispersion de contaminants en milieu fluvial

Travail réalisé pour le compte de Pêches et Océans Canada. Garde côtière. Rapport scientifique INRS-Eau No.R558, 57 pages, mars.

ÉQUIPE DE RÉALISATION

Institut national de la recherche scientifique-Eau

Mourad Heniche, Ph.D., associé de recherche Michel Leclerc, Ph.D., professeur Yves Secretan, Ph.D., professeur

Pêche et Océans Canada - Garde côtière

Direction de projet : *Stéphane Dumont, Ing., surveillant* Chargée de projet : *Élisabeth Marceau, M.Sc., Ing.*

TABLE DES MATIÈRES

-

LE MILIEU FLUVIAL	2 SION POUR
1.1 Problématique	2
1.2 Mandat	3
1.3 Livrables	3
2. MODÈLE MATHÉMATIQUE	4
2.1 Équation de transport-diffusion	4
2.2 Conditions aux limites 2.2.1 Frontière fermée 2.2.2 Frontière d'entrée 2.2.3 Frontière de sortie	4 4 5 5
2.3 Diffusivités	5
 2.4 Sources et puits 2.4.1 Contaminant conservatif 2.4.2 Coliformes fécaux 2.4.3 Oxygène dissous (OD) et demande biochimique en oxygène (DBO) 2.4.4 Matières solides en suspension 2.4.5 Métaux lourds 2.4.6 Toxiques organiques 	6 7 7 7 8 10
3. MODÈLE NUMÉRIQUE	12
3.1 Approximation par éléments finis	12
3.2 Forme matricielle 3.2.1 Problème stationnaire 3.2.2 Problème transitoire	13 13 14
3.3 Librairie d'éléments finis	14
 3.4 Méthode de résolution 3.4.1 Résolution du système par GMRES(m) 3.4.2 Matrice de préconditionnement ILU(n) 3.4.3 Algorithme de résolution par GMRES(m) 	15 16 16 17
4. DÉVELOPPEMENT LOGICIEL	18
4.1 Analyse de l'existant - choix d'implantation	18
4.2 Écriture du code	19

4.3 Structure de tests quotidiens du code	19
5. TESTS DE VALIDATION ANALYTIQUE	21
 5.1 Contrôle de programmation 5.1.1 Contrôles de base 5.1.2 Test de conformité des éléments en transport-diffusion 5.1.3 Test de convergence en transport-diffusion 	21 21 22 23
 5.2 Tests de précision en régime stationnaire 5.2.1 Convection d'une distribution gaussienne 5.2.2 Convection d'un front de concentration 	24 24 26
5.3 Tests de précision en régime transitoire5.3.1 Diffusion d'un front de concentration5.3.2 Rotation d'une distribution gaussienne	28 28 30
5.4 Discussion	31
6. TEST D'EFFICACITÉ : APPLICATION AU LAC SAINT-FRANÇOIS	33
6.1 Situation du lac Saint-François	33
6.2 Scénario hydrodynamique de référence	33
6.3 Maillage exploité	34
6.4 Conditions initiales et aux limites appliquées	34
 6.5 Performances de la résolution : cas linéaire 6.5.1 Élément CD2DNC_CCN 6.5.2 Élément CD2DNC_CLF 6.5.3 Élément CD2DNC_MES 	34 35 35 35
6.6 Observations	36
7. INSTALLATION DES LOGICIELS	37
8. CONCLUSION	38
8.1 Les livrables	38
8.2 Les potentialités du solveur	38
8.3 Une interface entre HYDROSIM et DISPERSIM	39
9. BIBLIOGRAPHIE	40
10. ANNEXE : PAGE WWW DE COMPILATION DES TESTS DE DISPERSIM	42

LISTE DES FIGURES

Figure	1:	Convection	stationnaire	d'une	distribution	gaussienne	dans	un	champ	de	vitesse
circ	cula	ire				·					
Figure	2 :	Convection	transitoire	d'une	distribution	gaussienne	dans	un	champ	de	vitesse
circ	cula	ire							• •		31

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1 : Caractéristiques des éléments spécialisés de DISPERSIM
Tableau 2 : Taux de convergence pour différentes applications de l'équation de transport- diffusion
Tableau 3 : Comparaison de différents schémas numériques pour la convection d'un profil gaussien dans un champ de vitesse circulaire. 25
Tableau 4 : Résumé des tests de convection d'un front de concentration en régime stationnaire28
Tableau 5 : Influence du coefficient de dégradation K_d sur les résultats de la diffusion transitoire d'un front de concentration ($h=0,1m, \Delta t=10s$)
Tableau 6 : Comparaison de différents schémas numériques pour la convection transitoire d'une distribution gaussienne dans un champ de vitesse circulaire
Tableau 7 : Test d'efficacité de la dispersion d'un contaminant conservatif dans le lac Saint- François
Tableau 8 : Test d'efficacité de la dispersion des coliformes fécaux dans le lac Saint-François35
Tableau 9 : Test d'efficacité de la dispersion des matières solides en suspension dans le lac Saint- François

Avant-propos

Lors de sa création, l'INRS-Eau répondait à un besoin largement identifié concernant les recherches en Sciences de l'eau. Sa mission s'est maintenue depuis et la problématique d'alors reste d'actualité. Au cours des dernières années, la dimension environnement s'est greffée aux activités de recherche du Centre. Compte tenu de l'urgence et de l'ampleur des problèmes à résoudre, l'INRS-Eau a développé une approche multidisciplinaire fondée sur l'implication et l'interaction de chercheurs provenant de différentes formations spécialisées: génie civil, hydrologie et hydrogéologie, météorologie, hydraulique, biologie, chimie, géologie et géographie, physique, mathématiques, informatique, océanographie, biogéochimie.

L'INRS-Eau attache plus que jamais de l'importance à la recherche intégrée, regroupant un maximum de disciplines et permettant de relayer de l'information rapidement et efficacement entre les programmes de recherche et vers les intervenants externes à mesure que s'effectuent des percées scientifiques et technologiques. Conscient de la pertinence des activités de recherche en cours, le Centre encourage leur développement et favorise l'intensification de celles qui présentent le plus grand potentiel d'application directe à court et moyen terme, pour répondre à des problématiques et des urgences autant à l'échelle régionale, nationale que mondiale.

Les activités de recherche de l'INRS-Eau visent essentiellement à développer des outils scientifiques et technologiques de pointe pour répondre à toutes les problématiques actuelles reliées à l'eau (utilisation et gestion intégrée, contrôle de la qualité et assainissement, protection et restauration) et des outils prédictifs pour l'évaluation des risques et la gestion des urgences environnementales (simulation hydrodynamique, modélisation à grande échelle des bassins versants, systèmes experts et systèmes d'aide à la décision, banques de données à référence spatiale). Les outils ainsi développés sont conçus pour s'appliquer rapidement à des situations concrètes existantes et apporter des solutions pratiques, efficaces et les plus économiques possibles. Les programmes de recherche ont été développés avec cette philosophie d'action comme prémisses de base.

Déjà, les projets de recherche et de développement en hydrologie, regroupant les méthodes d'analyse statistique, d'analyse numérique, de modélisation, de télédétection et de géomatique appliquées aux écoulements fluviaux, fournissent des explications et proposent des solutions pour prévenir les situations anormales que le Québec a connues en 1996. Plusieurs modèles hydrodynamiques développés à l'INRS-Eau sont appliqués directement aux conditions actuelles de façon à simuler toutes les réponses possibles advenant des modifications des conditions. Le développement de logiciels de modélisation des cours d'eau se poursuit dans le but de rendre ces outils disponibles à l'ensemble de la communauté scientifique mondiale et aux gestionnaires de cours d'eau.

En plus du mandat explicite qu'il a reçu du législateur d'ordonner ses activités aux besoins socioéconomiques du Québec, le Centre a le devoir de partager ses activités et de diffuser ses résultats auprès de partenaires et des agents socio-économiques québécois et internationaux. Le Centre est fréquemment sollicité par différents organismes tant publics, parapublics que privés pour collaborer à des études conjointes sur des problèmes environnementaux; l'INRS-Eau s'est impliqué dans au moins une trentaine de telles collaborations au cours des dernières années.

1. INTRODUCTION : DISPERSIM UN MODÈLE DE TRANSPORT-DIFFUSION POUR LE MILIEU FLUVIAL

1.1 Problématique

DISPERSIM est un modèle de transport-diffusion qui permet de traiter en parallèle plusieurs variables ainsi que leurs interactions. Les facteurs pris en considération sont les suivants :

- les matières solides en suspension
- l'oxygène dissous
- la DBO
- les coliformes fécaux
- les métaux lourds
- les toxiques organiques.

C'est une modèle bi-dimensionnel intégré sur la verticale, les variables calculées sont donc des valeurs moyennes dans le hauteur de la colonne d'eau. DISPERSIM est un modèle aux éléments finis, d'approximation linéaire sur des éléments triangulaires. La résolution est stationnaire ou transitoire, sur une hydrodynamique stationnaire.

DISPERSIM en entrée a besoin de la description du terrain (maillage éléments finis) et de la description de l'hydraulique (vitesses, profondeurs, coefficients de dispersion, coefficients de Manning). Il livre en sortie la concentration de chaque variable calculée.

DISPERSIM, dans sa forme actuelle, souffre de limitations qui le rendent inutilisable pour de gros domaines d'études.

1.2 Mandat

Le projet proposé veut transformer le modèle numérique DISPERSIM afin de le rendre utilisable pour des simulations de transport de sédiment sur de gros domaines d'étude. Les activités prévues sont :

- 1. Transformer le modèle éléments finis de transport-diffusion DISPERSIM existant pour l'intégrer à la coquille éléments finis FORTRAN et le rendre compatible avec le programme HYDROSIM. Le modèle résultant sera plus robuste et plus efficace, utilisable pour de gros problèmes comme des tronçons du fleuve Saint-Laurent ;
- 2. Développer et faire certains tests numériques, tests de convergence et tests de précision ; procéder à un test d'efficacité sur un tronçon du fleuve ;
- 3. Écrire une documentation sommaire décrivant le modèle et sa mise en oeuvre.

L'emphase dans ce projet va être mis sur le transport de sédiments.

1.3 Livrables

A terme, nous livrerons :

- une version de l'exécutable sur plate-forme WIN32, ainsi qu'une licence valable pour un an.
- la documentation.

2. MODÈLE MATHÉMATIQUE

2.1 Équation de transport-diffusion

L'équation scalaire de transport-diffusion sous forme non-conservative (Padilla *et coll.*, 1997) peut être écrite sous la forme suivante:

$$H\frac{\partial C}{\partial t} + uH\frac{\partial C}{\partial x} + vH\frac{\partial C}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x}H(D_{xx}\frac{\partial C}{\partial x} + D_{xy}\frac{\partial C}{\partial y}) - \frac{\partial}{\partial y}H(D_{yx}\frac{\partial C}{\partial x} + D_{yy}\frac{\partial C}{\partial y}) + QH(C - C^{0}) - \Delta S = 0$$

 $C(kg/m^3)$: concentration et variable d'état ;

H(m): profondeur ;

u, v(m/s): composantes horizontale de vitesse en x et y respectivement ;

 $D_{ii}(m^2/s)$: composantes du tenseur de dispersion ;

 $Q(m^3/s)$: débit injecté par unité de volume ;

 $C^{0}(kg/m^{3})$: concentration injectée.

Ici, ΔS constitue un terme global de puits et de sources de matière. Sa formulation est spécifique à chacune des variables d'état considérées que nous présentons plus loin.

2.2 Conditions aux limites

2.2.1 Frontière fermée

Sur une frontière fermée la vitesse normale u_n est nulle et généralement on impose une condition de Neuman :

$$-H(D_{xx}\frac{\partial C}{\partial x}+D_{xy}\frac{\partial C}{\partial y})n_{x}-H(D_{yx}\frac{\partial C}{\partial x}+D_{yy}\frac{\partial C}{\partial y})n_{y}=0$$

 $n(n_x, n_y)$: normale extérieure au domaine.

2.2.2 Frontière d'entrée

Sur une frontière d'entrée on impose soit une condition de Dirichlet

 $C = \overline{C}$

 \overline{C} : concentration connue

soit une condition de Cauchy

$$-H(D_{xx}\frac{\partial C}{\partial x} + D_{xy}\frac{\partial C}{\partial y})n_x - H(D_{yx}\frac{\partial C}{\partial x} + D_{yy}\frac{\partial C}{\partial y})n_y = q_n H(C^* - C)$$

 $q_n(m^2/s)$: flux normal;

 $C^*(kg/m^3)$: concentration à l'extérieur du domaine.

2.2.3 Frontière de sortie

On suppose la concentration C^* à l'extérieur du domaine identique à celle à l'intérieur ce principe s'énonce comme suit :

$$-H(D_{xx}\frac{\partial C^{*}}{\partial x} + D_{xy}\frac{\partial C^{*}}{\partial y})n_{x} - H(D_{yx}\frac{\partial C^{*}}{\partial x} + D_{yy}\frac{\partial C^{*}}{\partial y})n_{y}$$

$$=$$

$$-H(D_{xx}\frac{\partial C}{\partial x} + D_{xy}\frac{\partial C}{\partial y})n_{x} - H(D_{yx}\frac{\partial C}{\partial x} + D_{yy}\frac{\partial C}{\partial y})n_{y}$$

on peut également dans certains cas imposer une condition de Neuman, $C^*=0$.

2.3 Diffusivités

Le tenseur symétrique $(D_{xy}=D_{yx})$ de diffusivité est construit à partir des diffusivités moléculaire D_m , des diffusivités de fond D_f et des diffusivités horizontale D_h . La détermination des diffusivités est déterminante pour le modèle de transport-diffusion. Selon Fisher *et coll*. (1979) la diffusivité de fond peut être évaluée par :

 $D_f = Ku \cdot H$

K: constante variant entre 0,135 et 0,17;

 $u_*(m/s)$: vitesse de cisaillement.

Le principe de longueur de mélange permet d'estimer la diffusivité horizontale :

$$D_{h} = \beta l_{m} \sqrt{2(\frac{\partial u}{\partial x})^{2} + 2(\frac{\partial v}{\partial y})^{2} + (\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x})^{2}}$$

 β : constante de calibration ;

 $l_m(m)$: longueur de mélange

En pratique, les valeurs de u_* et D_h sont restituées par le simulateur hydrodynamique HYDROSIM.

Les composantes du tenseur de dispersion sont évaluées comme suit :

$$D_{xx} = D_L \cos^2 \theta + D_T \sin^2 \theta$$
$$D_{yy} = D_L \sin^2 \theta + D_T \cos^2 \theta$$
$$D_{xy} = D_{yx} = (D_L - D_T) \cos \theta \cdot \sin \theta$$

 $D_L(m^2/s)$: diffusivité longitudinale ;

 $D_T(m^2/s)$: diffusivité transversale ;

 θ : direction du vecteur vitesse.

Les diffusivités transversale et longitudinale sont données par :

$$D_T = \beta_f \cdot D_f + \beta_h \cdot D_h + D_m$$
$$D_L = \beta_L (\beta_f \cdot D_f + \beta_h \cdot D_h) + D_m$$

 $\beta_{f:}$: coefficient de pondération de D_f ;

 β_h : coefficient de pondération de D_h ;

 β_L : coefficient de pondération de D_L ;

Les coefficients de pondération β_f , β_h et β_L sont des paramètres de calage.

2.4 Sources et puits

Dans les sections qui suivent nous présentons les différentes expressions des termes de sources et puits proposées par Bédard (1997) et retenus pour DISPERSIM.

2.4.1 Contaminant conservatif

Pour un contaminant conservatif le terme de sources/puits est nul :

 $\Delta S=0$

2.4.2 Coliformes fécaux

Le terme puits des coliformes fécaux répond à une cinétique de dégradation du premier ordre :

 $\Delta S = -K_d H C$

 $K_d(1/s)$:coefficient de dégradation global ;

H(m): profondeur ;

 $C(kg/m^3)$: concentration en coliformes fécaux.

2.4.3 Oxygène dissous (OD) et demande biochimique en oxygène (DBO)

Il y a couplage entre l'oxygène dissous et la DBO. L'expression des termes sources et puits pour l'oxygène dissous et la DBO respectivement sont :

$$\Delta S_{OD} = -K_a H(C_{sat} - C_{OD}) - K_d H.f_d C_{DBO} - L_s$$
$$\Delta S_{DBO} = -(K_d H.f_d + w_s f_d) C_{DBO}$$

avec

$f_d = 1 - f_p$

 $K_a(1/s)$: coefficient de réaération atmosphérique ;

 $K_d(1/s)$:coefficient de dégradation global de la DBO soluble ;

 f_p : fraction particulaire de la DBO soluble ;

 $w_s(m/s)$: vitesse de sédimentation ;

 $L_s(kg/m^2/s)$:demande benthique ;

H(m): profondeur ;

 $C_{sat}(kg/m^3)$: concentration en oxygène dissous à saturation.

 $C_{OD}(kg/m^3)$: concentration en oxygène dissous.

 $C_{DBO}(kg/m^3)$: concentration en DBO.

2.4.4 Matières solides en suspension

Le terme d'érosion-déposition de matières solides répond à une cinétique de dégradation du premier ordre non linéaire :

$$\Delta S = -P_d w_s C + P_e C_e$$

avec

 P_d : probabilité de déposition ;

 P_e : probabilité d'érosion ;

 $C_e(kg/m^2/s)$: coefficient d'érosion ;

 $w_s(m/s)$: vitesse de sédimentation des matières solides en suspension ;

 $C(kg/m^3)$: concentration en matières solides en suspension.

2.4.4.1 Probabilités P_d et P_e

Les probabilités de déposition P_d et d'érosion P_e sont déterminées à partir de la contrainte de cisaillement τ générée par l'écoulement de la façon suivante :

$$P_d = (1 - \tau/\tau_d) \text{ et } P_e = 0 \text{ si } \tau < \tau_d ;$$
$$P_d = 0 \text{ et } P_e = 0 \text{ si } \tau \le \tau_e ;$$
$$P_e = (\tau/\tau_e - 1) \text{ et } P_d = 0 \text{ sinon.}$$

 τ_d : contrainte de cisaillement critique de déposition ;

 τ_e : contrainte de cisaillement critique d'érosion.

2.4.4.2 Contrainte de cisaillement critique d'érosion

Dans DISPERSIM, la contrainte critique d'érosion est déterminée à partir du diagramme de Shields selon l'approximation de van Rijn (Frenette, 1996) :

$$\tau_e = \rho u^2 *_{cr} = \rho g(s - 1) d_{50} \theta_c$$
$$s = \rho_s / \rho$$

avec

$$\theta_c = 0,24(D_*)^{-1}$$
 si $D_* \le 4$

$$\theta_c = 0.14(D_*)^{-0.64} \text{ si } 4 < D_* \le 10$$

 $\theta_c = 0.04(D_*)^{-0.10} \text{ si } 10 < D_* \le 20$
 $\theta_c = 0.013(D_*)^{-0.29} \text{ si } 20 < D_* \le 150$

$$\theta_c = 0.055 \text{ si } 150 < D_*$$

 $u_{*cr}(m/s)$: vitesse de cisaillement critique ;

 θ_c : paramètre adimensionnel de Shields ;

 $D_*(m)$: diamètre sédimentologique(= $d_{50}[g(s-1)v^2)]^{1/3}$);

 $\rho(kg/m^3)$: masse volumique de l'eau ;

 $\rho_s(kg/m^3)$: masse volumique des matières solides ;

 $d_{50}(m)$: diamètre moyen ;

 $g(m/s^2)$: accélération gravitationnelle ;

2.4.4.3 Vitesse de sédimentation

La nonlinéarité de ΔS provient de l'expression de la vitesse de sédimentation w_s :

• pour les matières solides cohésives :

$$w_s = K_s \cdot C^{4/3}$$

 K_s : constante de sédimentation pour les matières solides cohésives.

• pour les matières solides non cohésives :

$$w_s = w_{sed} \cdot (1 - C/\rho_s)^n$$

avec

$$w_{sed} = \frac{gd_{50}^2(s-1)}{18v}$$
 si $d_{50} \le 100 \mu m$;

$$w_{sed} = \frac{10\nu}{d_{50}} \left[\sqrt{1 + \frac{0.01(s-1)gd_{50}^3}{\nu^2}} - 1 \right] \text{ si } 100\mu m \leq d_{50} \leq 1000\mu m ;$$

$$w_{sed} = 1, 1\sqrt{gd_{50}(s-1)}$$
 si 1000 $\mu m \leq d_{50}$;

 $n=4,65 \text{ si } Re_p \le 1$; $n=4,00 \text{ si } Re_p < 1000$; $n=2,31 \text{ si } Re_p \ge 1000$.

 $d_{50}(m)$: diamètre moyen ;

 $g(m/s^2)$: accélération gravitationnelle ;

 $\rho(kg/m^3)$: masse volumique de l'eau;

 $\rho_s(kg/m^3)$: masse volumique des matières solides non cohésives ;

 Re_p : nombre de Reynolds particulaire (= $d_{50}.w_{sed}/v$);

 $V(m^2/s)$: viscosité cinématique de l'eau ;

Remarque : la concentration, la vitesse de chute et la probabilité de déposition des matières solides en suspension est une donnée d'entrée pour les cinétiques d'oxygène dissous-DBO, des métaux lourds et des toxiques.

2.4.5 Métaux lourds

Le terme puits des métaux lourds répond à une cinétique de dégradation du premier ordre :

$$\Delta S = -(K_d f_d H + P_d w_s f_p)C$$

avec

$$f_d = (1 + C_s K_p)^{-1}$$

 $K_d(1/s)$: coefficient de dégradation global ;

 $K_p(1/s)$:coefficient de partage ;

H(m): profondeur;

 P_d : probabilité de déposition ;

 $C_s(kg/m^3)$: concentration des matières en suspension ;

 $w_s(m/s)$: vitesse de sédimentation des matières en suspension ;

 $C(kg/m^3)$: concentration en métaux lourds.

2.4.6 Toxiques organiques

Le terme puits des métaux lourds répond à une cinétique de dégradation du premier ordre :

$$\Delta S = -(K_d f_d H + K_v f_d + P_d w_s f_p)C$$

avec

$$f_{d} = (1 + C_{s} K_{p})^{-1}$$

$$f_{p} = 1 - f_{d}$$

$$K_{p} = f_{cs} \cdot K_{s} \cdot (1 + C_{s} f_{cs} \cdot K_{s} / 1, 4)^{-1}$$

$$K_{s} = 10.(5 - 0.67 \cdot Log(S_{a}))$$

 $K_d(1/s)$: coefficient de dégradation global ;

 $K_{v}(1/s)$: coefficient de volatilisation ;

H(m): profondeur ;

 P_d : probabilité de déposition ;

 f_d : fraction des toxiques sous forme dissoute ;

 f_p : fraction des toxiques sous forme particulaire ;

 $C_s(kg/m^3)$: concentration des matières en suspension ;

 $w_s(m/s)$: vitesse de sédimentation des matières en suspension ;

 f_{cs} : contenu en carbone des matières en suspension ;

 S_o : solubilité des matières en suspension ;

 $C(kg/m^3)$: concentration en toxiques.

3. MODÈLE NUMÉRIQUE

Les équations aux dérivées partielles qui décrivent les phénomènes de transport de la quantité de mouvement et de la matière sont des représentations continues du milieu physique. À l'exception des géométries simples où les conditions d'écoulement sont contrôlées, ces équations ne peuvent être résolues analytiquement. Une approche de résolution numérique est habituellement utilisée.

Les méthodes numériques permettent de trouver une solution approchée aux problèmes décrits par des équations aux dérivées partielles. Ces méthodes nécessitent une discrétisation des équations dans l'espace et le temps. La solution n'est donc évaluée qu'en certains points du domaine d'écoulement. La précision de la solution est évidemment fonction de la densité de la discrétisation.

La méthode des éléments finis passe par l'application de principes variationnels en vue de développer une formulation intégrale du problème à solutionner. La discrétisation de cette formulation génère un système algébrique que l'on doit résoudre en vue d'obtenir la solution au problème.

Dans le présent chapitre, les étapes de résolution par la méthode des éléments finis sont appliquées successivement à la formulation non conservative de l'équation de transport-diffusion. Cette démarche permet d'établir un algorithme adapté aux particularités de l'équation et de développer la structure qui devra être programmée.

3.1 Approximation par éléments finis

Sur un domaine Ω admettant pour frontière Γ , la forme intégrale faible de type Galerkine associée à l'équation de transport-diffusion avec source et puits s'exprime sous forme condensée comme suit :

$$\int_{\Omega} \Phi[H\frac{\partial C}{\partial t} + uH\frac{\partial C}{\partial x} + vH\frac{\partial C}{\partial y} + QH(C - C^{0}) - \Delta S]d\Omega - \\\int_{\Omega} [\frac{\partial \Phi}{\partial x}H(D_{xx}\frac{\partial C}{\partial x} + D_{xy}\frac{\partial C}{\partial y}) - \frac{\partial \Phi}{\partial y}H(D_{yx}\frac{\partial C}{\partial x} + D_{yy}\frac{\partial C}{\partial y})]d\Omega - \\\int_{\Gamma} \Phi H[(D_{xx}\frac{\partial C}{\partial x} + D_{xy}\frac{\partial C}{\partial y})n_{x} + (D_{yx}\frac{\partial C}{\partial x} + D_{yy}\frac{\partial C}{\partial y})n_{y}]d\Gamma = 0$$

La forme intégrale ci-dessus est discrétisée sur l'élément triangulaire à 3 noeuds T3 isoparamétrique à approximation linéaire. La fonction de forme sur l'élément T3 de référence s'exprime comme suit :

$$\langle N \rangle = \langle 1 - \xi - \eta \quad \xi \quad \eta \rangle$$

 (ξ,η) étant les coordonnées sur l'élément de référence. La forme intégrale étant de type Galerkine, nous avons :

$$\Phi = \langle N \rangle$$
$$C = \langle N \rangle \{u_n\}$$

 $\{u_n\}$: vecteur des valeurs nodales de la concentration C

La procédure de discrétisation de la forme intégrale faible sur l'élément T3 tient compte des approximations. De plus, les produits de fonction sont discrétisés par la technique des produits factorisés. La démarche de discrétisation adoptée nous permet de calculer de manière exacte la première variation de la forme intégrale pour les besoins de la résolution.

3.2 Forme matricielle

3.2.1 Problème stationnaire

Dans le cas stationnaire la discrétisation des de la forme intégrale faible conduit à un système d'équations de la forme :

$[K]{U}-{F}={0}$

$[K] = [K_c] + [K_d] + [K_Q] + [K_S]$

[K] : matrice de rigidité du système d'équations;

[K_c] : matrice non symétrique de convection ;

[K_d] : matrice symétrique de diffusion ;

 $[K_Q]$: matrice symétrique de débit injecté à la concentration C;

[K_S] : matrice symétrique du terme source et puits ;

{U} : vecteur solution ;

 $\{F\}$: vecteur des sollicitations résultant de la discrétisation du débit injecté à la concentration C⁰

Les matrices $[K_c]$, $[K_d]$ et $[K_Q]$ sont constantes et indépendantes de $\{U\}$. La matrice $[K_S]$ est en règle générale constante sauf pour le cas des matières solides en suspension

3.2.2 Problème transitoire

Dans le cas transitoire il faut tenir de la contribution du temps dans le formalisme et il en découle après discrétisation de la composante temporelle la forme matricielle suivante :

$$[\mathbf{M}]\{\dot{U}\}+[\mathbf{K}]\{U\}-\{F\}=\{0\}$$

[M] : matrice masse symétrique ;

 $\{\dot{U}\}$: dérivée $\{U\}$ de par rapport au temps

La matrice [M] est constante et indépendante de $\{U\}$. La matrice [K] et le vecteur $\{F\}$ sont identiques à ceux du problème stationnaire. Dans DISPERSIM, la dérivée par rapport est approximée par un schéma d'Euler et dans ce cas nous avons la possibilité d'exploiter les schémas de résolution dans le temps suivants :

- Euler explicite ;
- Euler implicte ;
- Crank-Nicholson.

Pour ces trois schémas la forme matricielle transitoire peut être unifiée en introduisant le paramètre α qui varie entre 0 et 1 :

 $\alpha \Delta t[\mathbf{K}] \{ U_{t+\Delta t} \} + [\mathbf{M}] \{ U_{t+\Delta t} \} = \Delta t\{F\} + (1-\alpha) \Delta t[\mathbf{K}] \{ U_t \} + [\mathbf{M}] \{ U_t \}$

 $\alpha=0$: schéma explicite ;

 $\alpha = 1$: schéma implicite ;

 $\alpha = \frac{1}{2}$: schéma de Crank-Nicholson ;

 $0 < \alpha < 1$: schéma semi-implicite.

3.3 Librairie d'éléments finis

Comme on peut le constater à l'examen de la forme matricielle, seule la matrice $[K_S]$ de puits et source est susceptible de changer pour reproduire la contribution d'une cinétique particulière. Nous nous sommes basés sur cet aspect pour scinder l'élément de DISPERSIM en plusieurs éléments spécialisés. Ces éléments partages le même élément virtuel de transport-diffusion pur qui permet d'assembler les matrices $[K_c]+[K_d]+[K_Q]$ et [M] ainsi que le vecteur $\{F\}$. La tâche de

l'élément spécialisé consistera à assembler la matrice $[K_S]$ et à solliciter l'élément virtuel pour assembler les opérateur de transport-diffusion.

Nous avons alors développé 6 éléments finis spécialisés dans le calcul des cinétiques présentées au chapitre précédent baptisés CD2DNC_, pour Convection-Diffusion à 2 Dimensions en formulation Non Conservative, suivi de l'extension :

- 1. CCN pour les Contaminants CoNservatifs ;
- 2. CLF pour les CoLiformes Fécaux ;
- 3. DBO pour l'oxygène dissous et la DBO;
- 4. MES pour les Matières solides En Suspension ;
- 5. MET pour les MÉTaux lourds;
- 6. TOX pour les TOXiques organiques.

Tableau 1 : Caractéristiques des éléments spécialisés de DISPERSIM

Éléments	Géométrie	ddl/noeud	approximation de C	Source-Puits
CD2DNC_CCN	Т3	1	linéaire	linéaire
CD2DNC_CLF		1		linéaire
CD2DNC_DBO	"	2	11	linéaire
CD2DNC_MES	н	1	11	non linéaire
CD2DNC_MET	11	1	11	linéaire
CD2DNC_TOX	¹ N	1	11	linéaire

Cette philosophie de mise en œuvre informatique nous a permis de clarifier l'écriture du code, de faciliter la gestion des données, de réduire la taille des problèmes à traiter et par conséquent d'améliorer la rapidité de la procédure de résolution.

3.4 Méthode de résolution

La discrétisation par éléments finis des équations aux dérivées partielles gouvernant le phénomène physique conduit à un système algébrique d'équations du type $[\mathbf{K}(U)]\{U\}=\{F\}$. La résolution de ce système matriciel revient à déterminer le vecteur $\{U\}$ représentant les inconnues discrètes du modèle. La particularité de la matrice $[\mathbf{K}]$ du système matriciel fait qu'elle est non symétrique, non linéaire (dépend de $\{U\}$) et surtout est souvent de grande taille. Les méthodes de

résolution directes sont alors pénalisante en espace mémoire et en temps d'exécution et limiterait alors les perspectives d'application sur ordinateurs personnels (PC). La récente méthode GMRES basée sur un processus itératif a ouvert une voie nouvelle dans le domaine de la résolution de systèmes de grandes tailles et non linéaires puisqu'elle ne requiert ni le stockage ni le calcul explicite de la matrice [K].

Le choix du solveur de DISPERSIM s'est orienté vers la version GMRES non linéaire pour les raisons évoquées plus haut. De plus, pour renforcer la convergence de GMRES nous avons introduit une matrice de préconditionnement par factorisation incomplète et à niveau de remplissage variable. Dans un souci d'efficacité numérique, une attention particulière a été accordée à la mise au point de l'algorithme de stockage creux des matrices.

3.4.1 Résolution du système par GMRES(m)

La méthode GMRES (Generalized Minimal RESidual) est une méthode de résolution de la classe des méthode itératives. C'est une méthode de résolution réputée pour sa robustesse et sa rapidité d'exécution. Elle a fait ses preuves avec HYDROSIM dans de nombreuses applications. Le principe de fonctionnement de la méthode consiste à calculer la solution qui minimise le résidu projeté dans un sous espace de type Krylov de dimension m, c'est la raison pour laquelle on parle de GMRES(m). Le paramètre m est très important puisqu'il conditionne non seulement la dimension de l'espace de Krylov mais également la convergence de la solution. La valeur à attribuer à m requiert une bonne expérience d'utilisation car il n'existe pas de procédure déterministe pour l'évaluer. En pratique la méthode GMRES est beaucoup moins gourmande en espace mémoire qu'une méthode directe.

3.4.2 Matrice de préconditionnement ILU(n)

Le rôle de la matrice de préconditionnement **[P]** est déterminant dans l'efficacité de la résolution par GMRES. Supposons que le système à résoudre s'exprime comme suit :

$[K]{U}={F}$

l'introduction d'un préconditionnement à gauche transforme le système comme suit :

$[P][K]{U}=[P]{F}$

On peut facilement déduire que la meilleur matrice de préconditionnement est :

$[P] = [K]^{-1}$

techniquement la matrice $[K]^{-1}$ n'est pas toujours accessible c'est une résolution en soi. En pratique on a souvent recours à une approximation de $[K]^{-1}$ par factorisation incomplète, on parle alors de matrice de préconditionnement de type ILU. En effet les matrices éléments finis ont la propriété d'être creuses. Le principe de la factorisation incomplète consiste à éliminer à priori tous les termes nuls da façon arbitraire. Certains d'entre eux n'ont aucune influence dans le processus de résolution, cependant ceux se trouvant sous la ligne-de-ciel ont un rôle à jouer. Le

fait de les rejeter génère de l'erreur dans le processus de factorisation et c'est la raison pour laquelle on parle de factorisation incomplète (Heniche *et coll.*, 1998).

Si on rejette tous les termes nuls de la matrice du système d'équations, nous avons une matrice de préconditionnement de type ILU(0) et dans ce cas la dimension m de l'espace de Krylov, GMRES(m), devient très importante. Si on les conserve tous, on parle de matrice ILU(∞); dans cette situation la résolution est directe pour un système linéaire et l'espace de Krylov peut être limité à 1 vecteur, GMRES(1).

Dans DISPERSIM, nous avons le choix entre quatre matrices de préconditionnement :

- 1. matrice identité ;
- 2. matrice masse diagonale;
- 3. matrice tangente diagonale;
- 4. matrice ILU(n).

Selon notre expérience, la plus performante est la matrice ILU(n).

3.4.3 Algorithme de résolution par GMRES(m)

L'algorithme de résolution par GMRES(m) non linéaire avec préconditionnement est résumé brièvement ci-dessous :

Do I1=1,NPREC Calcul de la matrice de préconditionnement Do I2=1,NRDEM Do I3=1,NITER Calcul du sous espace solution Calcul de Δ U (incrément de solution) $U_{i2}=U_{i2-1}+\Delta U$ (mise à jour de la solution) Arrêt si $||\Delta U||$ <précision (test de convergence)

4. DÉVELOPPEMENT LOGICIEL

4.1 Analyse de l'existant - choix d'implantation

Nous avons procédé à une révision et une validation des choix numériques et informatiques de Bédard (1997) et Padilla *et coll*. (1997). La migration du code vers la coquille éléments finis FORTRAN impose certaines adaptations, donc la réécriture de parties du code. Nous en avons dès lors profité pour scinder l'élément original relativement lourd en cinq éléments plus spécialisés et plus simples. Cette approche simplifie le code et en facilite sa maintenance. De plus elle réduit la taille des fichiers de données et diminue le temps de calcul.

Dans un cadre de programmation de logiciel éléments finis, on appelle par convention *élément* toutes les parties du code qui exécutent les tâches élémentaires.

Chaque élément retenu modélise un phénomène physique particulier :

- 1. les matières solides en suspension ;
- 2. l'oxygène dissous et la DBO ;
- 3. les coliformes fécaux ;
- 4. les métaux lourds ;
- 5. les toxiques organiques.

Comme tous les nouveaux éléments partagent des fonctionnalités communes, il a été décidé de simuler en FORTRAN une structure d'héritage (au sens Oritenté-Objet) et donc de considérer chaque élément comme la spécialisation d'un élément virtuel de base. Cet élément virtuel de base implante toutes les fonctionnalités communes, comme par exemple :

- l'imposition des conditions limites,
- le calcul du résidu,
- le dimensionnement de la matrice tangente,
- le calcul de la matrice tangente,
- l'estimation d'erreur,

alors que les éléments dérivés implantent, quand à eux, uniquement ce qui est spécifique, comme :

- le calcul des cinétiques,
- le post-traitement.

4.2 Écriture du code

Le code à été écris en respectant les standards de l'équipe de développement. Les fichiers sources sont gérés par un système de contrôle de révisions (RCS). Une compilation automatique est lancée chaque jour à partir de cette base de fichiers, dont le résultat est fourni aux développeurs sous forme d'une page WWW au sein même de l'environnement de développement. Le code est compilé avec le compilateur Watcom FORTRAN 11.0.

Une révision de code à été effectuée sur tous les éléments.

4.3 Structure de tests quotidiens du code

La validation constitue une étape essentielle au développement d'un modèle numérique. Le modèle doit entre autres subir une série de tests analytiques qui visent à démontrer sa consistance et sa stabilité.

Afin de valider un modèle de type éléments finis, il est souhaitable de respecter une méthodologie particulière. L'idée consiste à effectuer des tests standards ou personnalisés dont le niveau de difficulté augmente progressivement. Les aspects de base sont d'abord vérifiés et on s'assure ainsi que le modèle réponde bien à des problèmes simples avant de le confronter à des plus complexes.

Une démarche de validation en quatre étapes est appliquée au programme. Ces étapes sont les suivantes:

- 1. contrôle de la programmation du modèle de base ;
- 2. contrôle de la précision du modèle de base ;
- 3. contrôle de la conformité des modèles spécialisés au modèle de base ;
- 4. contrôle des cinétiques des modèles spécialisés.

Un total de 51 tests est monté, tant stationnaires que transitoires.

Une structure complètement automatisée de test a été mise en place. Les tests sont effectués à chaque jour (ou plus fréquemment au besoin) et comparés à des valeurs de référence. Une compilation des résultats est fournie sous forme d'une page WWW au sein même de

l'environnement de développement. Nous pouvons ainsi garantir que le programme remplit tous les tests. L'impression de la page WWW est donnée en annexe.

5. TESTS DE VALIDATION ANALYTIQUE

La validation constitue une étape essentielle au développement d'un modèle numérique. Le modèle doit entre autres subir une série de tests analytiques qui visent à démontrer sa consistance et sa stabilité.

Afin de valider un modèle de type éléments finis, il est souhaitable de respecter une méthodologie particulière. L'idée consiste à effectuer des tests standards ou personnalisés dont le niveau de difficulté augmente progressivement. Les aspects de base sont d'abord vérifiés et on s'assure ainsi que le modèle réponde bien à des problèmes simples avant de le confronter à des plus complexes.

Une démarche de validation en deux étapes est appliquée au modèle de transport-diffusion. Ces étapes sont les suivantes:

- 1. contrôle de la programmation ;
- 2. contrôle de la précision du modèle.

Les phénomènes de transport et de diffusion ayant déjà fait l'objet d'un exercice de validation (Padilla *et coll.*, 1997), l'emphase sera mise sur les termes puits et sources. Notons que les tests académiques décrits ci-dessous font intervenir des ordres de grandeur des concentrations, des paramètres et des coefficients qui ne sont pas nécessairement représentatifs des phénonèmes pouvant survenir en milieu naturel.

5.1 Contrôle de programmation

L'étape de contrôle de la programmation consiste à vérifier la conformité des algorithmes implantés. On cherche à démontrer que les éléments développés sont conformes et que les caractéristiques de la méthode d'approximation et de discrétisation par éléments finis sont bien respectées.

5.1.1 Contrôles de base

Le modèle développé vise à représenter un système de variables d'état dépendantes dont les comportements sont gouvernés par une même équation scalaire de transport-diffusion à laquelle se greffe un terme puits et sources spécifique. Cela se traduit au niveau de la formulation

éléments finis par un nombre de degrés de liberté par noeud égal au nombre de variables d'état considérées. Pour assembler et solutionner le système d'équations résultant, l'algorithme global doit effectuer une boucle sur ces degrés de liberté.

L'objectif du premier contrôle est de s'assurer que le programme effectue correctement la boucle de résolution sur les degrés de liberté et que le système d'équation est bien construit. Pour cela, on vérifie simplement que pour n variables d'état identiques soumises aux mêmes conditions de simulation, le modèle calcule bien n solutions identiques. Des simulations sont ainsi effectuées dans différentes conditions. Leur description détaillée est toutefois sans intérêt pour le lecteur.

Comme il se doit, on démontre que pour les n variables traitées, le modèle conduit à l'obtention d'une solution unique, et ce, quelque soit le nombre ou le type de variables d'état. Le test permet donc de conclure que la programmation de la boucle sur les variables d'état est correcte. Il s'agit cependant de l'unique conclusion que l'on puisse tirer de ce test.

5.1.2 Test de conformité des éléments en transport-diffusion

La méthode des éléments finis assure une solution approchée qui converge vers la solution exacte lorsque la taille des éléments diminue. L'approximation utilisée doit toutefois respecter les conditions suivantes:

- une base polynomiale complète jusqu'à l'ordre maximal des dérivées impliquées ;
- une continuité entre éléments pour la fonction approchée et ses dérivées.

L'élément est dit conforme lorsque la continuité est assurée en tout point du domaine. Le test décrit ici est spécifiquement conçu pour vérifier la conformité des éléments développés en transport-diffusion. Il est fondé sur un principe de base de l'approximation par éléments finis qui veut que la méthode fournisse une solution exacte lorsque la fonction d'approximation sur chaque élément est constituée d'une base polynomiale complète d'ordre supérieur ou égal à la fonction à reproduire.

Le modèle de transport-diffusion étant discrétisé à partir d'éléments triangulaires linéaires, on doit vérifier qu'il solutionne exactement un problème d'ordre un. Un polynôme d'ordre premier est choisi comme solution exacte et imposé aux noeuds externes :

$$C(x,y) = l + x + y$$

Étant donné cette solution, l'équation de transport-diffusion en régime stationnaire se résume à l'expression suivante:

u+v+QC = 0

Le test consiste à résoudre le problème pour différentes combinaisons de valeurs des vitesses, sollicitations et termes puits et sources sur des maillages déformés. On doit alors vérifier que la solution calculée corresponde à la solution exacte au zéro machine près.

Le test de conformité a été vérifiée par tous les éléments de la librairie de DISPERSIM. Dans toutes ces situations, le modèle reproduit de manière exacte la solution. On démontre ainsi la conformité des éléments développés en transport-diffusion. Encore une fois, la description détaillée et les résultats de ces tests présentent peu d'intérêt et ne sont pas rapportés.

5.1.3 Test de convergence en transport-diffusion

Tout modèle discret introduit inévitablement une certaine erreur d'approximation. Il est toutefois essentiel de s'assurer que l'approximation développée converge, c'est-à-dire que l'erreur diminue avec le raffinement du maillage.

Une approximation par éléments finis est convergente si, pour un domaine Ω discrétisé uniformément avec une maille *h*, la relation suivante est respectée :

$$\left\|e\right\| = \sqrt{\int_{\Omega} \left(u - \overline{u}\right)^2 d\Omega} \le ch^2$$

e : erreur d'approximation;

u : solution exacte;

 \overline{u} : solution élément fini;

c : constante.

La convergence est alors quadratique et pour une dimension de la maille qui tend vers zéro, la pente de la courbe de convergence (ln(|le||)) en fonction de ln(h)) tend au moins vers 2. Notons que cette formulation de la norme sera employée dans la suite du chapitre pour étudier la précision du modèle.

En choisissant comme solution une fonction non linéaire qui ne peut être évaluée exactement par le modèle, une erreur d'approximation est introduite. Le test de convergence consiste à étudier le comportement de cette erreur lorsque le domaine est maillé de plus en plus finement.

La solution exacte choisie ici est une fonction de type exponentiel :

 $C(x,y)=e^{-x-y}$

Le test est effectué pour les six cas présentés au paragraphe 5.1.2. Les conditions suivantes sont respectées :

- domaine décrit par $(x,y) \in [0,1] \times [0,1]$
- maille variant de 0,015625 à 0,5 m
- conditions limites de Dirichlet sur toute la frontière: $\overline{C} = e^{-x \cdot y}$

Ainsi, en régime stationnaire, la formulation non conservative de l'équation de transportdiffusion devient: $-D_{xx}-D_{yy}+u+v+QC=0$

en diffusion pure (u=v=0) nous avons :

 $-D_{xx}-D_{yy}+QC=0$

Le débit Q est évalué en conséquence pour satisfaire l'équation différentielle. Le Tableau 2 résume les taux de convergence calculés avec tous les éléments de la librairie de DISPERSIM. Les résultats démontrent que la convergence est bien au moins quadratique avec un taux de convergence supérieur à 2 quel que soit l'élément utilisé.

- I unicad Z . Taux ac convence pour amercines applications de l'equation de transport-unitasion
--

Problème simulé	Champ de vitesse	Taux de convergence
Diffusion pure	u=v=0	2,968
Convection-diffusion	u=y, v=x	2,968

5.2 Tests de précision en régime stationnaire

Pour un problème donné, la précision de l'approximation est démontrée en comparant la solution calculée à la solution analytique. Un modèle numérique étant conçu pour trouver une solution approchée à un problème qui ne peut être résolu analytiquement, l'identification d'une solution exacte n'est possible que dans certains cas hautement simplifiés. Ainsi, pour évaluer la précision du modèle de transport-diffusion, il est nécessaire de se limiter à des problèmes très simples tel un domaine à géométrie régulière où le champ de vitesse est unidirectionnel et constant. Les paramètres de simulation doivent être entièrement contrôlés.

5.2.1 Convection d'une distribution gaussienne

La convection d'une distribution de concentration gaussienne dans un champ de vitesse circulaire est un test standard qui permet d'évaluer la performance d'un schéma centré en situation de nombre de Peclet élevé, c'est-à-dire lorsque le transport prédomine.

Le test consiste à transporter sur un domaine rectangulaire une distribution de concentration gaussienne imposée sur un segment vertical (Figure 1a). La distribution est décrite par les équations suivantes (Khelifa, 1992):

$$C(x, y) = \cos^2(2\pi\sqrt{x^2 + y^2} + \frac{\pi}{2}) \text{ pour } 0 \le \sqrt{x^2 + y^2} \le 0.5$$
$$C(x, y) = 0 \text{ pour } 0.5 \le \sqrt{x^2 + y^2} \le \infty$$

Tel qu'illustré à la Figure 1a, différentes conditions aux limites peuvent être imposées. Pour les frontières à flux entrant, des conditions de Dirichlet ou de Cauchy sont envisageables. Par contre, sur les frontières à flux sortant, des conditions de Neuman ou de flux diffusif ouvert peuvent être appliquées.

Considérant un régime permanent, un champ de vitesse circulaire et une variable d'état conservative, la convection du profil doit reproduire la cloche tridimensionnelle illustrée à la Figure 1b. Par comparaison des concentrations calculées et attendues, il est possible d'évaluer la perte massique qui résulte du processus de transport.

Le Tableau 3 résume les résultats obtenus. Pour des valeurs de la solution exacte situées entre 0 et 1, on calcule des écarts maximums de l'ordre du millième pour des conditions limites autres que celles de Dirichlet. Pour ce dernier type de conditions, on constate que l'écart est plus de 2 fois supérieur, ce qui démontre la précision moindre qui découle de leur emploi. Dans l'ensemble, des pertes massiques inférieures à 1% sont observées.

Ce test démontre bien la supériorité de la condition de Cauchy sur celle de Dirichlet pour représenter les flux entrant. La comparaison avec les résultats obtenus avec un schéma de Douglas-Wang permet de conclure qu'en situation de convection dominante, l'emploi de conditions limites bien adaptées au problème permet de rendre le schéma centré tout aussi performant qu'un schéma décentré.

Formulation non conservative	Maillage	Conditions aux limites	Erreur absolue maximale	Norme L2 de l'erreur
Élément T3	29x29	Dirichlet	0,035	3,038 10-4
(présente étude)				
		Cauchy-ouvert	0,016	1,392 10-4
Élément T6,	29x29	Dirichlet	0,01	N.D.
schéma de				
Douglas-Wang				
(Khelifa, 1992)				

 Tableau 3 : Comparaison de différents schémas numériques pour la convection d'un profil gaussien dans un champ de vitesse circulaire.



1.00 0.00

b) Solution analytique



5.2.2 Convection d'un front de concentration

La convection unidirectionnelle d'un front de concentration dans un canal rectangulaire est employée ici comme cadre pour la validation des termes puits et sources. Dans des conditions d'écoulement contrôlées, une solution analytique peut être évaluée et il devient possible de vérifier si le modèle représente adéquatement les phénomènes.

Le test proposé consiste à propager dans la direction longitudinale un contaminant dont la concentration C_0 est imposée sur le plan latéral x=0. Le champ de vitesse est uniforme et dirigé selon l'axe x alors que la diffusion longitudinale est négligeable devant le phénomène convectif. Dans ces conditions, les gradients transversaux s'annulent et l'équation de transport est ramenée à la forme suivante:

$$u\frac{\hat{o}C}{\hat{o}x} - \Delta S = 0$$

Tout dépendant de la forme que prend le terme puits et sources, l'équation peut être solutionnée analytiquement pour une ou deux variables d'état. L'exercice de validation est appliqué aux cinétiques associées aux variables suivantes :

- matières en suspension non cohésives ;
- matières en suspension cohésives ;
- coliformes fécaux ;
- métaux ;
- oxygène dissous et DBO.

Dans chacun de ces cas, les conditions de simulation suivantes sont respectées :

- domaine rectangulaire de 5,0 m de long par 1,0 m de large ;
- maillage de 100x10;
- condition limite à la frontière amont: Dirichlet (concentration imposée) ;
- condition limite à la frontière aval et sur les contours: flux diffusif ouvert ;
- champ de vitesse en x : u=1,0 m/s; v=0,0 m/s;
- profondeur H=1,0 m;
- diffusivités : $D_{xx} = 10^{-4} m^2 / s$, $D_{yy} = D_{xy} = D_{yx} = 0$.

Les différents problèmes traités sont discutés dans la thèse de Bédard (1997). Le Tableau 4 fait la synthèse des simulations effectuées et de leurs résultats. Pour chaque cas nous disposons d'une solution analytique pour analyser la solution analytique à l'exception des matières en suspension non cohésives où nous avons fait appel à une méthode de Runge-Kutta pour obtenir la solution de référence.

À l'examen du Tableau 4 on constate que le niveau d'erreur sur tous les éléments de la librairie de DISPERSIM est relativement bas. Pour l'ensemble des tests, le niveau d'erreur en valeur

absolue maximale est inférieur à 10^{-5} ce que nous jugeons être satisfaisant à l'instar de Bédard (1997).

Type d'élément CD2DNC_	Concentration imposée en x=0	Paramètres de simulation	Erreur absolue maximale	Norme L2 de l'erreur
MES	1,0	MES non cohésives d ₅₀ =50 μm	6,620 10 ⁻⁶	7,054 10 ⁻⁸
		$\rho_s=2,5 \ g/cm^3$		
MES	1,0	MES cohésives K _s =0,0002	9,340 10 ⁻¹¹	9,468 10 ⁻¹³
CLF	1,0	$K_d = ln(2) s^{-1}$	7,820 10-6	6,543 10 ⁻⁸
МЕТ	1,0	$w_s = 0,01 \text{ m/s}$ $K_d = 0,0 \text{ s}^{-1}$ $K_p = 100,0$	9,821 10 ⁻⁸	9,438 10 ⁻¹⁰
DBO	С _{оD} =12,0 С _{DBO} =100,0	$K_a = 0,01 \text{ m/s}$ $K_d = 0,01 \text{ s}^{-1}$ $L_s = 0,012 \text{ kg/m}^2/\text{s}$	9,300 10 ⁻⁶	9,447 10 ⁻⁸

Tableau 4 : Résumé des tests de convection d'un front de concentration en régime stationnaire.

5.3 Tests de précision en régime transitoire

5.3.1 Diffusion d'un front de concentration

Le test décrit ci-dessous vise à évaluer la capacité de l'approximation développée à représenter la diffusion et la dégradation d'un contaminant en régime transitoire. Le domaine considéré pour la simulation est un bassin fermé à dimension longitudinale prédominante et à vitesse d'écoulement négligeable. Une concentration C_0 d'un contaminant dissous dégradable est imposée au plan x=0. En l'absence de courant, le contaminant se propage exclusivement par diffusion moléculaire et se dégrade à un taux déterminé par K_d Les variations dans la direction transversale étant négligeables, l'équation de transport-diffusion s'énonce:

$$\frac{\partial C}{\partial t} - D_{xx} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K_d C = 0$$

En posant l'hypothèse d'un domaine semi-infini (longueur >>> largeur) et les conditions initiales et aux limites suivantes:

$$C(x,y,t=0)=0;$$

 $C(0,y,t)=C_0;$
 $C(\infty,y,t)=0;$

Bird et coll. (1960) proposent la solution analytique suivante :

$$C(x, y, t) = \frac{C_0}{2} \left[e^{x \sqrt{\frac{K_d}{D_{xx}}}} + e^{-x \sqrt{\frac{K_d}{D_{xx}}}} \right] erfc(\frac{x}{\sqrt{4D_{xx}t}} - \sqrt{K_d t})$$

où erfc, la fonction erreur complémentaire est donnée par :

$$erfc(\phi) = 1 - erf(\phi) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{\phi} e^{-\xi^{2}} d\xi$$

Un domaine de 5,0 mètres de long par 1,0 mètre de large est considéré. Les contours latéraux sont décrits par une condition limite de Neuman. Puisque l'on ne s'intéresse qu'aux variations suivant l'axe des x, on limite la discrétisation à trois noeuds selon l'axe des y. L'influence du coefficient de dégradation global a été étudié sur un maillage de 200x10 avec un schéma temporel de Crank-Nicholson avec un pas de temps $\Delta t=10s$.

Les conditions aux limites à la frontière aval sont de type flux diffusif ouvert. Le Tableau 5 résultats obtenus pour les deux simulations effectuées. On constate que le coefficient de dégradation global a très peu d'influence (perceptible sur la norme L_2 seulement). Bédard (1997) arrive aux mêmes conclusions en testant non seulement l'influence du coefficient de dégradation mais également celle du pas de temps. Par contre, elle observe que le maillage, la condition limite à l'aval et le coefficient de diffusion influencent de façon importante la précision de la solution numérique.

Tableau 5 : Influence du coefficient de dégradation K_d sur les résultats de la diffusion transitoire d'un front de concentration ($h=0,1m, \Delta t=10s$).

K _d	Erreur absolue maximale	Norme L2 de l'erreur
$0 s^{-1}$	0,107	2,665 10-4
$10^{-4} s^{-1}$	0,107	2,659 10 ⁻⁴

5.3.2 Rotation d'une distribution gaussienne

La version transitoire du test de convection d'une distribution de concentration gaussienne consiste à faire subir à une cloche tridimensionnelle une révolution complète sur le domaine décrit à la Figure 2a. À la suite de cette révolution, la distribution initiale doit normalement être recréée. Ainsi, la solution exacte du problème de transport n'est rien d'autre que l'application des conditions initiales qui sont données par (Bézier, 1990 et Khelifa, 1992):

$$C(x, y, t = 0) = \frac{1}{4} (1 + \cos(\pi \frac{x - \frac{5}{30}}{0,2}))(1 + \cos(\pi \frac{y - \frac{5}{30}}{0,2})) \text{ pour } ((x - \frac{5}{30})^2 + (y + \frac{5}{30})^2) \le 0, 2^2$$

C(x, y, t = 0) = 0 ailleurs

La Figure 2b illustre la distribution attendue pour un cas standard. Pour le champ de vitesse considéré, la période de révolution de 2π secondes est discrétisée en 200 pas de temps. Le problème est résolu avec le schéma de Crank-Nicholson sur un maillage de 30x30. De façon à recréer un phénomène de transport, la valeur du coefficient de diffusion est fixée à 10^{-7} m²/s.

Le Tableau 6 présente les erreurs calculées pour la simulation effectuée. Ces résultats confirment la fiabilité relative du schéma de résolution centré face aux problèmes convectifs

Tableau 6 : Comparaison de différents schémas	numériques pour	la convection transi	toire d'une
distribution gaussienne dans	un champ de vites	se circulaire.	

Formulation non conservative	Conditions aux limites	Erreur absolue maximale	Norme L2 de l'erreur
Élément T3	Cauchy-ouvert	0,045	2,435 10-4
(présente étude)		······································	
Élément T6,			
schéma de	Dirichlet	0,03	N.D.
Douglas-Wang			
(khelifa, 1992)			



a) Conditions de simulation



b) Solution analytique



5.4 Discussion

Les tests effectués à l'intérieur de la phase de validation analytique permettent d'avancer quelques conclusions sur le comportement et la performance du modèle de transport-diffusion. La première série de tests ayant démontré la conformité des algorithmes programmés, la précision du modèle a pu être analysée.

Pour les tests standards que constitue la convection stationnaire et transitoire d'une distribution de concentration gaussienne, les résultats du modèle ont pu être comparés à d'autres approximations. Dans les conditions décrites, le modèle s'est montré tout aussi performant qu'un schéma décentré.

Les tests de propagation d'un front de concentration ont été spécifiquement développés en fonction des particularités du modèle à valider. Pour ces tests, il n'y a pas de comparaison possible des résultats avec d'autres types d'approximations et l'interprétation de l'ordre de grandeur des erreurs est tout à fait arbitraire. Les résultats obtenus pour la convection d'un front de concentration permettent de conclure que le phémonène unidimensionnel stationnaire est conformément représenté par le schéma de résolution. Il en est de même pour l'implantation des cinétiques décrivant les termes puits et sources. Pour l'ensemble des cas étudiés, les concentrations calculées sont conformés aux valeurs attendues. La norme L_2 et l'écart maximum entre les valeurs théoriques et calculées sont faibles dans tous les cas présentés. On retient par contre que les problèmes à variables d'état dépendantes semblent caractérisés par une convergence moins rapide et une influence importante des valeurs initiales.

En régime transitoire, le modèle a été soumis à des épreuves plus rudes qui ont permis d'identifier les facteurs pouvant améliorer la précision de la solution. On en dégage l'importance d'avoir un maillage et des conditions aux limites bien adaptés au problème à représenter. De plus, on constate que la valeur du pas de temps influence la solution d'un problème convectif alors qu'elle a peu d'effet pour un problème exclusivement diffusif.

Suite aux tests réalisés, on conclut que les termes puits et sources sont bien implantés dans l'équation de transport-diffusion et que la résolution à plusieurs variables est bien exécutée. Cependant, afin de s'assurer que les lois de comportement choisies représentent convenablement les phénomènes naturels, il faut envisager de comparer les résultats de simulation à des mesures de terrain ou de laboratoire.

6. TEST D'EFFICACITÉ : APPLICATION AU LAC SAINT-FRANÇOIS

6.1 Situation du lac Saint-François

Le lac Saint-François s'étend sur 60 km de large, 8 km de large en moyenne et 254 km² de superficie. La topographie du domaine est complexe avec des hauts fonds, un réseau entrelacé de chenaux et un chenal de navigation maritime creusé de main d'homme. Les variations de vitesses y sont importantes spécialement dans le chenal de navigation. De plus on compte une abondante végétation aquatique qui peut occuper en fonction des saisons une part importante de la colonne d'eau.

Le traitement des données de terrain a été effectué avec MODELEUR (Secretan et Leclerc, 1998) et l'hydrodynamique particulièrement complexe avec HYDROSIM (Morin *et coll.*, 1998). La quantité de matières en suspension a donc été calculée avec DISPERSIM sur la base du modèle numérique de terrain et de l'hydrodynamique produits par les outils développés. Étant donné l'envergure des simulations les calculs de l'hydrodynamique ont été effectués sur les puissants calculateurs d'Environnement Canada ce qui démontre si besoin que les outils sont conçus pour fonctionner sur différentes plates-formes.

6.2 Scénario hydrodynamique de référence

Le lac Saint-François est alimenté par le barrage de Moses Saunders. On dénombre 5 tributaires à savoir Grasse, Raquette, Saint-Régis, Aux-Saumons et Raisin. En plus du canal de Beauharnois on dénombre 3 sorties à Coteau à savoir Coteau I et III et Chenal Perdu. Le débit retenu correspond à scénario moyen annuel avec une valeur de 7620 m³/s à l'amont et 7070m³/s à l'entrée du canal de Beauharnois en aval, la balance passe par Coteau I et III et Chenal Perdu.

6.3 Maillage exploité

Le domaine de simulation choisi sur le lac Saint-François commence en amont à hauteur de la ville de Summerstown et va se terminer en aval à l'entrée du canal de Beauharnois. Le domaine est dicrétisé avec 96405 noeuds et 187756 éléments triangulaires, il s'agit du maillage hydrodynamique dont l'élément de base T6L (triangle à six noeuds) a été scindé en quatre éléments triangulaires T3 (triangle à 3 noeuds) pour les besoins du modèle de transport-diffusion.

6.4 Conditions initiales et aux limites appliquées

Pour tous les test effectués sur le modèle du lac Saint-François nous avons exploité le même jeu de conditions initiales et aux limites.

C'est un champ de concentration nul que nous avons choisi pour initialiser la solution. Remarquons que dans le cas linéaire, avec une méthode de résolution directe (ILU(∞), GMRES(1)) la solution initiale n'a aucune influence. Le choix de la solution initiale est important si le problème à résolute est nonlinéaire ou encore si la méthode de résolution est itérative, typiquement la méthode GMRES(100) avec un préconditionnement ILU(0).

Sur la frontière amont, une condition de Dirichlet de concentration constante a été imposée. Sur les frontières fermées, une condition Neuman a été appliquée. En aval, une condition de sortie libre a été prescrite.

6.5 Performances de la résolution : cas linéaire

Les éléments testés sont les éléments CD2DNC_CCN, CD2DNC_CLF et CD2DNC_MES, chaque fois pour une matrice de préconditionnement ILU(0) et pour une matrice de préconditionnement ILU(∞). Les coefficients de pondération des diffusivités utilisés sont :

- diffusivités moléculaire : lm^2/s ;
- coefficient de pondération de la diffusivité de fond :1,0 ;
- coefficient de pondération de la diffusivité horizontale : 10^{-6} ;
- coefficient de pondération de la diffusivité longitudinale :1,0.

C'est sur un ordinateur personnel (PC) Pentium 2 MMX doté de 192 Meg de mémoire vive (RAM) et d'un processeur à 266 MHz d'Intel, que les calculs ont été effectués avec une norme de convergence fixée à 10^{-6} . Pour tous les cas testés, les informations relatives à la résolution (temps de calcul, espace mémoire, etc...) sont rassemblés dans les Tableau 7, Tableau 8 et Tableau 9.

6.5.1 Élément CD2DNC_CCN

	Espace mémoire (Meg)	Temps (jr :hr :min :sc)	Nombre de redémarrages	Normes de convergence (∆U et GMRES)	Norme résidu
ILU(0), GMRES(100)	117	00 :04 :25 :26	86	7,14521 10 ⁻⁷ 6.58336 10 ⁻⁹	1,00436 10 ⁻⁸
ILU(∞), GMRES(1)	261	00 :01 :36 :27	2	$8.10019 \ 10^{-13} \\ 1.99875 \ 10^{-26}$	6.58544 10 ⁻¹⁵

Tableau 7 : Test d'efficacité de la dispersion d'un contaminant conservatif	f dans le lac Saint-
François	

6.5.2 Élément CD2DNC_CLF

Le coefficient de dégradation K_d choisi est égal à $10^4 s^{-1}$.

	Espace mémoire (Meg)	Temps (jr :hr :min :sc)	Nombre de redémarrages	Normes de convergence (∆U et GMRES)	Norme résidu
ILU(0), GMRES(100)	117	00 :00 :10 :45	3	6,13327 10 ⁻⁸ 2.35478 10 ⁻¹¹	4,06594 10 ⁻¹²
ILU(∞), GMRES(1)	261	00 :01 :35 :26	2	7,39918 10 ⁻⁷ 1.25998 10 ⁻⁹	1,97019 10 ⁻¹¹

Tablaau 9 - Taat d'affiagaita da	a dioporaion dae adutormee ta	againt dans la las Saint-Francai
Tableau o : rest u enicacile de		ECAUX VALIS IE IAC SAILLEFTALICUS

6.5.3 Élément CD2DNC_MES

Le terme puits a été linéarisé en imposant une vitesse de sédimentation w_s constante égale à 5.10 ${}^5m/s$. Les contraintes de cisaillement critique utilisées sont : $\tau_e = 100 kg/m/s^2$, $\tau_d = 0.24 kg/m/s^2$. Le terme source a été neutralisé en attribuant une valeur nulle au coefficient d'érosion.

	Espace mémoire (Meg)	Temps (jr :hr :mn :sc)	Nombre de redémarrages	Normes de convergence (∆U et GMRES)	Norme résidu
ILU(0), GMRES(100)	121	00 :00 :32 :54	9	6,83074 10 ⁻⁸ 5.66866 10 ⁻¹⁰	6,43647 10 ⁻¹¹
ILU(∞), GMRES(1)	265	00 :01 :59 :02	2	4.67418 10 ⁻⁷ 1.06923 10 ⁻¹⁰	2.26285 10 ⁻¹⁰

Tableau 9 : Test d'efficacité de la dispersion des matières solides en suspension dans le lac Saint-François

6.6 Observations

Tout au long du développement de la version actuelle de DISPERSIM nous avons toujours eu le souci d'améliorer les performances de la méthode de résolution. Au fur et à mesure du développement de l'élément CD2DNC_CLF, entre la version initiale et la version finale nous avons enregistré sur le lac Saint-François une décroissance significative des temps de résolution : 71, 20 et finalement 10 minutes.

Il est important de souligner que les résolutions en méthode directe (ILU(∞), GMRES(1)) utilisent la mémoire virtuelle sur disque car la mémoire vive (RAM) est insuffisante (192 Meg disponibles versus plus de 260 Meg requis). Ceci ralentit considérablement la vitesse d'exécution. Sur une machine équipée de plus de mémoire, ILU(∞) devient généralement très compétitif, mais l'attrait de la méthode ILU(0) est justement de pouvoir tourner sur des "petites" machines.

Les améliorations apportées à la méthode de résolution de DISPERSIM en configuration de projet réel d'envergure sont indéniables. Dans la version précédente du logiciel, le cas du lac Saint-François, qui compte près de 100 000 inconnues, était réellement problématique pour simuler le transport de matières solides en suspension. On notait des temps de calcul sur les puissants calculateurs d'Environnement Canada de l'ordre de la semaine ! Dans la version actuelle, on arrive à des performance beaucoup plus raisonnables : entre 32 et 120 minutes

7. INSTALLATION DES LOGICIELS

Sur le CD de distribution on retrouve les trois répertoires suivants :

- DocumentsPS qui contient une version PostScript des différents guides d'utilisation des logiciels
- ExemplesDispersim qui contient les exemples de DISPERSIM, cas tests et simulation sur la Rivière à la Truite
- Modeleur1.0a06.2000-03-28 qui est le répertoire de distribution des logiciels

Pour installer les logiciels, accédez au médium d'installation et démarrez le programme setup.exe dans le répertoire Modeleur1.0a06.2000-03-28. L'installateur va démarrer et il vous guidera tout au long de l'installation des logiciels. Pour plus d'information sur la procédure d'installation et d'enregistrement des logiciels reportez vous aux fichiers xxx lisezmoi.txt, enregistrement_logiciels.txt ainsi qu'aux guides d'utilisation de MODELEUR.

Si vous le désirez, vous pouvez copier le répertoire ExemplesDispersim dans le répertoire d'installation. Le fichier exemples_lisezmoi.txt du répertoire ExemplesDispersim contient les instructions pour lancer les tests.

8. CONCLUSION

8.1 Les livrables

Parmi les livrables, nous proposons :

- 1'ensemble MODELEUR, DISPERSIM, HABIOSIM et HYDROSIM gravés sur CD;
- un jeu d'exemples prêts à tourner pour DISPERSIM ;
- la documentation dont le présent rapport ;
- une licence d'utilisation des outils valide pour une durée d'une année.

La documentation comprend un guide d'utilisation et un manuel scientifique. Le guide d'utilisation reprend la même structure que celui d'HYDROSIM. Plutôt qu'un guide d'apprentissage, c'est un guide qui vise à répondre aux questions de l'utilisateur. Il est complété par un manuel scientifique qui justifie les choix des cinétiques.

8.2 Les potentialités du solveur

Les tests d'efficacités sur le lac Saint-François ont montré une nette amélioration de la méthode de résolution de DISPERSIM dans sa version actuelle. Pour la plupart des éléments de la librairie de DISPERSIM, la formulation a été linéarisée de sorte que lorsque l'espace en mémoire virtuelle l'autorise on peut effectuer une résolution directe (ILU(∞), GMRES(1)). Pour l'élément CD2DNC_MES, la nonlinéarité est causée par la variabilité de la vitesse de sédimentation et dans ce cas il vaut mieux utiliser un préconditonnement ILU(0) avec GMRES(m), le nombre d'itérations m doit être déterminé empiriquement. Sur le lac Saint-François il fallait utiliser au moins 100 itérations pour faire converger le modèle en ILU(0). Les temps de résolution enregistrés ont varié dans l'intervalle 10 à 265 minutes.

8.3 Une interface entre HYDROSIM et DISPERSIM

Aucune interface usager n'a encore été déterminée pour DISPERSIM. Toutefois, pour les besoins immédiats il existe un utilitaire qui permet à partir des données d'entrée et des résultats de HYDROSIM de construire les données d'entrée de DISPERSIM. Les résultats produits par DISPERSIM peuvent être importés sur MODELEUR pour les fins de visualisation et d'analyse.

9. **BIBLIOGRAPHIE**

- Bédard, S. (1997). "Développement d'un modèle de transport-diffusion applicable aux rejets urbains de temps de pluie". Mémoire de maîtrise INRS-Eau, 191 pages, mars.
- Bézier, F. (1990), "Problèmes de transport diffusion par éléments finis", Thèse de doctorat, Université de Technologie de Compiègne, avril.
- Bird, B.R., Stewart, W.E. & Lightfoot E.N. (1960). "Transport phenomena." John Wiley and Sons, New York, 780 pages.
- Fisher H.B., List, E.J., Koh, R.C.Y., Imberger, J. & Brooks, N.H. (1979). "Mixing in inland and coastal waters." Academic Press, Inc.
- Frenette, R. (1996), "Modélisation tridimentionnelle par les éléments finis du transport des sédiments dans les cours d'eau." Thèse de doctorat. Faculté de sciences et génie, Université Laval, juin.
- Heniche, M., Secretan, Y. & Leclerc M. (2000). "DISPERSIM1.0a06: guide d'utilisation." Document INRS-Eau R558-G1, mars.
- Heniche, M., Secretan, Y. & Leclerc M. (1999). "HYDROSIM : guide d'utilisation. Document HYDROSIM1.0a06." Document INRS-Eau R482-G2, janvier.
- Heniche, M., Secretan, Y. & Leclerc M. (1998). "Efficient ILU preconditioning and inexact-Newton-gmres to solve the 2-D steady shallow water equations." Rapport scientifique INRS-Eau, R482-NT1, 53 pages, mars.
- Khelifa, A. (1992). "Nouvelle approche en éléments finis pour la modélisationm du phénomène de transport permanent et non permanent." Mémoire de maîtrise. Faculté de sciences et génie, Université Laval, 127 pages.
- Morin, J., Boudreau, P., Cantin, J. F., Secretan, Y., Heniche, M. & Leclerc, M. (1998). "Atlas des courants du fleuve Saint-Laurent Lac Saint-François". En collaboration avec Environnement Canada (Environnement atmosphérique).
- Padilla, F., Secretan, Y., & Leclerc, M. (1997). "On open boundaries in the finite element approximation of two-dimensional advection-diffusion flows". Int. J. Num. Meth. Eng. 40(13).

Secretan, Y., & Leclerc, M. (1998). "MODELEUR : a 2D hydrodynamic G.I.S. and simulation software". Dans le compte rendu de la conférence IAHR Hydroinformatics 98, Copenhague, Danemark, août.

10. ANNEXE : PAGE WWW DE COMPILATION DES TESTS DE DISPERSIM

Dispersim - Compilation des tests Thu Mar 30 07:05:57 2000

Thu Mar 30 07:01:46 2000 élémentBase\conditions limites\cauchy ok élémentBase\conditions limites\dirichlet Thu Mar 30 07:01:49 2000 ok élémentBase\conditions limites\découvrement Thu Mar 30 07:01:52 2000 ok Thu Mar 30 07:01:55 2000 élémentBase\conditions limites\neuman ok élémentBase\conditions limites\ouvert Thu Mar 30 07:01:58 2000 ok élémentBase\conditions limites\piscine lineaireX dirichlet neumann Thu Mar 30 07:02:01 2000 ok élémentBase\conditions limites\piscine lineaireY dirichlet neumann Thu Mar 30 07:02:04 2000 ok élémentBase\convection\canalX front dirichletOuvert Thu Mar 30 07:02:17 2000 ok Thu Mar 30 07:02:21 2000 élémentBase\convection\canalX front dirichletOuvert 100X10 ok élémentBase\convection\circulaire gaussien dirichlet Thu Mar 30 07:02:24 2000 ok Thu Mar 30 07:02:26 2000 élémentBase\convection\circulaire gaussien ouvertcauchy ok Thu Mar 30 07:02:42 2000 élémentBase\convection diffusion\convYX expXY dirichlet ok Thu Mar 30 07:02:44 2000 élémentBase\convection diffusion\convYX lineaireXY dirichlet ok Thu Mar 30 07:02:47 2000 élémentBase\convection diffusion\couetteX lineaireY dirichlet ok élémentBase\convection diffusion\couetteY lineaireX dirichlet Thu Mar 30 07:02:50 2000 ok Thu Mar 30 07:02:54 2000 élémentBase\convergence newton GMRES\convYX expXY dirichlet ok Thu Mar 30 07:02:57 2000 élémentBase\convergence newton GMRES\piscine expXY dirichlet ok Thu Mar 30 07:03:01 2000 élémentBase\diffusion\piscine const dirichlet ok Thu Mar 30 07:03:15 2000 élémentBase\diffusion\piscine expXY dirichlet ok Thu Mar 30 07:03:18 2000 élémentBase\diffusion\piscine lineaireXY dirichlet ok Thu Mar 30 07:03:21 2000 élémentBase\diffusion\piscine lineaireX dirichlet ok Thu Mar 30 07:03:24 2000 élémentBase\diffusion\piscine lineaireY dirichlet ok Thu Mar 30 07:03:28 2000 élémentBase\diffusivité\piscine expXY dirichlet 0 05 05 ok élémentBase\diffusivité\piscine expXY dirichlet 0 0 1 Thu Mar 30 07:03:31 2000 ok Thu Mar 30 07:03:34 2000 élémentBase\diffusivité\piscine expXY dirichlet 0 1 0 ok

Thu Mar 30 07:03:37 2000 élémentBase\diffusivité\piscine expXY dirichlet 1 0 0 ok élémentBase\transitoire\gaussien ouvertCauchy Thu Mar 30 07:03:41 2000 ok Thu Mar 30 07:03:44 2000 élémentBase\transitoire\piscine front dirichletOuvert ok élémentsSpécialisés\CLF\canalX front dirichletOuvert Thu Mar 30 07:03:58 2000 ok élémentsSpécialisés\CLF\canalX front dirichletOuvert 100x10 Thu Mar 30 07:04:01 2000 ok élémentsSpécialisés\CLF\conformeBase\convYX expXY dirichlet Thu Mar 30 07:04:04 2000 ok élémentsSpécialisés\CLF\conformeBase\piscine expXY dirichlet ok Thu Mar 30 07:04:08 2000 Thu Mar 30 07:04:11 2000 élémentsSpécialisés\CLF\transitoire piscine front dirichletOuvert ok élémentsSpécialisés\DBO\canalX front dirichletOuvert ok Thu Mar 30 07:04:26 2000 Thu Mar 30 07:04:29 2000 élémentsSpécialisés\DBO\canalX front dirichletOuvert 100x10 ok Thu Mar 30 07:04:33 2000 élémentsSpécialisés\DBO\conformeBase\convYX expXY dirichlet ok Thu Mar 30 07:04:36 2000 élémentsSpécialisés\DBO\conformeBase\piscine expXY dirichlet ok Thu Mar 30 07:05:14 2000 élémentsSpécialisés\MES\conformeBase\convYX expXY dirichlet ok élémentsSpécialisés\MES\conformeBase\piscine expXY dirichlet Thu Mar 30 07:05:17 2000 ok élémentsSpécialisés\MES\MES cohésives\canalX front dirichletOuvert ok Thu Mar 30 07:04:51 2000 élémentsSpécialisés\MES\MES cohésives\canalX front dirichletOuvert 100x10 Thu Mar 30 07:04:54 2000 ok élémentsSpécialisés\MES\MES non cohésives\canalX front dirichletOuvert ok Thu Mar 30 07:05:07 2000 élémentsSpécialisés\MES\MES non cohésives\canalX front dirichletOuvert 100x10 Thu Mar 30 07:05:10 2000 ok élémentsSpécialisés\MET\canalX front dirichletOuvert Thu Mar 30 07:05:30 2000 ok élémentsSpécialisés\MET\canalX front dirichletOuvert 100x10 Thu Mar 30 07:05:33 2000 ok Thu Mar 30 07:05:37 2000 élémentsSpécialisés\MET\conformeBase\convYX expXY dirichlet ok Thu Mar 30 07:05:40 2000 élémentsSpécialisés\MET\conformeBase\piscine expXY dirichlet ok élémentsSpécialisés\TOX\conformeBase\convYX expXY dirichlet Thu Mar 30 07:05:45 2000 ok élémentsSpécialisés\TOX\conformeBase\piscine expXY dirichlet Thu Mar 30 07:05:48 2000 ok Thu Mar 30 07:05:52 2000 élémentsSpécialisés\TST\conformeBase\convYX expXY dirichlet ok élémentsSpécialisés\TST\conformeBase\piscine expXY dirichlet Thu Mar 30 07:05:56 2000 ok

2 of 15

élémentBase\conditions_limites\cauchy

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.9465534436810320d-017 4.4408920985006260d-016
target tol= 0.0000000000000 1.000000000000d-016
test=ok

élémentBase\conditions_limites\dirichlet

élémentBase\conditions_limites\découvrement

élémentBase\conditions limites\neuman

élémentBase\conditions_limites\ouvert

élémentBase\conditions_limites\piscine_lineaireX_dirichlet_neumann

élémentBase\conditions_limites\piscine_lineaireY_dirichlet_neumann

élémentBase\convection\canalX_front_dirichletOuvert

del, errl2, errmax =	0.50000000000000000	0.00000000000000000	0.00000000000000000			
del, errl2, errmax =	0.25000000000000000	9.7598644614275860d-017	1.1102230246251570d-015			
del, errl2, errmax =	0.12500000000000000	4.5459175386359850d-018	2.2204460492503130d-016			
del, errl2, errmax =	0.0625000000000000	0.00000000000000000	0.00000000000000000			
del, errl2, errmax =	0.0312500000000000	0.00000000000000000	0.0000000000000000			
del, errl2, errmax =	0.0166666666666666	0.00000000000000000	0.00000000000000000			
del, errl2, errmax =	0.0156250000000000	0.00000000000000000	0.00000000000000000			
pente= 1.0000000000000d+123						
target min= 1.9990	00000000000					
test=ok	2 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·					

élémentBase\convection\canalX_front_dirichletOuvert_100X10

élémentBase\convection\circulaire_gaussien_dirichlet

del, errl2, errmax = 0.0357142857142857 3.0384766833449930d-004
target max= 4.0000000000000d-004
test=ok

0.0349277707541808

élémentBase\convection\circulaire_gaussien_ouvertcauchy

del, errl2, errmax = 0.0357142857142857 1.3923595282540350d-004 0.0157046745286545
target max= 1.4000000000000d-004
test=ok

élémentBase\convection_diffusion\convYX_expXY_dirichlet

del,	errl2,	errmax	= .	0.500000000000000000	0.0005218360642825	0.0046965245785427
del,	errl2,	errmax	=	0.25000000000000000	1.1321161965918430d-004	0.0012443291552209
del,	errl2,	errmax	=	0.1250000000000000	1.8014611184932140d-005	3.2158788214980970d-004
del,	errl2,	errmax	=	0.06250000000000000	2.5402929952791200d-006	8.2127565970702140d-005
del,	errl2,	errmax	=	0.0312500000000000	3.3756105064884390d-007	2.0556866411614030d-005
del,	errl2,	errmax	E	0.020833333333333333	1.0209653107499270d-007	9.1412459986006670d-006
del,	errl2,	errmax	=	0.016666666666666	5.2706748012401600d-008	5.8518849422317660d-006
del,	errl2,	errmax	=	0.0156250000000000	4.3518858843361690d-008	5.1445993844989600d-006
pente	5 =	2.9679	98112160	29760		
targe	et min=	1	L.999000	Ó00000000		
test	=ok					

élémentBase\convection_diffusion\convYX_lineaireXY_dirichlet

test=ok

élémentBase\convection_diffusion\couetteX_lineaireY_dirichlet

élémentBase\convection_diffusion\couetteY_lineaireX_dirichlet

élémentBase\convergence_newton_GMRES\convYX_expXY_dirichlet

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8014611184932330d-005 3.2158788214980970d-004
target tol= 1.8014611184932640d-005 1.000000000000000d-015
test=ok

élémentBase\convergence newton GMRES\piscine expXY dirichlet

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8673846254404500d-005 3.3724034772236730d-004
target tol= 1.8673846254404500d-005 1.00000000000000d-015
test=ok

élémentBase\diffusion\piscine_const_dirichlet

élémentBase\diffusion\piscine_expXY_dirichlet

del,	errl2,	errmax =	0.50000000000000000	0.0005388241493625	0.0048494173442629
del,	err12,	errmax =	0.2500000000000000	1.1726981977092900d-004	0.0012863097532356
del,	errl2,	errmax =	0.1250000000000000	1.8673846254404500d-005	3.3724034772236730d-004
del,	errl2,	errmax =	0.0625000000000000	2.6337215229708520d-006	8.5724367441974980d-005
del,	errl2,	errmax =	0.0312500000000000	3.4999186364958490d-007	2.1489675590402600d-005
del,	errl2,	errmax =	0.02083333333333333	1.0585716379878560d-007	9.5629525599938430d-006
del,	errl2,	errmax =	0.016666666666666	5.4648285518751690d-008	6.1207374301153190d-006
del,	errl2,	errmax =	0.0156250000000000	4.5121969286337360d-008	5.3793291174830670d-006
pente	∋= .	2.96797303315	54320		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
targe	∍t min=	1.999000	0000000000		
test:	=ok				

élémentBase\diffusion\piscine_lineaireXY_dirichlet

élémentBase\diffusion\piscine_lineaireX_dirichlet

•/

7 of 15

élémentBase\diffusion\piscine lineaireY_dirichlet

0.00000000000000000

élémentBase\diffusivité\piscine_expXY_dirichlet_0_05_05

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8673846254404500d-005 3.3724034772236730d-004
target tol= 1.8673846254404500d-005 1.0000000000000d-015
test=ok

élémentBase\diffusivité\piscine_expXY_dirichlet_0_0_1

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8673846254404500d-005 3.3724034772236730d-004
target tol= 1.8673846254404500d-005 1.00000000000000d-015
test=ok

élémentBase\diffusivité\piscine_expXY_dirichlet_0_1_0

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8673846254404500d-005 3.3724034772236730d-004
target tol= 1.8673846254404500d-005 1.00000000000000d-015
test=ok

élémentBase\diffusivité\piscine_expXY_dirichlet_1_0_0

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8673846254404500d-005 3.3724034772236730d-004
target tol= 1.8673846254404500d-005 1.0000000000000d-015
test=ok

élémentBase\transitoire\gaussien ouvertCauchy

élémentBase\transitoire\piscine_front_dirichletOuvert

del, errl2, errmax = 0.1000000000000 2.6651386095931890d-004 0.1070556478586850
target tol= 2.6651386095931890d-004 1.00000000000000d-018
test=ok

élémentsSpécialisés\CLF\canalX_front_dirichletOuvert

del,	errl2,	errmax =	0.50000000000000000	0.0072783170175167	0.0468660881144838
del,	err12,	errmax =	0.25000000000000000	0.0005243224409108	0.0060064604930656
del,	errl2,	errmax =	0.12500000000000000	4.9758986650816120d-005	0.0011860783648777
del,	errl2,	errmax =	0.0625000000000000	5.3204439981426390d-006	2.9338867723893020d-004
del,	errl2,	errmax =	0.0312500000000000	6.3164044128640230d-007	7.4023509952017560d-005
del,	errl2,	errmax =	0.0166666666666666	9.4810128080052820d-008	2.1436996685463010d-005
del,	errl2,	errmax =	0.0156250000000000	7.8048149543524610d-008	1.8853088793943650d-005
pente)= _	3.014483	4175842860		
targe	et min=	1.9	9900000000000		
test=	ok		٠		

élémentsSpécialisés\CLF\canalX_front_dirichletOuvert_100x10

del, errl2, errmax = 0.1000000000000 6.5433854806933340d-008 7.8198454636288490d-006
target tol= 6.5433854806933340d-008 1.000000000000d-022
test=ok

0.0448123149941078

élémentsSpécialisés\CLF\conformeBase\convYX_expXY_dirichlet

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8014611184932140d-005 3.2158788214980970d-004
target tol= 1.8014611184932640d-005 1.00000000000000d-015
test=ok

élémentsSpécialisés\CLF\conformeBase\piscine_expXY_dirichlet

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8673846254404500d-005 3.3724034772236730d-004
target tol= 1.8673846254404500d-005 1.00000000000000d-015
test=ok

élémentsSpécialisés\CLF\transitoire_piscine_front_dirichletOuvert

del, errl2, errmax = 0.1000000000000 2.6593177213331510d-004 0.1
target tol= 2.6593177213331510d-004 1.0000000000000d-018
test=ok

0.1068823150848099

élémentsSpécialisés\DBO\canalX_front_dirichletOuvert

del,	errl2,	errmax =	2 0.50000000000000000	0.0031631810622410	0.0143544026695110
del,	errl2,	errmax =	0.25000000000000000	4.3889058980057630d-004	0.0054001201242500
del,	errl2,	errmax =	0.12500000000000000	5.3826646316388780d-005	0.0011504966574023
del,	errl2,	errmax =	0.06250000000000000	7.0289585186344880d-006	3.0562091684771530d-004
del,	errl2,	errmax =	0.0312500000000000	9.1589928953133290d-007	7.3986817156423970d-005
del,	errl2,	errmax =	0.0166666666666666	1.3901847467997690d-007	2.0605253723715580d-005
del,	errl2,	errmax =	0.0156250000000000	1.1485098107524520d-007	1.9178197860014730d-005
pente	5=	2.959029134	3780620		
targe	et min=	1.9990	00000000000		
	•				

élémentsSpécialisés\DBO\canalX_front_dirichletOuvert_100x10

del, errl2, errmax = 0.10000000000000 9.4471802677064570d-008 9.2897517731671540d-006
target tol= 9.4471802677064570d-008 1.00000000000000d-022
test=ok

élémentsSpécialisés\DBO\conformeBase\convYX_expXY_dirichlet

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8014611184932150d-005 3.2158788214980970d-004
target tol= 1.8014611184932640d-005 1.000000000000000d-015
test=ok

élémentsSpécialisés\DBO\conformeBase\piscine_expXY_dirichlet

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8673846254404500d-005 3.3724034772236730d-004
target tol= 1.8673846254404500d-005 1.00000000000000d-015
test=ok

élémentsSpécialisés\MES\conformeBase\convYX expXY dirichlet

```
del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8014611184932140d-005 3.2158788214980970d-004
target tol= 1.8014611184932640d-005 1.000000000000000d-015
test=ok
```

élémentsSpécialisés\MES\conformeBase\piscine_expXY_dirichlet

del, errl2, errmax = 0.1250000000000 1.8673846254404500d-005 3.3724034772236730d-004
target tol= 1.8673846254404500d-005 1.0000000000000d-015
test=ok

élémentsSpécialisés\MES\MES cohésives\canalX front dirichletOuvert

del,	errl2,	errmax =	0.5000000000000000	3.2222255176754240d-008	1.4507247081407830d-007
del,	errl2,	errmax =	0.25000000000000000	4.4124374686508500d-009	5.4403270222103120d-008
del,	errl2,	errmax =	0.12500000000000000	5.3930101932442760d-010	1.1504897146075170d-008
del,	errl2,	errmax =	0.0625000000000000	7.0435223108399980d-011	3.0777530524161990d-009
del,	errl2,	errmax =	0.0312500000000000	9.1873655104221450d-012	7.4402661809358510d-010
del,	errl2,	errmax =	0.0166666666666666	1.3941297530816840d-012	2.0695178903906710d-010
del,	errl2,	errmax =	0.0156250000000000	1.1519128012490710d-012	1.9288692865160330d-010
pente)= _	2.957094744	0338070		
target min=		1.9990	00000000000	•	
test=	=ok				

élémentsSpécialisés\MES\MES_cohésives\canalX_front_dirichletOuvert_100x10

del, errl2, errmax = 0.1000000000000 9.4677714650653910d-013 9.3399066258825770d-011
target tol= 9.4677714650653910d-013 1.000000000000000d-022
test=ok

élémentsSpécialisés\MES\MES non cohésives\canalX front dirichletOuvert

del,	errl2,	errmax	=	0.500000000000000	0.0020631497567497	0.0095455691112740	
del,	errl2,	errmax	=	0.2500000000000000	3.1907620159593740d-004	0.0035577527743015	
del,	errl2,	errmax	=	0.1250000000000000	4.0633625171258480d-005	0.0008387094922724	
del,	errl2,	errmax	=	0.0625000000000000	5.2773601654349050d-006	2.0738505618567160d-004	
del,	errl2,	errmax	=	0.0312500000000000	6.7840198771765090d-007	5.2431894258520020d-005	
del,	errl2,	errmax	= .	0.016666666666666	1.0311110097427310d-007	1.5074201274556390d-005	
del,	errl2,	errmax	=	0.0156250000000000	8.5071014766130190d-008	1.3288652905729670d-005	
pente=		2.9799362959063820					
target min=		1.999000000000000			• .		
test=ok							

élémentsSpécialisés\MES\MES_non_cohésives\canalX_front_dirichletOuvert_100x10

del, errl2, errmax = 0.10000000000000 7.0537584325751610d-008 6.6201332428184050d-006
target tol= 7.0537584325751610d-008 1.0000000000000d-022
test=ok

élémentsSpécialisés\MET\canalX front_dirichletOuvert

del,	errl2,	errmax =	0.50000000000000000	3.1601679545594210d-005	1.4340269828427840d-004
del,	errl2,	errmax =	0.2500000000000000	4.3846161290350770d-006	5.3948689799909740d-005
del,	errl2,	errmax =	0.1250000000000000	5.3773476055559110d-007	1.1493631577819130d-005
del,	errl2,	errmax =	0.0625000000000000	7.0220057842825200d-008	3.0532080536049830d-006
del,	errl2,	errmax =	0.0312500000000000	9.1499237642067120d-009	7.3914090292781510d-007
del,	errl2,	errmax =	0.0166666666666666	1.3888069828573590d-009	2.0584781690313750d-007
del,	errl2,	errmax =	0.0156250000000000	1.1473717447056960d-009	1.9159301911653160d-007
pente=		2.95902667334	24300		
target min=		1.999000	0000000000		
test=ok					

élémentsSpécialisés\MET\canalX_front_dirichletOuvert_100x10

del, errl2, errmax = 0.1000000000000 9.4378575343017390d-010 9.2805969575948670d-008
target tol= 9.4378575343017390d-010 1.0000000000000d-022
test=ok

élémentsSpécialisés\MET\conformeBase\convYX_expXY_dirichlet

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8014611184932140d-005 3.2158788214980970d-004
target tol= 1.8014611184932640d-005 1.00000000000000d-015
test=ok

élémentsSpécialisés\MET\conformeBase\piscine_expXY_dirichlet

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8673846254404500d-005 3.3724034772236730d-004
target tol= 1.8673846254404500d-005 1.00000000000000d-015
test=ok

élémentsSpécialisés\TOX\conformeBase\convYX_expXY_dirichlet

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8014611184932140d-005 3.2158788214980970d-004
target tol= 1.8014611184932640d-005 1.0000000000000000d-015
test=ok

élémentsSpécialisés\TOX\conformeBase\piscine_expXY_dirichlet

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8673846254404500d-005 3.3724034772236730d-004
target tol= 1.8673846254404500d-005 1.00000000000000d-015
test=ok

élémentsSpécialisés\TST\conformeBase\convYX_expXY dirichlet

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8014611184932940d-005 3.2158788214980970d-004
target tol= 1.8014611184932640d-005 1.000000000000000d-015
test=ok

élémentsSpécialisés\TST\conformeBase\piscine_expXY_dirichlet

del, errl2, errmax = 0.12500000000000 1.8673846254404510d-005 3.3724034772236730d-004
target tol= 1.8673846254404500d-005 1.00000000000000d-015
test=ok

٠,