



UNIVERSITE MARIEN NGOUABI
ECOLE NATIONALE SUPERIEURE
POLYTECHNIQUE
CHAIRE UNESCO EN SCIENCES
DE L'INGENIEUR



Année : 2015 - 2016

N° d'ordre : 004/2015-2016/MRMEI/CUSI/ENSP

MEMOIRE

Pour l'obtention du diplôme de Master

Mention : Sciences de l'Ingénieur

Parcours : Mécanique, Énergétique et Ingénierie

Spécialité /Option : Mécanique et Ingénierie

Présenté et Soutenu publiquement

Le 17 décembre 2016

par

BAKEKOLO Joram Divene Fransther

Titulaire du Diplôme de Master de Mathématiques

TITRE

**MODELISATION DE LA DIFFUSION D'UN POLLUANT
DANS UN RESERVOIR EN BETON EN MILIEU SATURE**

DIRECTEUR DE MEMOIRE

TATHY Christian Maître de Conférences, ENS/UMNG, Congo

Jury

Président : **MABIALA Bernard**, Maître de Conférences, ENSP/UMNG, Congo

Membres : **BATCHI Macaire**, Maître de Conférences, FST/UMNG, Congo

MALANDA Narcisse, Maître-Assistant, ENSP/UMNG, Congo

TATHY Christian Maître de Conférences, ENS/UMNG, Congo



Dédicaces

Je dédis ce document à

★ Mon défunt père François BAKEKOLO qui a vu débuté ce travail mais touchant à sa fin n'a pas vu présenter et soutenir, car la nature et son maître ont décidé autrement. Ce fut une période difficile, je te suis profondément reconnaissant pour celui que je suis devenu, grâce à toi et ton éducation. Une chose est sûre tu restera à jamais dans mon cœur.

★ Ma mère Esther LANDOU la plus merveilleuse des femmes, la plus attentif et présente des mamans. Merci c'est un mot trop simple, ce que je souhaiterai exprimer est au dessus de cela

★ Mes frères et sœurs Hadéoda BAKEKOLO, Ananias BAKEKOLO, Béni BAKEKOLO, Sylvia LOUSSABO, Je suis à la fois touché et reconnaissant pour l'aide et le soutien que vous m'avez apporté, je ne pourrai jamais vous remercier assez.

Mon grand père NZITOUKOULOU DAVID, ma Blonde NZITOUKOULOU, ma tante Aimé NKOUSSOU l'aide que vous m'avez accordé à ce moment si particulier de ma vie est un véritable cadeau.

★ Mes collègues du laboratoire de Mécanique Energétique et Ingénierie jusqu'aux laboratoire de Génie de Procédé Industriel en passant par ceux d'Electronique et Ingénierie Moléculaire notamment :BIBI, Bonheur, Gildas, KANI vanelli, MEYA Joachna, TSIBA, Ana, Catry, Fleurane, Blondel, Prost

★ Mes amis : Lionel MOUTSAMBOTE mon bon amis, Gael BENANKAZI, Amess, Cardel MOUANANSAGA, Ouelo

★ Mademoiselle Floria IGAO ONGOUYA pour ses encouragements, je suis touché au delà des mots, merci de m'avoir donner du courage. Merci d'être là, et merci de m'avoir donné la force nécessaire.

★ Mes collègues du club d'anglais The New Stars of Brazzaville.

★ Au professeur **Jean-Marie MOUTSAMBOTE** pour son soutien de tous les jours, ces conseils et ses encouragements, je vous remercie profondément.

Remerciements

J'adresse mes sincères remerciements à :

★ Mon adorable Directeur de Mémoire Mr **Christian TATHY**, pour m'avoir fait l'honneur d'être parmi vos élèves et de travailler sous votre direction. Heureux que vous ayez été mon encadreur et professeur. Vous êtes le professeur qui m'a toujours encourager, et aussi qui a réussi à me donner l'envie de toujours apprendre. Vous êtes un excellent professeur que beaucoup d'élèves aimeraient avoir. Je tiens à vous écrire un « Merci » sincère pour votre soutien, votre implication, votre enseignement, vos conseils et et d'avoir partagé avec moi votre passion pour la recherche. Je tiens à ce que vous sachiez que je garderai toute ma vie un très bon souvenir de ces merveilleux et inoubliables moments d'apprentissage.

★ Mr **Bernard MABIALA**, pour m'avoir fait l'honneur de présider ce jury et de juger la qualité de ce document. Vos qualités scientifique, de grand chercheur et surtout humaines sont pour moi un exemple à suivre. Veuillez croire à l'expression de ma grande admiration, vous qui m'aviez toujours encourager pendant toutes ces années au laboratoire, je vous remercie énormément.

★ Mr **Macaire BATCHI**, je suis particulièrement touché pour la rigueur avec laquelle vous avez bien voulu accepter de juger ce travail. Nous avons toujours admirer vos qualités humaines, votre compétence et votre disponibilité chaque fois que vous étiez sollicités.vos remarques pertinentes contribueront sans doute au perfectionnement du présent travail.

★ Mr **Narcisse MALANDA**. Merci pour l'honneur que vous m'avez fait de juger et de contribuer au perfectionnement de ce travail c'est un grand honneur d'être en face de vous, vous qui aviez commencez à travailler sur cette thématique.

Table des matières

Liste des figures	v
Liste des tableaux	vi
Introduction	1
1 Généralités sur l'eau et sa pollution	4
1.1 Rappels d'hydrologie	4
1.1.1 Chiffres sur l'eau	4
1.1.2 Types d'eau et compositions	5
1.1.3 Réservoirs et formations géologiques de stockage	5
1.1.4 Temps de résidence et bilan hydrologique	5
1.2 Nappes et eaux souterraines	6
1.2.1 Roches : Porosité et Perméabilité	8
1.2.2 Conductibilité hydraulique	9
1.2.3 Origines des eaux souterraines	10
1.2.4 Cycle de l'eau	11
1.3 Pollution de l'eau	12
1.3.1 Vulnérabilité des nappes	13
1.3.2 Types et origines des pollutions	14
1.4 Le Béton et ses Constituants	16
1.4.1 Constituants du béton	16
1.4.2 Types de Bétons et Détériorations	17
2 Modélisation et résolution numérique	19
2.1 Modèle Mathématique	19
2.1.1 Loi de conservation	19
2.1.2 Loi de Ficks	19
2.1.3 Equation du modèle	20
2.2 Rappels d'analyse numérique	22
2.2.1 Formules de différence finie	22

2.2.2	Formules des Moyennes	23
2.2.3	Equations aux Dérivées Partielles	23
2.2.4	Types d'Equations aux Dérivées Partielles	23
2.2.5	Méthode des volumes finis	24
2.3	Résolution numérique	25
2.3.1	Maillage du domaine	26
2.3.2	Discrétisation de l'équation	27
2.3.3	Schéma d'Euler explicite	30
2.3.4	Schéma d'Euler implicite	37
3	Résultats expérimentaux	42
3.1	Expérience du laboratoire	42
3.2	Expériences numériques	43
3.3	La loi de diffusion	43
3.4	Résultats de laboratoire	44
3.5	Résultats sur la simulation	44
3.6	Comparaison des valeurs de concentration	48
	Conclusion	51
	Bibliographie	52

Table des figures

1.1	Nappes souterraines [48, page 2]	8
1.2	Cycle hydrologique ou cycle de l'eau [19, page 1]	12
1.3	Sol et formations aquifères [5, page 1]	14
1.4	Fabrication de béton	17
2.1	volume élémentaire	20
2.2	Bac à eau en plastique	25
2.3	Maillage du domaine	27
2.4	Cellule interne du Maillage	28
3.1	Bac à eau en plastique	42
3.2	Porosités des milieux	46
3.3	Simulation à t=0	46
3.4	Simulation à t=1 semaine	47
3.5	Simulation à t=5 semaines	47
3.6	Comparaison des concentrations en NH_3 de l'échantillon 1 avec les simulations minimales et moyennes	49
3.7	Comparaison des concentrations en NH_3 de l'échantillon 2 avec les simulations minimales et moyennes	50

Liste des tableaux

1.1	Tableau des porosités des roches [49, page 1]	9
3.1	Mesure de concentration en NH_3 au laboratoire [36, page 139]	44
3.2	Concentration : expérience 1- simulation numérique	45
3.3	Concentration : expérience 2- simulation numérique	45
3.4	Concentration : expériences - simulation numérique	48

Introduction

L'accès à l'eau potable et son assainissement sont un enjeu majeur depuis quelques années à travers le monde, et le 22 mars a été décrété journée mondiale de l'eau sur toute la planète par l'Assemblée générale des Nations Unies en 1993. Cet accès fait de plus en plus l'objet d'une attention particulière dans toutes les conférences internationales sur l'eau. L'alarme avait été donnée à Dublin et à Rio de Janeiro en 1992. Les différentes concertations et conférences menées par des organisations gouvernementales et non gouvernementales, ont permis de confirmer que la question de l'eau constitue un problème de premier plan. On estimait que 11 % de la population mondiale, soit 768 millions d'individus, n'avait pas accès à l'eau potable en 2011 selon le rapport de 2013 sur les progrès en matière d'assainissement et d'alimentation en eau de l'Organisation Mondiale de la Santé (OMS). Les préoccupations soulevées dans ces rencontres portent sur l'accès difficile à cette ressource et sur sa mauvaise qualité. En effet, la mauvaise qualité de cette ressource suscite des inquiétudes pour la santé de l'homme et des écosystèmes.

En Afrique subsaharienne, la fragilisation des écosystèmes à travers l'intensification des activités agricoles, la déforestation, l'urbanisation massive et le développement des activités industrielles, a conduit à la raréfaction de l'eau dans plusieurs pays. La république du Congo, située dans une zone de climats de types (le climat équatorial au Nord et le climat tropical humide au sud) [51, page 26], avec une pluviosité annuelle moyenne de plus de 1600 mm d'eau, dispose de deux bassins versants le Congo et le Kouilou - Niari et d'importante ressources en eau souterraine. Mais cette eau, pourtant potentiellement disponible est, en milieu rural où le taux de desserte en eau potable est de 14 % , de mauvaise qualité pour certaines populations, et difficilement accessible pour d'autres en raison de l'éloignement des villages par rapport aux points d'eau [10, page 1]. Pour pallier ce désagrément, les populations et les entreprises ont opté pour système la construction des ouvrages de génie civil enterrés faits en béton ou en maçonnerie. Cependant, le stockage d'eau dans ces réservoirs construits dans les zones à sol saturé en humidité et pollué, constitue un problème. En effet, les décharges d'ordures non traitées altèrent

considérablement les sites humides, favorisent la dissolution et la migration des polluants vers les nappes phréatiques en profondeur [2, page 2].

En outre, ces polluants sont susceptibles d'altérer la qualité de l'eau contenue dans ces réservoirs puisque leur migration favorisée par la nappe d'eau et leur diffusion à travers les parois poreuse et les fissures des réservoirs peuvent entraîner une contamination de l'eau stockée [36, page 2]. De même les matériaux cimentaires comme le béton, en contact avec la nappe d'eau souffrent de vieillissement dû à la présence des microorganismes tels que les bactéries, les champignons, les algues présents dans les nappes d'eau [36, page 2].

De ces faits, le problème d'étanchéité des parois de ces réservoirs devient essentiel vu leur importance considérable dans la préservation de la qualité de l'eau. Il est courant de concevoir des structures faites en béton assurant seul la fonction d'étanchéité lorsqu'une étanchéité absolue n'est pas exigée, car cette option a déjà fait ses preuves pour de nombreux ouvrages [36, page 3]. Force est de constater qu'il manque encore un consensus et d'outils efficaces pour évaluer les performances physiques et mécaniques des-dits ouvrages d'eau. Ce qui entraîne une multitude de techniques de conception et une diversification de types d'ouvrages suivant les villes, les pays et les promoteurs.

La question que l'on peut se poser est de savoir si réellement la potabilité des eaux de ces réservoirs est préservée. Pour ce faire, MALANDA [36, page 2] a émis les hypothèses suivantes :

- L'environnement immédiat (déchets, ordures...) des ouvrages réalisés reste la principale source de contamination des eaux stockées ;
- La nappe phréatique favorise la migration des polluants à l'intérieur du réservoir et à travers ses parois ;
- La dégradation possible des parois du réservoir avec l'apparition des fissures détruit l'étanchéité.

Dans ce travail, nous allons tenter de vérifier ces hypothèses à travers une modélisation mathématique d'une expérience de laboratoires menée par le Docteur Narcisse MALANDA au laboratoire de Génie Civil de l'Ecole Nationale Supérieure Polytechnique (E.N.S.P).

Dans la première partie de notre travail nous allons rappeler certaines notions d'hydrologie qui nous seront utiles, la deuxième partie sera consacrée à la description du modèle choisi et à sa résolution numérique, enfin la troisième

partie portera sur la comparaison entre les résultats des expériences de laboratoire et ceux des expériences numériques.

Chapitre 1

Généralités sur l'eau et sa pollution

1.1 Rappels d'hydrologie

Dans cette partie du travail nous allons tenter de rappeler certaines notions qui seront utiles pour la suite du travail et la compréhension du phénomène étudié.

L'hydrologie est la science de la terre qui étudie les propriétés de l'eau et sa circulation naturelle à la surface de la terre.

L'hydrologie de la zone non-saturée étudie les processus d'infiltration, de flux d'eau et de transport de polluants au travers la zone non saturée.

L'hydrologie souterraine ou hydrogéologie étudie les eaux souterraines. Cette science étudie les interactions entre les structures géologiques et les eaux souterraines, leur captage, leur protection et leur renouvellement.

Cette science permet aussi d'assurer le contrôle et le suivi des ressources souterraines en eau, tant du point de vue quantitatif que qualitatif.

1.1.1 Chiffres sur l'eau

Source de vie, l'eau est essentielle pour tous les organismes vivants, elle a une grande importance pour l'homme mais aussi pour toutes les espèces végétales et animales. De formule chimique H_2O , c'est notamment un solvant efficace pour beaucoup de corps solides.

Présente sur notre planète et indispensable à la survie de tout être vivant, animal ou végétal, on peut la trouver sous trois formes (états physiques), liquide (dans les océans, fleuves, mares, rivière, lacs, etc), solide sous forme de glace et gazeuse (vapeur d'eau présente dans l'atmosphère).

Le volume approximatif de l'eau de la terre (toutes les réserves du monde

confondues) est de $1360.000.000 km^3$. De plus 71 % de la surface de la Terre est recouverte d'eau (97 % d'eau salée et 3 % d'eau douce dans différents réservoirs).

Le corps humain est composé de 65 % d'eau pour un adulte, 75 % pour les nourrissons et 94 % pour les embryons de trois jours. Les animaux sont composés en moyenne de 60 % d'eau et les végétaux de 75 % Voir [47, page 4].

1.1.2 Types d'eau et compositions

Il existe 3 différents types d'eau : l'eau minérale naturelle, l'eau de source et l'eau du robinet. Chacune de ces eaux possède des propriétés différentes de par leur origine, leur composition et leur traitement.

L'eau du robinet subit des traitements chimiques de désinfection. Leurs origines sont multiples : lacs, rivières, ... Leur composition en sels minéraux est très variable. L'eau du robinet filtrée bénéficie d'une filtration partielle. Certains polluants ne sont pas filtrés. Le calcium et magnésium sont retenus dans le filtre et elle peut contenir des ions métalliques d'argent issus du filtre.

L'eau de source et l'eau minérale naturelle, ne subissent aucun traitement chimique de désinfection, leur origine est souterraine [14, page 2].

1.1.3 Réservoirs et formations géologiques de stockage

L'eau est présente dans de nombreux réservoirs. Les principaux sont les océans, l'atmosphère, les glaciers, les eaux courantes et les lacs, les eaux souterraines, les rivières et fleuves... Les plantes constituent aussi des réservoirs. Elles participent activement au cycle de l'eau à travers l'évapotranspiration. En effet, les racines des végétaux pompent l'eau du sol, et en relâchent une partie dans l'atmosphère.

1.1.4 Temps de résidence et bilan hydrologique

Temps de résidence

C'est le temps qu'une molécule d'eau peut faire dans un réservoir. Ce temps peut être de quelques heures dans le cas des plantes et beaucoup plus long dans d'autres cas parfois même des centaines d'années [47, page 5].

Temps de résidence = volume du système / vitesse d'échange.

Par exemple, le volume total des océans est d'environ $1,35 \times 10^9 km^3$. La vitesse d'échange avec l'atmosphère et les rivières est d'environ $3,7 \times 10^4 km^3$

par an. Le temps de résidence est donc de l'ordre de 36500 ans.
 Le volume de l'atmosphère est d'environ $1,3 \times 10^4 km^3$.
 Le flux moyen annuel d'évaporation est de $4,2 \times 10^5 km^3/an$.
 Cela donne un temps moyen de résidence de 0,0031 an soit 11 jours.

Ce concept est important en hydrogéologie car un aquifère est souvent de grande taille et les flux vers d'autres aquifères ou vers la surface sont relativement faibles. Cela signifie que les eaux souterraines ont des temps de résidence variant entre quelques jours à plusieurs milliers d'années. En comparaison, les rivières et l'atmosphère ont des temps de résidence de quelques jours à quelques semaines.

Ainsi il est beaucoup plus facile et rapide de dépolluer une rivière qu'un aquifère où il faudra plusieurs années pour chasser les polluants [29, page 13].

Bilan hydrologique

Le Bilan hydrologique désigne la répartition des différents volumes d'eau compris dans chacune des parties du cycle de l'eau, pour une période et un bassin donné. On parle aussi de bilan hydrique. Le bilan hydrologique (pour un intervalle de temps donné, généralement l'année) est donné par [47, page 5]

$$I_s + I_r - E - T - R_s - R_r = \Delta S.$$

avec

I_s : infiltration depuis la surface du sol,

I_r : infiltration d'eau de rivière ou de lac,

R_s : écoulement souterrain à l'exutoire (l'eau qui sort de l'étendue),

R_r : résurgence d'eau (remonté en surface d'eaux courantes souterraines),

E : évaporation,

T : transpiration,

ΔS variation de stocks sur le bassin versant.

1.2 Nappes et eaux souterraines

Un aquifère est une formation géologique poreuse et perméable, constituée par une couche de sol et des roches, qui contient la nappe d'eau souterraine. Les aquifères représentent un réservoir naturel d'eau douce exploité pour les besoins humains. Ces réservoirs d'eau jouent un rôle déterminant sur terre, mais aussi dans le devenir des polluants rejetés dans la nature.

Une nappe d'eau souterraine est une eau contenue dans des interstices, des fissures et des fractures en communication les uns avec les autres. Cette eau souterraine est localisée dans un aquifère, situé au-dessus d'une couche de terrain imperméable.

Une nappe d'eau souterraine se caractérise par son niveau supérieur ou son niveau piézométrique. En fonction de sa position, on distingue les nappes libres ou nappes phréatiques dont le niveau piézométrique se situe dans l'aquifère et les nappes captives, situées entre deux couches de terrains imperméables, dont le niveau piézométrique est situé au dessus de l'aquifère.

L'eau souterraine est l'eau qui existe dans les pores, les fissures des roches et dans les sédiments sous la terre. Elle est issue des précipitations ou de la neige puis, infiltre les sols dans les systèmes d'eaux souterraines. Par la suite, elle peut éventuellement remonter à la surface, ou rejoindre des lacs ou des océans. L'eau souterraine est un réservoir naturel important pour le cycle de l'eau de même que les autres réservoirs naturels que sont l'atmosphère ou l'eau de surface [47, page 12].

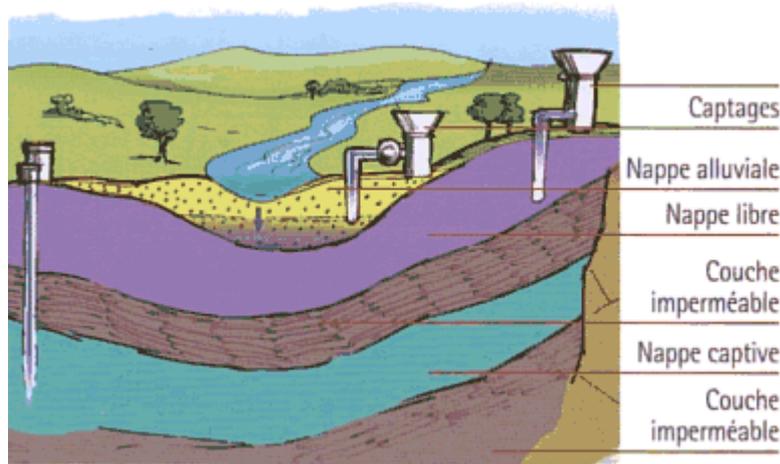


FIGURE 1.1 – Nappes souterraines [48, page 2]

1.2.1 Roches : Porosité et Perméabilité

Roches

Une roche est un matériau constitutif de la croûte terrestre et formé par un assemblage de minéraux. La pétrographie est la science de la description et de l'analyse des roches. La pétrologie est la science qui étudie la formation et la transformation des roches.

L'eau peut, selon le type de roche, pénétrer : c'est la porosité de la roche. L'eau peut aussi traverser complètement la roche : c'est la perméabilité de la roche.

Porosité

La porosité correspondant au volume relatif des vides présents dans la roche (nombre sans dimension)

$$p = \frac{\text{Volume des vides} \times 100}{\text{volume total de la roche}}$$

Il est possible de déterminer le volume d'eau contenu dans une roche en pesant la roche avant et après un séjour prolongé dans l'eau. La différence mesurée en gramme est convertie en volume, $1g = 1 \text{ cm}^3$. Ce volume représente le volumes des vides.

Il est possible de mesurer le volume total de la roche en mesurant la quantité d'eau déplacée lors de son immersion [20, page 3].

Porosité efficace

est le rapport du volume d'eau gravitaire qu'un milieu poreux peut contenir en état de saturation puis libérer sous l'effet d'un drainage complet (égouttage en laboratoire sur échantillon), à son volume total. Elle équivaut en pratique au coefficient d'emménagement d'un aquifère à nappe libre [49, page 12].

Roche	Porosité totale (%)	Porosité efficace (%)	Perméabilité log (K, m/s)	Coefficient d'infiltration (%)	Infiltration
Gravier	25 à 35	20 à 30	-3 à 0	6	Forte
Alluvion des oueds	15 à 25	10 à 20	-3 à 0		
Grès	0 à 30	0 à 25	-5 à -4		
Sable	25 à 40	20 à 35	-7 à -4	4	Moyenne
Sable limoneux	35 à 45	25 à 35	-8 à -4		
Limon	35 à 45	15 à 25	-9 à -5		
Limon argileux	45 à 55	5 à 10	-11 à -8		
Sable argileux	35 à 45	25 à 35	-8 à -5		
Marne	0 à 10	0 à 5	-10 à -8		
Argile sableuse	45 à 55	5 à 10	-10 à -6		
Calcaire encroûtement	10 à 25	2 à 10	-11 à -9		
Dolomite	10 à 20	5 à 10	-11 à -9		
Gypse	10 à 25	2 à 10	-12 à 10	1	Très fable
Argile	45 à 55	0 à 5	-12 à -9		
Silt	45 à 55	2 à 5	-9 à -6		
Sols de sebkhas	10 à 40	2 à 10	-12 à -8		

TABLE 1.1 – Tableau des porosités des roches [49, page 1]

Perméabilité

la perméabilité mesure l'aptitude d'une roche à se laisser traverser par l'eau. Elle correspond à la vitesse à laquelle l'eau circule au sein de la roche [20, page 3].

1.2.2 Conductivité hydraulique

La conductivité hydraulique K est une grandeur qui exprime l'aptitude d'un milieu poreux à laisser passer un fluide sous l'effet d'un gradient de pression. C'est une grandeur dépendant à la fois des propriétés du milieu poreux où l'écoulement a lieu (granulométrie, forme des grains, répartition et forme des pores, porosité intergranulaire), des propriétés du fluide qui s'écoule (viscosité, densité) et du degré de saturation du milieu poreux. La conductivité hydraulique, qui a la dimension d'une vitesse est généralement exprimée en mètres par seconde (m/s).

$$K = \frac{k\rho g}{\mu}$$

avec :

k : la perméabilité intrinsèque du milieu poreux (m^2),

ρ : la masse volumique du fluide (kg/m^3),

g : l'accélération de la pesanteur (m/s^2),

μ : la viscosité dynamique du fluide.

k est très faible d'où l'emploi du Darcy ; 1 Darcy vaut $10^{-8}cm^2$ et $10^{-12}m^2$.

Lorsque la teneur en eau augmente, le nombre de pores en eau augmente, ainsi plus de pores participent à l'écoulement et la conductivité augmente [47, page 28].

1.2.3 Origines des eaux souterraines

La plupart des eaux souterraines ont pour origine les eaux pluviales (pluie ou neige). Si elles ne sont pas perdues par évaporation, transpiration ou ruissellement, les eaux de ces sources peuvent s'infiltrer dans les sols.

Les eaux souterraines sont toutes les eaux se trouvant sous la surface du sol, dans la zone de saturation et en contact direct avec le sol ou le sous-sol. Les trois formes de l'eau souterraine sont :

- L'eau de constitution : C'est l'eau qui rentre dans la structure cristalline des minéraux.

- L'eau libre : C'est l'eau présente dans les nappes phréatiques et les aquifères, et qui est exploitable, par un forage ou un puits.

- L'eau de rétention : On distingue l'eau capillaire (elle se trouve dans les pores, c'est l'eau d'absorption, l'eau recherchée par les racines), l'eau d'adhésion (l'eau qui est retenue à la surface des grains) et l'eau d'adsorption.

La porosité et la structure de la terre déterminent le type de la couche aquifère et la circulation souterraine. Les eaux souterraines peuvent circuler et être stockées dans les strates géologiques : ceci se produit dans le cas des sols poreux . Elles peuvent circuler et être stockées dans les fissures ou les défauts des roches compactes non perméables.

Sur terre, approximativement 3% de toute l'eau est de l'eau douce. Les eaux souterraines représentent 95% de celle-ci, l'eau de surface 3.5% et l'humidité des sols 1.5% .

1.2.4 Cycle de l'eau

Connu scientifiquement sous le nom de cycle hydrologique, le cycle de l'eau est un modèle représentant le parcours de l'eau entre les grands réservoirs d'eau liquide, solide ou de vapeur d'eau sur terre (océans, atmosphère, lacs, cours d'eau, nappes d'eaux souterraines et glaciers). Le moteur de ce cycle est l'énergie solaire qui, par rayonnement solaire favorise l'évaporation de l'eau de l'hydrosphère.

De même, une partie des eaux contenues dans les plantes s'évapore et on parle d'évapotranspiration. Les végétaux ont une influence sur le cycle. Les racines des végétaux pompent l'eau du sol, et en relâchent une partie dans l'atmosphère. Ces eaux rejoignent alors l'atmosphère sous forme de vapeur d'eau.

En s'élevant dans l'atmosphère, la vapeur d'eau rencontre de basses températures dues à l'altitude. Ce refroidissement transforme cette vapeur d'eau en fines gouttelettes et en nuage car les nuages sont formés de minuscules gouttes d'eau. On parle de condensation. Une fois sous forme de nuage, les gouttelettes d'eau se collent entre elles et selon les températures et le vent, lorsqu'elles deviennent trop lourdes cela entraîne des précipitations. Sur le sol, les gouttes retombent sous forme de pluies ou neige, on parle de précipitation.

Les précipitations arrivant à la surface de la terre, constituent la quasi-totalité des apports d'eau au sol. Des processus prennent naissance : le ruissellement de surface, l'évaporation, l'humidification du sol et l'infiltration.

L'eau qui tombe à la surface du sol commence par humidifier la surface supérieure du sol. Cette augmentation d'humidité en surface n'entraîne pas nécessairement un écoulement vertical immédiat. Tant que les forces de capillarité sont supérieures aux forces de gravité, l'eau est retenu comme dans une éponge, et ne migre vers le bas que très lentement. Quand la teneur en eau dépasse une valeur limite qui est la capacité de rétention, l'eau se propage plus rapidement vers le bas et humidifie une zone plus profonde du sol.

La tranche supérieure du sol est assez saturée sur une faible épaisseur, mais cette humidité ne se propage pas assez vite pour absorber toute l'eau qui tombe. Une pellicule d'eau peut alors circuler en surface, c'est ce qu'on appelle un ruissellement. Ce ruissellement circule suivant la ligne de plus grande pente du sol et vient alimenter le réseau de drainage naturel : fossé, ruisseau,

rivière. Le ruissellement apparaît instantanément après que l'eau ait comblé les premières aspérités (petite irrégularité saillante d'une surface solide) du sol.

Une autre partie de l'eau s'infiltré dans le sol et traverse la terre végétale (zone non saturée puis saturée) pour former de l'eau souterraine. Arrivée à la nappe imperméable elle va s'écouler horizontalement et ensuite rejoindre les sources, rivières et océans. Cette eau peut de nouveau s'évaporer.

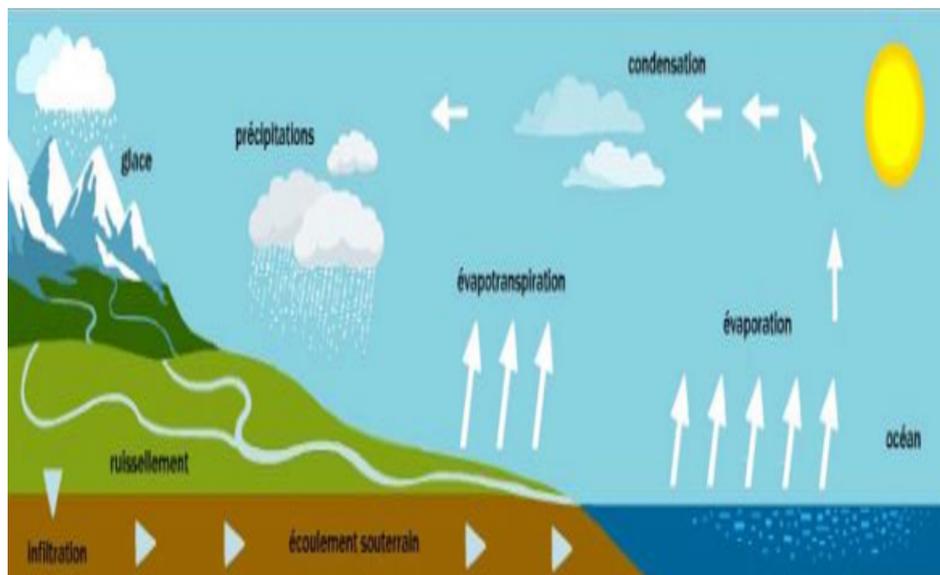


FIGURE 1.2 – Cycle hydrologique ou cycle de l'eau [19, page 1]

1.3 Pollution de l'eau

La pollution est une dégradation de l'environnement par l'introduction dans l'air, l'eau ou le sol de matières n'étant pas présentes naturellement dans le milieu.

On appelle pollution de l'eau toute modification chimique, physique ou biologique de la qualité de l'eau qui a un effet nocif sur les êtres vivants.

Les eaux souterraines sont, dans la plupart des cas, de meilleure qualité que les eaux de surface car elles sont moins directement exposées aux pollutions. Cependant, la qualité naturelle des eaux souterraines peut être altérée par l'activité humaine.

Dans le cas d'une détérioration importante, l'eau ne sera plus considérée

comme potable pour la consommation humaine. Elle pourra être utilisée à d'autres fins (irrigation,..) ou devra subir un traitement approprié pour retrouver sa potabilité. L'eau des nappes n'est donc pas à abri de la pollution. Les qualités essentielles d'une eau de consommation sont celles d'une eau : salubre c'est-à-dire saine et qui contribue à la santé et doit être potable c'est-à-dire propre à être bue, fraîche, incolore, inodore...

1.3.1 Vulnérabilité des nappes

La vulnérabilité dépend du type de nappe, libre ou captive et du mode de circulation de l'eau dans l'aquifère.

Les nappes libres sont les plus vulnérables : les pollutions d'origine superficielle peuvent diffuser librement dans le sol et la zone non saturée jusqu'au niveau piézométrique.

Les nappes captives en revanche sont mieux protégées par les couches imperméables qui les surmontent.

Leur pollution apparaît lorsque le niveau protecteur imperméable est percé par un ouvrage (fouille profonde,...).

Pour atteindre une nappe libre en milieux poreux, les polluants transportés par les eaux d'infiltration doivent franchir de nombreux obstacles :

Le sol

L'activité chimique et microbiologique est intense, de nombreux corps sont modifiés chimiquement, les polluants organiques peuvent être métabolisés et minéralisés.

Zone non saturé

comme le sol, elle joue un rôle dans la filtration et la rétention de certaines substances.

Zone saturé

la filtration se poursuit dans le milieu poreux de la nappe ; le polluant est dilué dans la masse d'eau.

Ce type de nappe une fois contaminée par un polluant le reste longtemps.

Les nappes alluviales sont en connexion hydraulique avec le cours d'eau ; la qualité de leur eau dépend de celle de la rivière. Ces nappes sont particulièrement vulnérables.

Les activités humaines sont responsables en grande partie de la pollution des nappes souterraines et des cours d'eau (élevages intensifs, mauvaise gestion des eaux de ruissellement,...)

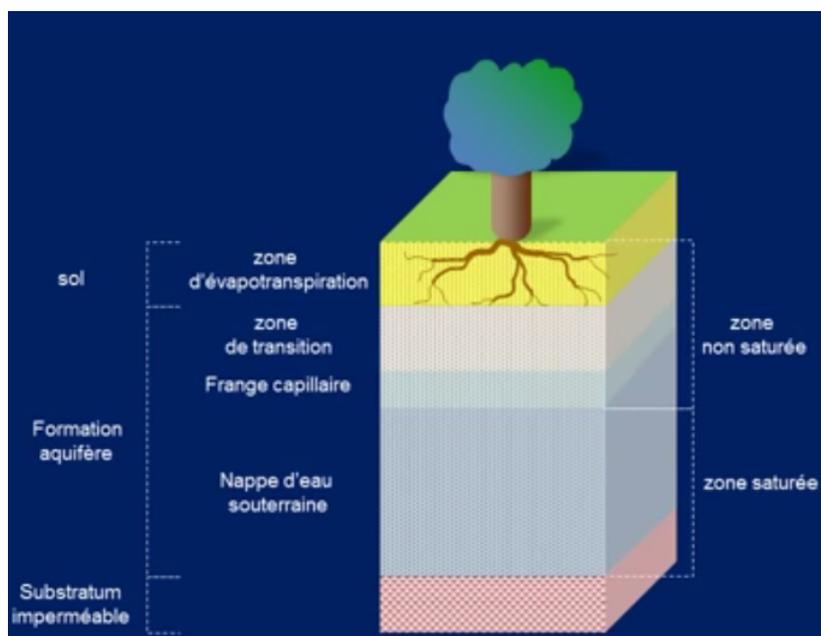


FIGURE 1.3 – Sol et formations aquifères [5, page 1]

1.3.2 Types et origines des pollutions

Types de pollutions

* Pollution temporaire et pollution chronique

L'émission exceptionnelle de matières polluantes à la suite d'un accident (mauvaise manœuvre en usine, accident de la circulation,...) peut entraîner un transfert à la nappe et la pollution.

Les pollutions chroniques sont plus insidieuses et dommageables; moins spectaculaires, elles peuvent passer inaperçues (pollution agricole par des nitrates , ...).

* Pollution diffuse

Le polluant émis sur une faible surface n'affectera qu'un secteur limité de la nappe, et pourra s'étendre par diffusion. Seuls les captages à proximité de la zone polluée et en aval seront affectés.

* Pollution micro-biologique

Les micro-organismes sont peu nombreux dans les eaux de nappe du fait des conditions généralement anaérobies. Les milieux fissurés, présentent des conditions favorables à la survie et à la multiplication des germes.

* Pollution organique

- Les produits de dégradation de la matière vivante : la décomposition de la matière organique par les micro-organismes libère des nitrites, nitrates, ammoniac, hydrogène sulfuré.
- Hydrocarbures : la contamination de la nappe est généralement accidentelle (fuite de cuve d'essence, de mazout, rupture de canalisation).

* Pollution minérale

L'eau d'une nappe ne contient naturellement pas de composés azotés : ceux-ci, provenant de la décomposition de la matière vivante par les micro-organismes, sont minéralisés en azote gazeux ou restent sous forme de nitrate et d'ammonium. Les nitrates sont des sels très solubles qui sont facilement entraînés en profondeur par les eaux d'infiltration.

Origines des pollutions

- Origines domestiques : dans le cas d'un assainissement, collectif ou individuel, défectueux, des substances indésirables contenues dans les eaux ménagères peuvent être transférées dans la nappe (matière organique, détergent, solvant, antibiotique, micro-organisme,...).

- Origines industrielles : elles sont variées selon le type d'activités ; produit organique de synthèse, hydrocarbures, sels minéraux, métaux lourds.

- Origines agricoles : elles sont chroniques et concernent de grande surface. En effet, la pratique actuelle des cultures et d'élevage influence fortement le régime et la qualité des eaux. L'utilisation des engrais, pesticides et des produits chimiques de traitements des plantes détruit la vie dans les rivières et rend impropres l'eau à la consommation humaine.

- Origines urbaines et routières : Les risques de pollution apparaissent à la construction des réseaux routiers puis à leurs exploitation (métaux lourds libérés par les véhicules, les substances dangereuses échappées par accident).

Défenses naturelles contre la pollution

Le sol constitue un puissant moyen d'épuration et de recyclage des eaux. Les argiles, les hydroxydes et la matière organique adsorbent les cations (Ca, Mg, K, Na, métaux lourds) et certaines molécules organiques. La végétation des zones humides et des bords de rivières ont un effet

épurateur remarquable.

Les organismes vivants et non toxiques (bactéries, petits invertébrés) sont présents dans les eaux souterraines même à grande profondeur. Ils peuvent métaboliser les polluants introduits dans la nappe. Les polluants organiques toxiques comme les polychlorobiphénols (PCB) sont lentement transformés. Les nitrates sont détruits en milieu anaérobie.

1.4 Le Béton et ses Constituants

1.4.1 Constituants du béton

Le béton est de nos jours le matériau le plus utilisé au monde, plus que tous les autres matériaux réunis. Le béton armé associe intimement un béton avec des armatures métalliques pour obtenir un matériau qui cumule les qualités de résistance en compression et en traction. Le béton est un mélange précisément dosé de ciment, de granulats, d'eau et d'adjuvants qui peut varier en fonction de ses utilisations.

Le ciment joue le rôle de liant du béton hydraulique. Les ciments sont obtenus par calcination des pierres calcaires plus ou moins argileuse.

Le choix du ciment conditionne les qualités du béton ainsi que sa résistance à court et long terme et lui apporte sa durabilité. Au ciment s'ajoute les granulats, on utilise généralement le sable des rivières ou de carrière débarrassé des impuretés, jamais de sable marin. Ce dernier contient des éléments néfastes pour la qualité du béton et du mortier.

Tout comme les deux composants précédents du mélange, l'eau doit être propre. Le dosage doit faire preuve d'une attention particulière, seule l'eau potable peut être retenue pour la fabrication du béton.

Toutes les eaux usées, de rejets industriels, de ruissellements doivent faire l'objet d'un contrôle.

A ce mélange s'ajoute les adjuvants (additifs) qui sont incorporés en faible quantité. Certains permettent la prise et le durcissement. D'autres rendent le béton imperméable aux liquides. D'autres encore permettent des fluidités extrêmes utiles pour produire des bétons autoplaçant ou autonivelant (chape liquide)

Pour réaliser une dalle pour bêche à eau on doit couler une dalle de 10 à 15 cm d'épaisseur. La technique de mise en œuvre est connue et basée sur le respect des normes c'est-à-dire apporter le plus grand soin à la préparation de l'assise, au réglage du coffrage, au ferrailage et au respect des règles de

base pour faire ce béton. Le mélange entre le ciment, l'eau, le sable et le gravier constitue le béton et la bétonnière est la machine adaptée pour faire ce mélange. Que l'on choisisse une mini bétonnière ou une bétonnière professionnelle, les règles de fabrications sont les mêmes et nécessitent qu'on mélange 1 seau de ciment pour 2 seaux de sables et 3 seaux de gravier avec un demi seau d'eau. Ce mélange additionné à l'acier constitue le béton armé. Lorsqu'on ajoute des armatures métalliques qui cumulent les qualités de résistance en compression et en traction, on obtiens du béton armé.



FIGURE 1.4 – Fabrication de béton

1.4.2 Types de Bétons et Détériorations

Types de bétons

Le béton varie en fonction de la nature des granulats, des adjuvants, et peut ainsi s'adapter aux exigences de chaque réalisation, par ses performances et par son aspect.

- Le béton armé associe intimement un béton avec des armatures métalliques pour obtenir un matériau qui cumule les qualités de résistance en compression et en traction.
- Les bétons fibrés sont des bétons dans lesquels ont été incorporées des fibres de nature, dimension et géométrie diverses, dans le but de leur conférer certaines propriétés.
- Les Bétons à Hautes Performances (BHP) : c'est une nouvelle génération de bétons, plus compacts, qui se caractérisent par une durabilité accrue et une (très) haute résistance.

- Les bétons de ciment blanc : fabriqués avec du ciment blanc, ces bétons présentent les mêmes caractéristiques qu'un béton traditionnel : résistance, durabilité, ... et offrent l'agrément de teintes claires ou colorées. Ils sont particulièrement prisés pour des réalisations esthétiques et qualitatives.

- Les bétons légers : les bétons légers permettent de réaliser un gain de poids pour l'ouvrage auquel ils sont destinés. Ils sont également utilisés pour l'isolation thermique, la conductivité variant dans le même sens que la densité.

- Les bétons lourds : les bétons lourds sont réalisés à partir de granulats très denses et utilisés pour leur haute densité dans la protection contre les radiations ou la réalisation de culées et de contrepoids [9, page 20].

Détérioration du béton

La majorité des bétons sont liés à la nature du ciment et à sa composition (rhéologie, résistance mécanique, résistance aux agressions chimique, durabilité,...).

Trop d'eau dans le béton entraîne la naissance de fissures et une perte de résistance au moment du séchage.

Seule l'eau potable peut être reconnue pour la fabrication du béton, l'eau de mer est interdite pour les bétons armés.

L'action de l'eau a pour conséquence la diminution des performances mécaniques, lorsqu'il y a excès. Elle favorise les moisissures et le développement de matières organiques. Elle transporte les chlorures, sulfates, gaz carbonique, baisse la compacité, augmente la porosité et la perméabilité, favorise une plus grande pénétration des agents extérieurs.

Le dosage des adjuvants (additifs) nécessaires au mélange est important à réaliser, car une forte quantité au mélange détériore le béton. Une faible quantité seulement est nécessaire pour le mélange.

Dans la construction des baches à eaux, l'étanchéité est très importante, de par sa capacité de bloquer le passage de l'eau. Elle a pour but d'empêcher tout élément extérieur non désiré (pluie, vent...) d'entrer dans la bache ou de mettre en danger sa construction même. Il s'agit donc d'éviter toute dégradation naturelle provoquée notamment par les intempéries.

L'étancheur est le professionnel de ce domaine, il est chargé de mettre en place toutes les mesures d'étanchéité de la construction, et de vérifier le cas échéant sa bonne mise en place et son bon fonctionnement.

Chapitre 2

Modélisation et résolution numérique

2.1 Modèle Mathématique

2.1.1 Loi de conservation

Une loi de conservation (rien ne se perd, rien ne se crée) exprime qu'une propriété mesurable particulière d'un système physique isolé reste constante au cours de l'évolution de ce système.

Dans notre cas elle s'écrit sous la forme

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\text{div}(F) + \sum r_i. \quad (2.1)$$

avec :

C=Concentration volumique du soluté considéré ;

F= Flux ou densité de flux à travers les limites du système ;

r_i =Taux d'apport.

2.1.2 Loi de Ficks

La loi de Fick décrit la diffusion de la matière. Elle relie le flux de matière au gradient de concentration. Elle s'exprime par la formule

$$F = -D\nabla C. \quad (2.2)$$

Dans laquelle :

F représente le flux massique (unité $kg.m^{-2}.s^{-1}$) ;

D représente le coefficient ou le tenseur de diffusion (unité $m^2.s^{-1}$) ;

C représente la concentration.

2.1.3 Equation du modèle

Le modèle retenu dans ce travail est la version 2D de celui proposé par le Docteur Vedat Batu [11, page 20], qui se présente comme suit.

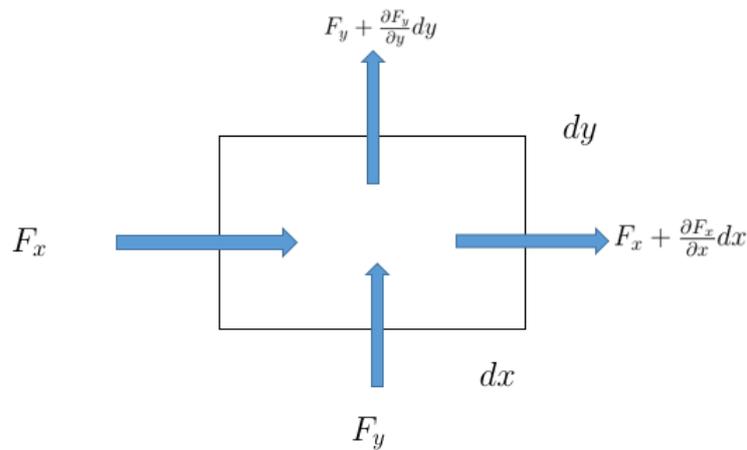


FIGURE 2.1 – volume élémentaire

Considérons le volume élémentaire défini par le rectangle infinitésimal de dimensions dx et dy

La concentration C du soluté est définie comme étant la masse du soluté par unité de volume de la solution. La porosité efficace du milieu est ϕ . F_x et F_y représentent les composantes du flux dispersif en coordonnées cartésiennes. La masse totale de soluté qui entre dans l'élément par unité de temps est :

$$\text{Masse entrante par unité de temps} = F_x dy + F_y dx.$$

La masse totale qui quitte l'élément pendant le déplacement élémentaire est :

$$\text{Masse sortante par unité de temps} = (F_x + \frac{\partial F_x}{\partial x} dx) dy + (F_y + \frac{\partial F_y}{\partial y} dy) dx.$$

Dans ces relations, les termes aux dérivées partielles indiquent les échanges spatiaux de la masse de soluté dans les directions spécifiées.

La différence entre la masse sortante et la masse entrante par unité de temps donne :

$$\text{Différence de masse par unité de temps} = \left(\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} \right) dydx. \quad (2.3)$$

En négligeant l'adsorption, la différence entre le flux entrant et le flux sortant de l'élément est égale à la quantité de substance dissoute dans l'élément. Le taux d'échange de masse dans l'élément infinitésimal est :

$$\begin{aligned} \text{Masse échangée par unité de temps} &= -\phi \frac{\partial C}{\partial t} dx dy + f dy dx \\ &= \left(-\phi \frac{\partial C}{\partial t} + f \right) dx dy \end{aligned} \quad (2.4)$$

Où f représente l'accumulation de masse due à une source ou un puits de masse par unité de temps et par unité de volume.

Le principe de conservation de masse permet de dire que la différence de masse par unité de temps doit être égale à la masse échangée par unité de temps, c'est-à-dire :

$$\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} = -\phi \frac{\partial C}{\partial t} + f. \quad (2.5)$$

Soit

$$\nabla \cdot F = -\phi \frac{\partial C}{\partial t} + f. \quad (2.6)$$

Ou encore

$$\phi \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot F = +f. \quad (2.7)$$

D'après la loi de Fick en milieu poreux

$$F = -\phi D \nabla C. \quad (2.8)$$

D'où l'équation décrivant la diffusion d'un polluant dans l'eau :

$$\phi(x, y) \frac{\partial C(x, y, t)}{\partial t} - \nabla \cdot (\phi(x, y) D \nabla C(x, y, t)) = f. \quad (2.9)$$

Cette équation sera complétée d'une condition initiale et de conditions aux limites correspondant aux conditions expérimentales.

2.2 Rappels d'analyse numérique

2.2.1 Formules de différence finie

Soit $[0, L]$ un compact de \mathbb{R}^2 et u une fonction continue sur $[0, L] \times [0, l]$. Notons par u_{ij} une valeur approchée de la fonction u au point (x_i, y_j) . h_x représente le pas de discrétisation suivant l'axe des abscisses et h_y suivant l'axe des ordonnées. Les points de discrétisation sont déterminés par $x_i = ih_x$ et $y_j = jh_y$. On définit les approximations suivantes au point (x_i, y_j) :

★ Différences finies décentrées à droite d'ordre 1

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{h_x}. \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{h_y}. \quad (2.11)$$

★ Différences finies décentrées à gauche d'ordre 1

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{h_x}. \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{h_y}. \quad (2.13)$$

★ Différences finies centrée à d'ordre 2

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h_x}. \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2h_y}. \quad (2.15)$$

★ Différences finies à 3 point d'ordre 2

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h_x^2}. \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h_y^2}. \quad (2.17)$$

★ Approximation de la dérivée seconde croisée

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}(x_i, y_j) &\approx \frac{\partial_x u(x_i, y_{j+1})}{2h_y} - \frac{\partial_x u(x_i, y_{j-1})}{2h_y} \\ &\approx \frac{u_{i+1,j+1} - u_{i-1,j+1} - u_{i+1,j-1} - u_{i-1,j-1}}{4h_x h_y} \end{aligned} \quad (2.18)$$

2.2.2 Formules des Moyennes

★ Moyenne arithmétique

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + x_3 + \dots + x_n}{n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i. \quad (2.19)$$

★ Moyenne Géométrique

$$\bar{x} = \sqrt[n]{x_1 x_2 x_3 \dots x_n} = \left(\prod_{i=1}^n x_i \right)^{\frac{1}{n}}. \quad (2.20)$$

★ Moyenne Harmonique

$$\bar{x} = \frac{n}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{x_i}}. \quad (2.21)$$

2.2.3 Equations aux Dérivées Partielles

Les problèmes physiques rencontrés dans la vie quotidienne (transport de polluant, problème de convection, problème d'écoulement dans des conduites, etc), sont décrits pour la plupart par des équations aux dérivées partielles. Une équation aux dérivées partielles (EDP) est définie comme étant une relation entre une fonction u de plusieurs variables que l'on cherche à déterminer et un nombre fini de ses dérivées partielles,

$$F \left(X, \frac{\partial u(X)}{\partial X}, \frac{\partial^2 u(X)}{\partial X^2}, \dots, \frac{\partial^p u(X)}{\partial X^p} \right) = f(X) \quad \forall X \in \mathbb{R}^n. \quad (2.22)$$

Où F et f sont des fonctions données respectivement de \mathbb{R}^{p+1} et de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R} .

2.2.4 Types d'Equations aux Dérivées Partielles

Considérons une équation aux dérivées partielles à deux variables définie par :

$$A \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial^2 y} + D \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} + E \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} + F = f(x, y). \quad (2.23)$$

A, B, C, D, E, F et $f(x, y)$ sont des fonctions données du domaine, x et y sont des variables indépendantes représentant les coordonnées d'un point de

\mathbb{R}^2 et u est une variable dépendant de (x,y) que l'on cherche à déterminer. Selon la valeur du discriminant

$$\Delta = B^2 - 4AC$$

l'équation est dite :

★ **Equation Elliptique**

Lorsque $\Delta < 0$

L'équation de Laplace en est un exemple $\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = f$.

★ **Equation Parabolique**

Lorsque $\Delta = 0$

L'équation de la chaleur en est un exemple $\frac{\partial U}{\partial t} - \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = f$.

★ **Equation Hyperbolique**

Lorsque $\Delta > 0$

L'équation des ondes en est un exemple $\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = f$.

En général ces équations n'admettent pas de solution analytique, un recours aux méthodes de résolutions numérique s'avère nécessaire.

2.2.5 Méthode des volumes finis

Plusieurs méthodes de résolution existent parmi lesquelles on peut citer la Méthode des Différences finis, la Méthode des Elements finis, la Méthode des volumes finis, la Méthode spectrale, etc. Toutes ces méthodes nécessitent une phase de maillage et une phase de discrétisation.

Tout comme les méthodes des Différences finis et des Elements finis, la méthode des volumes finis est utilisée pour résoudre des équations aux dérivées partielles.

★ **Phase de Maillage**

Elle consiste à subdiviser le domaine d'étude en de petits volumes appelés volumes de contrôle ou cellules qui sont constitués d'éléments de surface en dimension 2.

Dans notre travail les études seront faites en dimension deux ($2D$).

★ **Phase de Discrétisation**

Elle transforme le problème continu en un problème discret. On intègre

d'abord l'équation dans chaque volume de contrôle. Ces équations contenant un terme de divergence, en utilisant le théorème de Green, les intégrales de volume d'un terme de divergence sont transformées en intégrales de surface ou flux, sont ensuite évalués aux interfaces entre volumes de contrôle.

2.3 Résolution numérique

Ce travail est la suite approfondie d'une modélisation faite par le Docteur **Narcisse MALANDA** sur la diffusion d'un polluant à travers le béton dans une maquette de bache à eaux de longueur 0.35 m, de largeur 0.30 m et d'épaisseur 0.05 m, plongée dans un bac de sable de longueur 0.75 m et de largeur 0.60 m. En partant du même modèle, nous allons étudier cette diffusion en dimension 2 avec la même méthode numérique, celle des volumes finis.



FIGURE 2.2 – Bac à eau en plastique

Ce problème de diffusion à travers le béton est modélisé par l'équation aux dérivées partielles (2.9) dans laquelle nous avons choisi une diffusion dépendant de la concentrations.

L'expérience se déroulant dans un bac clos sans apport extérieure, nous avons choisi des conditions aux limites de types Neumann homogène, c'est-à-dire la dérivée normale de la concentration est nulle sur le bord du domaine.

La condition initiale est donnée et égale à une constante non nulle à l'extérieur du béton et nulle dans le béton et à l'intérieur du réservoir.

$$\begin{aligned} \Phi(x, y) \frac{\partial C(x, y, t)}{\partial t} - \nabla \cdot (\Phi(x, y) D(C(x, y, t)) \nabla C(x, y, t)) &= f(x, y, t). \text{ dans } \Omega \\ D(C) \nabla C \cdot \vec{n} &= 0. \text{ sur } \partial\Omega \\ C(x, y, 0) &= C_0(x, y) \text{ dans } \Omega \end{aligned} \quad (2.24)$$

Dans laquelle $D(C(x, y, t)) > 0$ est le coefficient de diffusion, $\Phi(x, y) > 0$, $C(x, y, t)$ est la concentration des particules de polluants et $f(x, y, t)$ la source de polluant.

2.3.1 Maillage du domaine

Le maillage du domaine rectangulaire $\Omega = [0, L_a] \times [0, l_b]$ est constitué de N colonnes et M lignes, c'est-à-dire de $N \times M$ cellules ou volumes de contrôles et $N \times M$ nœuds correspondants aux centres des cellules.

Pour ce faire, on définit les pas de discrétisations suivant l'axe des abscisses Δx , et suivant l'axe des ordonnées Δy par :

$$\Delta x = \frac{L_a}{N} \quad \text{et} \quad \Delta y = \frac{l_b}{M}$$

On définit les abscisses et les ordonnées des nœuds $X_l(x_i, y_j)$ par :

$$\begin{aligned} x_i &= (i - 1)\Delta x + \frac{\Delta x}{2} & 1 \leq i \leq N \\ y_j &= (j - 1)\Delta y + \frac{\Delta y}{2} & 1 \leq j \leq M \end{aligned}$$

Le maillage étant régulier, la relation entre le numéro l d'un nœud avec les indices i et j de ses coordonnées est donnée par

$$l = (j - 1)N + i \quad 1 \leq l \leq N.M.$$

Ainsi chaque volume ou cellule de contrôle Ω_l , ($1 \leq l \leq N.M$) est défini par :

$$\Omega_l = [x_{i-\frac{1}{2}}; x_{i+\frac{1}{2}}] \times [y_{j-\frac{1}{2}}; y_{j+\frac{1}{2}}] \quad , 1 \leq i \leq N \quad \text{et} \quad 1 \leq j \leq M$$

On se donne un pas de discrétisation en temps.

Les inconnues du problème sont les $N \times M$ valeurs $C_{i,j}^n$ où $1 \leq i \leq N$, $1 \leq j \leq M$, $n \geq 1$ qui représentent les valeurs moyennes de la concentration dans une cellule et au temps $t_n = n\Delta t$. On note par C_{ij}^n la valeur moyenne de la concentration telle que

$$C_{i,j}^n = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} C(x, y, t_n) dy dx. \quad (2.25)$$

$f_{i,j}^n$: la valeur moyenne de $f(x, y)$

$$f_{i,j}^n = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} f(x, y, t_n) dy dx. \quad (2.26)$$

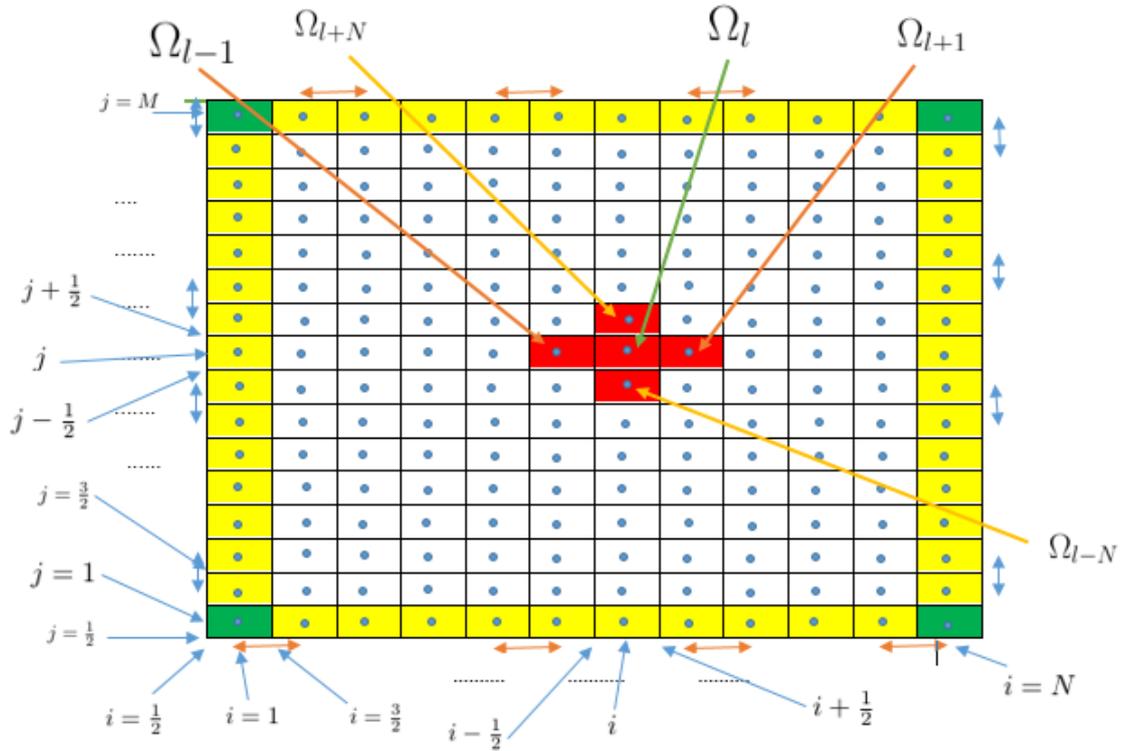


FIGURE 2.3 – Maillage du domaine

2.3.2 Discrétisation de l'équation

Dans chaque cellule, les flux sont évalués aux interfaces intercellulaires. L'intégration de l'équation sur un volume de contrôle Ω_l situé à l'intérieur du domaine Ω et pendant un intervalle de temps $[t_n, t_{n+1}]$ donne :

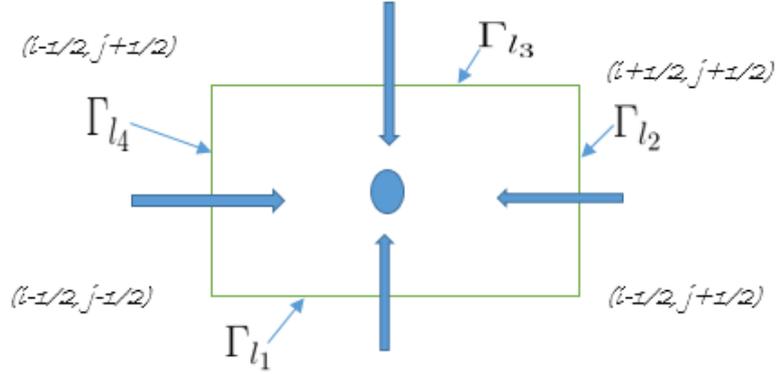


FIGURE 2.4 – Cellule interne du Maillage

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Omega_l} \left\{ \Phi(x, y) \frac{\partial C}{\partial t}(x, y, t) - \nabla \cdot (\Phi(x, y) D(C(x, y, t)) \nabla C) \right\} d\Omega_l dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Omega_l} f(x, y, t) d\Omega_l dt \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Omega_l} \left\{ \Phi(x, y) \frac{\partial C}{\partial t}(x, y, t) \right\} d\Omega_l dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Omega_l} \left\{ \nabla \cdot (\Phi(x, y) D(C(x, y, t)) \nabla C) \right\} d\Omega_l dt \\ = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Omega_l} f(x, y, t) d\Omega_l dt \quad (2.28) \end{aligned}$$

En utilisant le théorème de **Green-Ostrogradsky** on a :

$$\begin{aligned} \underbrace{\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Omega_l} \left\{ \Phi(x, y) \frac{\partial C}{\partial t}(x, y, t) \right\} d\Omega_l dt}_{(*)} - \underbrace{\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\partial\Omega_l} \left\{ \Phi(x, y) D(C(x, y, t)) \nabla C \right\} \cdot \vec{n} d\sigma dt}_{(**)} \\ = \underbrace{\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Omega_l} f(x, y, t) d\Omega_l}_{(***)} \quad (2.29) \end{aligned}$$

En discrétisant (*), on a

$$\begin{aligned}
\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Omega_l} \left\{ \Phi(x, y) \frac{\partial C}{\partial t}(x, y, t) \right\} d\Omega_l dt &= \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left\{ \Phi(x, y) \frac{\partial C}{\partial t}(x, y, t) \right\} dy dx dt \\
&= \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \left\{ \Phi(x, y) C(x, y, t) \right\}_{t_n}^{t_{n+1}} dy dx \\
&= \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \left\{ \Phi(x, y) C(x, y, t_{n+1}) \right\} - \left\{ \Phi(x, y) C(x, y, t_n) \right\} dy dx \\
&= \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \left\{ \Phi(x, y) C(x, y, t_{n+1}) \right\} dy dx - \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \left\{ \Phi(x, y) C(x, y, t_n) \right\} dy dx
\end{aligned}$$

Alors

$$\begin{aligned}
\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Omega_l} \left\{ \Phi(x, y) \frac{\partial C}{\partial t}(x, y, t) \right\} d\Omega_l dt &\simeq \Phi_{i,j} \Delta x \Delta y C_{i,j}^{n+1} - \Phi_{i,j} \Delta x \Delta y C_{i,j}^n \\
&\simeq \Phi_{i,j} \Delta x \Delta y \left\{ C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n \right\}
\end{aligned}$$

Ainsi l'intégrale(*) est approchée par :

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Omega_l} \left\{ \Phi(x, y) \frac{\partial C}{\partial t}(x, y, t) \right\} d\Omega_l dt \simeq \Phi_{i,j} \Delta x \Delta y \left\{ C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n \right\} \quad (2.30)$$

Discretisation de (**), en tenant compte du fait que le bord $\partial\Omega_l$ de la cellule Ω_l est constitué de quatre segments, c'est-à-dire $\partial\Omega_l = \Gamma_{l_1} \cup \Gamma_{l_2} \cup \Gamma_{l_3} \cup \Gamma_{l_4}$:

$$\begin{aligned}
\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\partial\Omega_l} \left\{ \Phi(x, y) D(C(x, y, t) \nabla C) \cdot \vec{n} \right\} d\sigma dt &= \\
&- \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Gamma_{l_1}} \left\{ \Phi(x, y) D(C(x, y, t) \nabla C) \cdot \vec{j} \right\} dx dt \\
&+ \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Gamma_{l_2}} \left\{ \Phi(x, y) D(C(x, y, t) \nabla C) \cdot \vec{i} \right\} dy dt \\
&+ \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Gamma_{l_3}} \left\{ \Phi(x, y) D(C(x, y, t) \nabla C) \cdot \vec{j} \right\} dx dt \\
&- \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Gamma_{l_4}} \left\{ \Phi(x, y) D(C(x, y, t) \nabla C) \cdot \vec{i} \right\} dy dt
\end{aligned} \quad (2.31)$$

Dans un but de simplification et en vue d'éviter l'intégration des dérivées croisées, on a choisi un tenseur de diffusion diagonal, c'est à dire de la forme

$$D = \begin{pmatrix} D_{11}(x, y) & 0 \\ 0 & D_{22}(x, y) \end{pmatrix}$$

Ainsi

$$D\nabla C = \begin{pmatrix} D_{11}(x, y) \frac{\partial C}{\partial x} \\ D_{22}(x, y) \frac{\partial C}{\partial y} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\partial\Omega_i} \left\{ \Phi(x, y) D(C(x, y, t)) \nabla C \cdot \vec{n} \, d\sigma dt \right\} = \\ - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \Phi(x, y_{j-\frac{1}{2}}) D_{22}(x, y_{j-\frac{1}{2}}) \frac{\partial C}{\partial y}(x, y_{j-\frac{1}{2}}, t) \, dx dt \\ + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \Phi(x_{i+\frac{1}{2}}, y) D_{11}(x_{i+\frac{1}{2}}, y) \frac{\partial C}{\partial x}(x_{i+\frac{1}{2}}, y, t) \, dy dt \\ + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \Phi(x, y_{j+\frac{1}{2}}) D_{22}(x, y_{j+\frac{1}{2}}) \frac{\partial C}{\partial y}(x, y_{j+\frac{1}{2}}, t) \, dx dt \\ - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \Phi(x_{i-\frac{1}{2}}, y) D_{11}(x_{i-\frac{1}{2}}, y) \frac{\partial C}{\partial x}(x_{i-\frac{1}{2}}, y, t) \, dy dt. \quad (2.32) \end{aligned}$$

Les quatre termes constituent les flux de chaque côté de la cellule ou de volume de contrôle. Pour l'approximation du temps t , nous faisons deux choix. Le premier consiste à fixer $t = t_n$, ce qui correspond au schéma d'Euler explicite. Le deuxième consiste à fixer $t = t_{n+1}$ et correspond au schéma d'Euler implicite.

2.3.3 Schéma d'Euler explicite

Considérons l'équation (2.32). En approchant chaque terme.

$$\begin{aligned} A_1 &= - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \Phi(x, y_{j-\frac{1}{2}}) D_{22}(x, y_{j-\frac{1}{2}}) \frac{\partial C}{\partial y}(x, y_{j-\frac{1}{2}}, t) \, dx dt \\ &= - \left\{ \Phi(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}) D_{22}(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}) \right\} \left(\frac{C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n}{\Delta y} \right) \Delta x \Delta t \quad (2.33) \end{aligned}$$

On approche le facteur $\left\{ \Phi(x, y_{j-\frac{1}{2}}) D_{22}(x, y_{j-\frac{1}{2}}) \right\}$ par la moyenne harmonique entre les cellules $(i, j-1)$ et (i, j) . on obtient

$$\left\{ \Phi(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}) D_{22}^n(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}) \right\} = 2 \left[\frac{[\Phi(x_i, y_{j-1}) D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] [\Phi(x_i, y_j) D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi(x_i, y_{j-1}) D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] + [\Phi(x_i, y_j) D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right] \quad (2.34)$$

En remplaçant (2.34) dans (2.33) on a

$$A_1 = -2 \left[\frac{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right] \left[\frac{C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n}{\Delta y} \right] \Delta x \Delta t \quad (2.35)$$

En considérant toujours (2.32), on approche le deuxième terme

$$\begin{aligned} A_2 &= - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \Phi(x_{i-\frac{1}{2}}, y) D_{11}(x_{i-\frac{1}{2}}, y) \frac{\partial C}{\partial x}(x_{i-\frac{1}{2}}, y, t) dy dt \\ &= - \left\{ \Phi(x_{i-\frac{1}{2}}, y) D_{11}(x_{i-\frac{1}{2}}, y) \right\} \left(\frac{C_{i,j}^n - C_{i-1,j}^n}{\Delta x} \right) \Delta y \Delta t \quad (2.36) \end{aligned}$$

De même On approche l'expression $\left\{ \Phi(x_{i-\frac{1}{2}}, y) D_{11}(x_{i-\frac{1}{2}}, y) \right\}$ par une moyenne harmonique entre les cellules $(i-1, j)$ et (i, j) , on obtient

$$\left\{ \Phi(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j) D_{11}^n(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j) \right\} = 2 \left[\frac{[\Phi(x_{i-1}, y_j) D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] [\Phi(x_i, y_j) D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi(x_{i-1}, y_j) D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] + [\Phi(x_i, y_j) D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right]$$

$$A_2 = -2 \left[\frac{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right] \left[\frac{C_{i,j}^n - C_{i-1,j}^n}{\Delta x} \right] \Delta y \Delta t \quad (2.37)$$

Dans l'équation on approche le flux en dessus de la cellule par

$$\begin{aligned} A_3 &= + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \Phi(x, y_{j+\frac{1}{2}}) D_{22}(x, y_{j+\frac{1}{2}}) \frac{\partial C}{\partial y}(x, y_{j+\frac{1}{2}}, t) dx dt \\ &= \left\{ \Phi(x, y_{j+\frac{1}{2}}) D_{22}(x, y_{j+\frac{1}{2}}) \right\} \left(\frac{C_{i,j+1}^n - C_{i,j}^n}{\Delta y} \right) \Delta x \Delta t \end{aligned}$$

Avec

$$\left\{ \Phi(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}) D_{22}^n(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}) \right\} = 2 \left[\frac{[\Phi(x_i, y_{j+1}) D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] [\Phi(x_i, y_j) D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi(x_i, y_{j+1}) D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] + [\Phi(x_i, y_j) D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right]$$

$$A_3 = 2 \left[\frac{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right] \left[\frac{C_{i,j+1}^n - C_{i,j}^n}{\Delta y} \right] \Delta x \Delta t \quad (2.38)$$

De façon analogue on détermine le flux à gauche de la cellule en utilisant toujours l'expression qui définit le flux à gauche dans l'équation (2.32)

$$\begin{aligned} A_4 &= + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \Phi(x_{i+\frac{1}{2}}, y) D_{11}(x_{i+\frac{1}{2}}, y) \frac{\partial C}{\partial x}(x_{i+\frac{1}{2}}, y, t) dy dt \\ &= \left\{ \Phi(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j) D_{11}(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j) \right\} \left(\frac{C_{i+1,j}^n - C_{i,j}^n}{\Delta y} \right) \Delta x \Delta t \end{aligned}$$

Avec

$$\left\{ \Phi(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j) D_{11}^n(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j) \right\} = 2 \left[\frac{[\Phi(x_i, y_j) D_{11}^n(x_i, y_j)] [\Phi(x_{i+1}, y_j) D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)]}{[\Phi(x_i, y_j) D_{11}^n(x_i, y_j)] + [\Phi(x_{i+1}, y_j) D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)]} \right]$$

$$A_4 = 2 \left[\frac{[\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)] [\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)]}{[\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)] + [\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)]} \right] \left[\frac{C_{i+1,j}^n - C_{i,j}^n}{\Delta x} \right] \Delta y \Delta t \quad (2.39)$$

En remplaçant A_1, A_2, A_3 et A_4 dans l'équation (2.32), on obtiens alors

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\partial\Omega_l} \left\{ \Phi(x, y) D(C(x, y, t)) \nabla C \right\} \cdot \vec{n} d\sigma dt = A_1 + A_2 + A_3 + A_4 = A \quad (2.40)$$

En discrétisant (***), on a

$$\begin{aligned} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Omega_l} f(x, y, t) d\Omega_l dt &= \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(x, y, t) dy dx dt \\ &\simeq \Delta t \Delta x \Delta y f_{i,j}^n \end{aligned}$$

Ainsi l'intégrale(***)est approchée par :

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Omega_l} f(x, y, t) d\Omega_l dt \simeq \Delta t \Delta x \Delta y f_{i,j}^n. \quad (2.41)$$

Dans l'équation générale (2.29) les équations (2.30), (2.40), (2.41) et on obtient

$$\begin{aligned}
C_{i,j}^{n+1} &\approx C_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Phi_{i,j}} f_{i,j}^n \\
&- \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})][\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n \right) \right\} \\
&+ \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)][\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i+1,j}^n - C_{i,j}^n \right) \right\} \\
&+ \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})][\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j+1}^n - C_{i,j}^n \right) \right\} \\
&- \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)][\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j}^n - C_{i-1,j}^n \right) \right\}.
\end{aligned} \tag{2.42}$$

Discrétisation des cellules de bord

En partant de l'équation (2.42), la discrétisation des cellules de bords (Nord, Sud, Est, Ouest) donnent avec conditions de Neumann homogènes aux bords :

■ Discrétisation de la cellule du bord gauche

$$\begin{aligned}
C_{i,j}^{n+1} &\approx C_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Phi_{i,j}} f_{i,j}^n \\
&- \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})][\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n \right) \right\} \\
&+ \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)][\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i+1,j}^n - C_{i,j}^n \right) \right\} \\
&+ \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})][\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j+1}^n - C_{i,j}^n \right) \right\}.
\end{aligned} \tag{2.43}$$

De façon analogue pour discrétiser les autres cellules de coins tout en tenant compte des indices des cellules et des positions.

■ Discrétisation d'une cellule de bord Sud

On obtiens l'équation suivante

$$\begin{aligned}
C_{i,j}^{n+1} &\approx C_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Phi_{i,j}} f_{i,j}^n \\
&+ \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i+1,j}^n - C_{i,j}^n \right) \right\} \\
&+ \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j+1}^n - C_{i,j}^n \right) \right\} \\
&- \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j}^n - C_{i-1,j}^n \right) \right\}.
\end{aligned} \tag{2.44}$$

■ Discrétisation d'une cellule de bord Est

$$\begin{aligned}
C_{i,j}^{n+1} &\approx C_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Phi_{i,j}} f_{i,j}^n \\
&- \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n \right) \right\} \\
&+ \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j+1}^n - C_{i,j}^n \right) \right\} \\
&- \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j}^n - C_{i-1,j}^n \right) \right\}.
\end{aligned} \tag{2.45}$$

■ Discrétisation d'une cellule de bord Nord

$$\begin{aligned}
C_{i,j}^{n+1} &\approx C_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Phi_{i,j}} f_{i,j}^n \\
&- \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})][\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} (C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n) \right\} \\
&+ \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)][\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} (C_{i+1,j}^n - C_{i,j}^n) \right\} \\
&- \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)][\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} (C_{i,j}^n - C_{i-1,j}^n) \right\}.
\end{aligned} \tag{2.46}$$

** Discrétisation des cellules des coins du maillage

En partant de l'équation (2.42), la discrétisation des cellules de coins (coin Sud-Ouest, Sud-Est, Nord-Est et Nord-Ouest) donnent avec conditions de Neumann homogènes aux bords :

◆ Discrétisation de la cellule Sud-Ouest

$$\begin{aligned}
C_{i,j}^{n+1} &\approx C_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Phi_{i,j}} f_{i,j}^n \\
&+ \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i+1,j}^n - C_{i,j}^n \right) \right\} \\
&+ \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j+1}^n - C_{i,j}^n \right) \right\}
\end{aligned} \tag{2.47}$$

De façon analogue pour discrétiser les autres cellules de coins tout en tenant compte des indices des cellules et des positions.

◆ Discrétisation de la cellule de coin Sud-Est

$$\begin{aligned}
C_{i,j}^{n+1} &\approx C_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Phi_{i,j}} f_{i,j}^n \\
&+ \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j+1}^n - C_{i,j}^n \right) \right\} \\
&- \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j}^n - C_{i-1,j}^n \right) \right\}.
\end{aligned} \tag{2.48}$$

◆ Discrétisation de la cellule coin Nord-Est

$$\begin{aligned}
C_{i,j}^{m+1} &\approx C_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Phi_{i,j}} f_{i,j}^n \\
&- \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})][\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} (C_{i,j}^m - C_{i,j-1}^m) \right\} \\
&- \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)][\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} (C_{i,j}^m - C_{i-1,j}^m) \right\}.
\end{aligned} \tag{2.49}$$

◆ Discrétisation de la cellule de coin Nord-Ouest

$$\begin{aligned}
C_{i,j}^{m+1} &\approx C_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Phi_{i,j}} f_{i,j}^n \\
&- \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})][\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} (C_{i,j}^m - C_{i,j-1}^m) \right\} \\
&+ \left\{ \frac{2\Delta t}{\Phi_{i,j}(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)][\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} (C_{i+1,j}^m - C_{i,j}^m) \right\}.
\end{aligned} \tag{2.50}$$

2.3.4 Schéma d'Euler implicite

On prend $t = t_{n+1}$ dans (2.32) et (2.41). tenant compte de (2.30), l'équation (2.29) devient

$$\begin{aligned}
& \Phi_{i,j} \left\{ C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n \right\} \\
& + \left\{ \frac{2\Delta t}{(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j-1}^{n+1} \right) \right. \\
& - \left\{ \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i+1,j}^{n+1} - C_{i,j}^{n+1} \right) \right. \\
& - \left\{ \frac{2\Delta t}{(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j+1}^{n+1} - C_{i,j}^{n+1} \right) \right. \\
& + \left. \left\{ \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j}^{n+1} - C_{i-1,j}^{n+1} \right) \right. \\
& \left. \left. \left. \approx \Delta t f_{i,j}^{n+1} \right\} \right. \right. \right. \quad (2.51)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \Phi_{i,j} C_{i,j}^{n+1} \\
& + \left\{ \frac{2\Delta t}{(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j-1}^{n+1} \right) \right. \\
& - \left\{ \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i+1,j}^{n+1} - C_{i,j}^{n+1} \right) \right. \\
& - \left\{ \frac{2\Delta t}{(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j+1}^{n+1} - C_{i,j}^{n+1} \right) \right. \\
& + \left. \left\{ \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} \left(C_{i,j}^{n+1} - C_{i-1,j}^{n+1} \right) \right. \\
& \left. \left. \left. \approx \Delta t f_{i,j}^{n+1} + \Phi_{i,j} C_{i,j}^n \right\} \right. \right. \right. \quad (2.52)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left\{ \Phi_{i,j} + \frac{2\Delta t}{(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j-1}D_{22}^n(x_i, y_{j-1})][\Phi_{i,j}D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j-1}D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] + [\Phi_{i,j}D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \right. \\
& \quad + \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i+1,j}D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)][\Phi_{i,j}D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i+1,j}D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] + [\Phi_{i,j}D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} \\
& \quad + \frac{2\Delta t}{(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j+1}D_{22}^n(x_i, y_{j+1})][\Phi_{i,j}D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j+1}D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] + [\Phi_{i,j}D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \\
& \quad + \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i-1,j}D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)][\Phi_{i,j}D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i-1,j}D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] + [\Phi_{i,j}D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} \Big\} C_{i,j}^{m+1} \\
& \quad - \frac{2\Delta t}{(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j-1}D_{22}^n(x_i, y_{j-1})][\Phi_{i,j}D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j-1}D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] + [\Phi_{i,j}D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} C_{i,j-1}^{m+1} \\
& \quad - \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i+1,j}D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)][\Phi_{i,j}D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i+1,j}D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] + [\Phi_{i,j}D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} C_{i+1,j}^{m+1} \\
& \quad - \frac{2\Delta t}{(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j+1}D_{22}^n(x_i, y_{j+1})][\Phi_{i,j}D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j+1}D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] + [\Phi_{i,j}D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} C_{i,j+1}^{m+1} \\
& \quad - \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i-1,j}D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)][\Phi_{i,j}D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i-1,j}D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] + [\Phi_{i,j}D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} C_{i-1,j}^{m+1} \\
& \qquad \qquad \qquad \approx \Delta t f_{i,j}^{n+1} + \Phi_{i,j} C_{i,j}^{m+1}. \quad (2.53)
\end{aligned}$$

Pour simplifier les écritures, on re-indexe tel que en posant

$$l = (j - 1) * N + i$$

A partir de l'équation (2.52) on obtient un système linéaire que nous allons résoudre avec une méthode itérative de Gauss-Seidel

$$\mathbf{K.C} = \mathbf{B}$$

où \mathbf{K} est une matrice creuse $l \times l$, \mathbf{C} est un vecteur contenant les valeurs de la concentration que l'on veut déterminer en chaque nœud et \mathbf{B} est le second membre.

$$\begin{pmatrix}
A_{l,l} & A_{l,l+1} & 0 & \ddots & A_{l,l+N} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
A_{l,l-1} & A_{l,l} & A_{l,l+1} & 0 & 0 & A_{l,l+N} & 0 & 0 & 0 \\
0 & A_{l,l-1} & A_{l,l} & \ddots & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\
\ddots & 0 & \ddots & A_{l,l} & A_{l,l+1} & 0 & 0 & A_{l,l+N} & 0 \\
0 & \ddots & 0 & A_{l,l-1} & \ddots & A_{l,l+1} & 0 & 0 & A_{l,l+N} \\
A_{l,l-N} & 0 & 0 & 0 & A_{l,l-1} & A_{l,l} & A_{l,l+1} & 0 & 0 \\
0 & \ddots & 0 & 0 & 0 & A_{l,l-1} & A_{l,l} & A_{l,l+1} & 0 \\
0 & \ddots & A_{l,l-N} & 0 & 0 & 0 & A_{l,l-1} & A_{l,l} & A_{l,l+1} \\
0 & 0 & 0 & A_{l,l-N} & 0 & 0 & 0 & A_{l,l-1} & A_{l,l}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
C_1 \\
\vdots \\
C_{l-N} \\
\vdots \\
C_{l-1} \\
C_l \\
C_{l+1} \\
\vdots \\
C_{l+N} \\
\vdots
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
B_1 \\
\vdots \\
B_{l-N} \\
\vdots \\
B_{l-1} \\
B_l \\
B_{l+1} \\
\vdots \\
B_{l+N} \\
\vdots
\end{pmatrix}$$

$\underbrace{\hspace{15em}}_{\mathbf{B}}$
 $\underbrace{\hspace{15em}}_{\mathbf{C}}$

La matrice \mathbf{K} étant à diagonale strictement dominante, la méthode de Gauss-Seidel pour la résolution de ce système converge. Pour des raisons de stabilité numérique nous présenterons essentiellement les résultats obtenus avec le schéma d'Euler implicite.

Avec

$$\begin{aligned}
A_{l,l} = & \Phi_{i,j} + \frac{2\Delta t}{(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \\
& + \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\} \\
& + \frac{2\Delta t}{(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\} \\
& + \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\}. \quad (2.54)
\end{aligned}$$

$$A_{l,l-N} = -\frac{2\Delta t}{(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j-1} D_{22}^n(x_i, y_{j-1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\}. \quad (2.55)$$

$$A_{l,l+1} = -\frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i+1,j} D_{11}^n(x_{i+1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\}. \quad (2.56)$$

$$A_{l,l+N} = -\frac{2\Delta t}{(\Delta y)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i,j+1} D_{22}^n(x_i, y_{j+1})] + [\Phi_{i,j} D_{22}^n(x_i, y_j)]} \right\}. \quad (2.57)$$

$$A_{l,l-1} = -\frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ \frac{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]}{[\Phi_{i-1,j} D_{11}^n(x_{i-1}, y_j)] + [\Phi_{i,j} D_{11}^n(x_i, y_j)]} \right\}. \quad (2.58)$$

Chapitre 3

Résultats expérimentaux

Dans cette partie nous allons confronter notre modèle mathématique à une expérience de laboratoire .

3.1 Expérience du laboratoire

L'expérience qui a permis de faire cette étude a été menée au laboratoire du Département de Génie Mécanique de l'Ecole Nationale Supérieure Polytechnique(ENSP) par le Docteur Narcisse MALANDA. L'expérience consiste à placer un réservoir en béton construit au laboratoire, contenant l'eau potable dans un milieu saturé en eau polluée par l'ammoniac (NH_3).

Le dispositif expérimental mis en place comporte :

- un bac en plastique (polyvinyle)
- une cuve en béton contenant l'eau potable
- du sable fin saturé en eau polluée par le NH_3



FIGURE 3.1 – Bac à eau en plastique

3.2 Expériences numériques

la méthode utilisée pour la détermination des valeurs de concentration de NH_3 dans la cuve en béton contenant l'eau potable est la spectrophotométrie. Toutes les mesures ont été prises à l'aide d'un colorimètre de marque HACH DR890. L'expérience se déroule ainsi qu'il suit :

- Prélever l'eau du réservoir en béton à analyser (30 ml) ;
- Mettre en marche le spectrophotomètre puis entrer le numéro du programme mémorisé pour, NH_3 ;
- Presser le code 64 ;
- Remplir une seconde cuvette avec 10 ml d'échantillon ;
- Ajouter un comprimé de salicylate (ammoniac no 1) dans chaque cuvette ;
- Boucher les deux cuvettes et agiter pour dissoudre ;
- Attendre une période de réaction de 3 minutes ;
- Après les 3 minutes, ajouter un comprimé de cyanurate alcalin dans chaque cuvette. Boucher les deux cuvettes et agiter pour dissoudre le réactif. La période de réaction est 15 minutes ;
- Après les 15 minutes, placer l'échantillon préparé dans le puits de mesure. Ajouter le capot de l'appareil pour couvrir la cuvette puis faire la lecture.

Note : En présence de l'ammoniac, une coloration verte se développe, dont l'intensité est fonction de la concentration de l'ammoniac dans l'échantillon. Voir [36, page 105]

3.3 La loi de diffusion

Les phénomènes " non linéaires " de la diffusion de l'humidité dans le béton pour le traitement du problème de stockage, associé à la loi d'écoulement, un coefficient de diffusion dépendant de la concentration. La loi utilisée par N. MALANDA pour modéliser le phénomène en dimension 1 est :

$$D(C) = D_1 \left(\alpha + \frac{1 - \alpha}{1 + \left(\frac{C_{eq} - C(i,1)}{C_{eq}(1 - C_f)} \right)^{n_f}} \right)$$

$D_1 = 6,93 \cdot 10^{-19} m^2/s$ (coefficient de diffusion dans l'eau de l'ammoniac)

$0.025 \leq \alpha \leq 0.75$;

$C_f = 0.90$;

$0 \leq n_f \leq 16$;

$0 \leq C_{eq} \leq 1$ concentration initiale ;

$0 \leq \Phi \leq 1$ la porosité du sable.

Malheureusement pour nos simulations en dimension 2 cette loi de diffusion ne nous a pas permis d'obtenir des résultats acceptables. Il nous semble nécessaire de chercher une nouvelle corrélation entre le coefficient de diffusion et la concentration. Les résultats numériques proposés dans la suite de ce travail sont obtenus avec une diffusion constante $D_1 = 6,93.10exp(-12)$.

3.4 Résultats de laboratoire

L'expérience de laboratoire à démarrer le 30 juin 2014. Les résultats de mesure hebdomadaires de concentrations en ammoniac (NH_3) dans le réservoir en béton contenant l'eau potable sont donnés dans le tableau ci-après.

TABLE 3.1 – Mesure de concentration en NH_3 au laboratoire [36, page 139]

Date	Concentration initiale	Concentration en mg/l Echantillon 1	Concentration en mg/l Echantillon 2
07/07/2014	19,6 g/l (19600mg/l)	1,12	1,10
14/07/2014		1,80	1,86
21/07/2014		2,25	2,05
28/07/2014		2,87	2,55
04/08/2014		3,18	3,50

Deux dispositifs expérimentaux (Échantillon 1 et Échantillon 2) ont permis d'effectuer des mesures temporelles de concentration de NH_3 dans la cuve en béton.

On constate globalement une variation temporelle des résultats de concentration mesurés dans les deux échantillons.

Puisque les deux échantillons présentent les mêmes caractéristiques, on note :

- échantillon 1, les valeurs temporelles de concentration NH_3 varient entre 1,12 et 3,18 mg/l;

- échantillon 2, les valeurs temporelles de concentration NH_3 sont comprises entre 1,10 et 3,50mg/l.

Ces résultats mettent en évidence une diffusion de NH_3 (polluant) au travers les parois de la cuve en béton altérant ainsi, et ce progressivement, la qualité de l'eau potable contenue dans la cuve en béton.

3.5 Résultats sur la simulation

La figure 3.2 ci-dessous représente les différentes porosités du milieu hétérogène constituant le domaines (sable, béton et l'intérieure de la cuve). La figure 3.3 est

la concentration initiale en ammoniac dans le domaine. L'intérieure de la cuve et le béton du réservoir ne sont pas encore pollués par le NH_3 .

Les résultats obtenus pendant les tests de simulations numériques avec le schéma d'Euler implicite sont présentés dans les tableaux ci-dessous. Ils sont obtenus avec une valeur de diffusion $D = 6.93exp(-12)$, C_{moy} représente la concentration moyenne de NH_3 dans la cuve et C_{min} la concentration minimale de NH_3 dans la cuve. Les figures 3.4 et 3.5 représentent respectivement les simulations numériques après de d'une semaine et cinq semaines.

- :

TABLE 3.2 – Concentration : expérience 1- simulation numérique

Temps	Exp. lab1.	C_{moy}	C_{min}
1 ^{ere} Semaine	1.12.	0.79	0.18
2 ^{eme} Semaine	1.80	1.76	0.85
3 ^{eme} Semaine	2.25	2.52	1.64
4 ^{eme} Semaine	2.87	3.28	2.43
5 ^{eme} Semaine	3.18	3.977	3.171

TABLE 3.3 – Concentration : expérience 2- simulation numérique

Temps	Exp. lab2.	C_{moy}	C_{min}
1 ^{ere} Semaine	1.10.	0.79	0.18
2 ^{eme} Semaine	1.86	1.76	0.85
3 ^{eme} Semaine	2.05	2.52	1.64
4 ^{eme} Semaine	2.55	3.28	2.43
5 ^{eme} Semaine	3.50	3.977	3.171

Ces résultats semblent montrer que les résultats des expériences de laboratoire et les simulations numériques sont proches au début de l'expérience et deviennent parallèle jusqu'à la fin de l'expérience (à la cinquième semaine).

Il ressort de ces résultats une convergence physique entre les résultats des expériences et les simulations numériques.

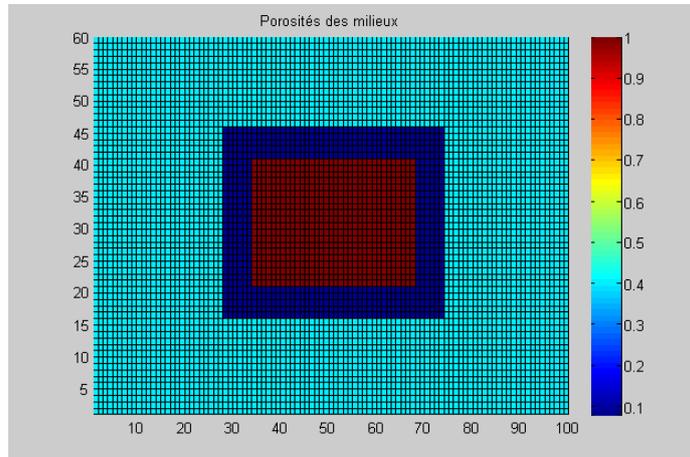


FIGURE 3.2 – Porosités des milieux

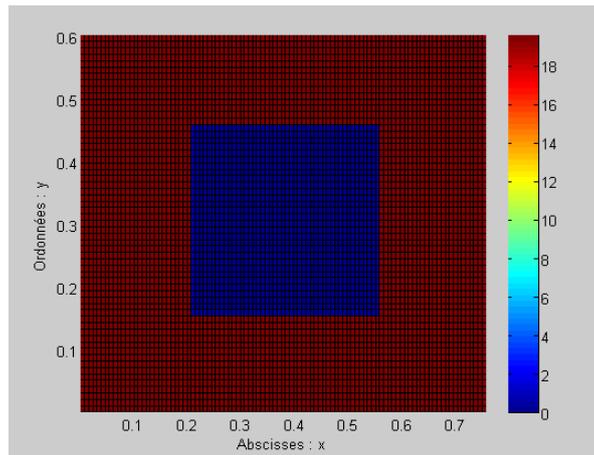


FIGURE 3.3 – Simulation à $t=0$

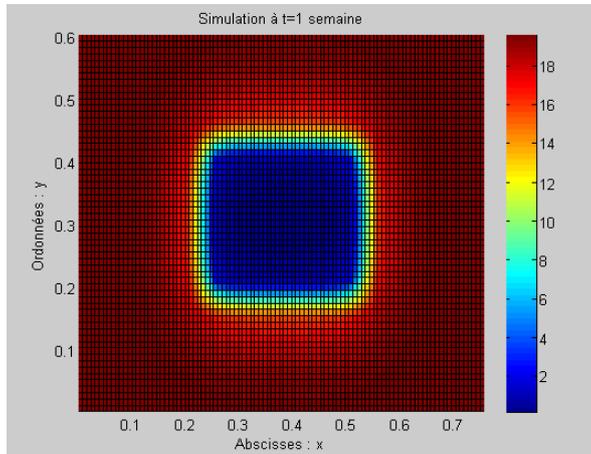


FIGURE 3.4 – Simulation à t=1 semaine

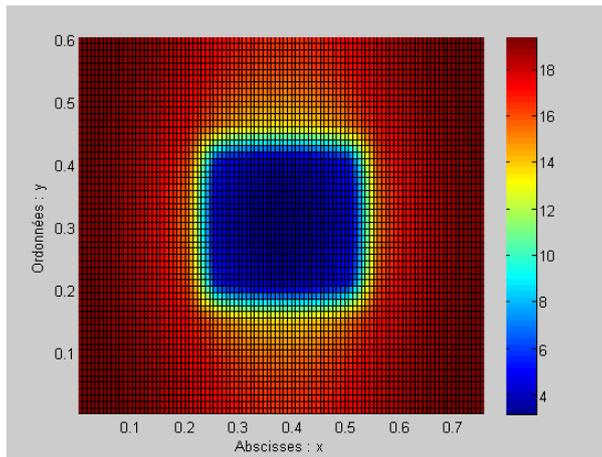


FIGURE 3.5 – Simulation à t=5 semaines

3.6 Comparaison des valeurs de concentration

Le tableau 3.4 ci-dessous, représente les résultats hebdomadaires obtenus expérimentalement avec les deux échantillons de laboratoire et ceux obtenus après simulations numériques. Ces résultats sont proches au début de l'expérience et deviennent parallèle jusqu'à la cinquième semaine. Ce qui semble montrer qu'il y a convergence.

TABLE 3.4 – Concentration : expériences - simulation numérique

Temps	Exp. lab1.	Exp. lab2.	C. moyenne	C. minimale
1 ^{ere} Semaine	1.12	1.10	0.79	0.18
2 ^{eme} Semaine	1.80	1.86	1.76	0.85
3 ^{eme} Semaine	2.25	2.05	2.52	1.64
4 ^{eme} Semaine	2.87	2.55	3.28	2.43
5 ^{eme} Semaine	3.18	3.50	3.977	3.171

L'analyse comparative des deux types de simulations (expérimentale et schéma numérique) est traduite dans les courbes ci-dessous Figure 3.6 et Figure 3.7, lesquelles représentent l'évolution des mesures des concentration (respectivement des échantillons 1 et 2) et les concentrations (moyenne et minimale) obtenues par simulations numériques. On note que :

- dans la première phase, c'est - à -dire au début de l'expérience, on obtient des concentrations de laboratoire légèrement aux-dessus des concentrations numériques moyennes dans la cuve ;
- dans la deuxième phase, on obtient des concentrations de laboratoire comprises entre les concentrations numériques minimales et moyennes dans la cuve.

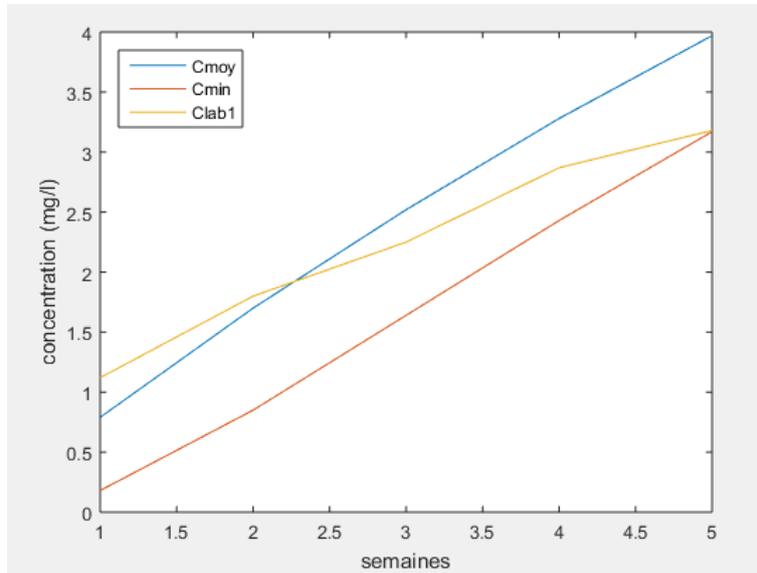


FIGURE 3.6 – Comparaison des concentrations en NH_3 de l'échantillon 1 avec les simulations minimales et moyennes

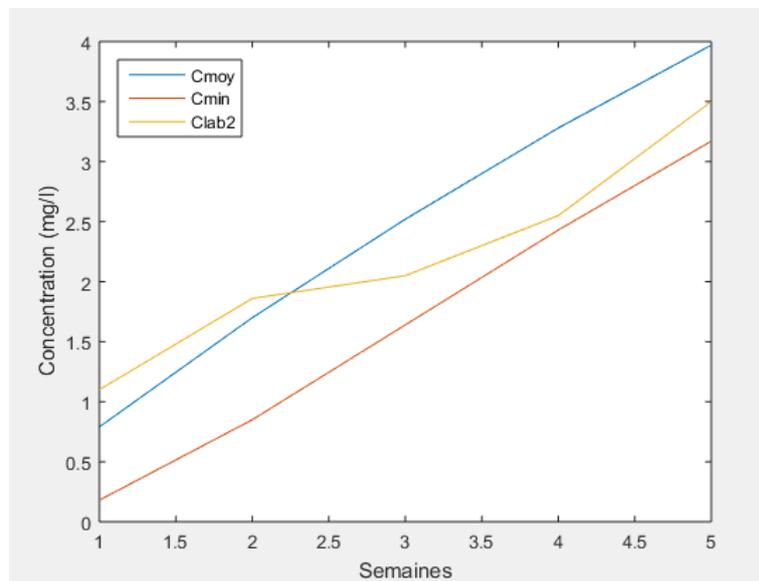


FIGURE 3.7 – Comparaison des concentrations en NH_3 de l'échantillon 2 avec les simulations minimales et moyennes

Conclusion

A l'issue de ce travail, le modèle numérique et les expériences de laboratoire confirment bien qu'il y a diffusion de polluant (NH_3) à travers les parois du béton de la bache à eau. Ce qui confirme les soupçons sur la qualité d'eau stockée dans les réservoirs enterrés. L'étanchéité du béton paraît inefficace pour la préservation de la potabilité de l'eau. Ce modèle mathématiques prédit numériquement l'évolution de la diffusion de polluant à travers la bache à eau, mais des améliorations restent encore à faire sur la recherche du coefficient ou du tenseur de diffusion.

De même, d'autres simulations peuvent être faites avec des schémas plus performant que ceux d'Euler explicite et implicite en dimension 3, afin d'avoir une vue plus générale du phénomène. Bien qu'il soit impossible d'atteindre une étanchéité absolue du béton par rapport à l'eau, l'on peut tenter de minimiser les risques de pollution des eaux stockées dans les réservoirs enterrés en envisageant l'obtention d'une porosité très réduite.

Il serait intéressant d'utiliser les outils mathématiques de contrôle optimal, lesquels grâce à un couplage entre l'équation du modèle et les résultats des expériences de laboratoire, peuvent permettre une meilleure identification du tenseur de diffusion.

Bibliographie

- [1] AZZI A. *Méthodes numériques appliquées aux calculs des écoulements et de transfert de chaleur*, Bucarest 1998.
- [2] A.E.S.N (Agence de l'Eau Seine de Normandie). *Les enjeux de la gestion de l'eau. Rapport d'étude*. Disponible en ligne sur <http://www.eau-seine-normandie.fr/fileadmin/.../AESN-COL=cours-4.1.pdf> du 04/11/2014. 2006.
- [3] Angelini O. et Brenner K. *Méthode de volumes finis sur maillages quelconques pour un problème parabolique non linéaire de convection-réaction-diffusion* , Université de Paris-Sud XI
- [4] ABABOU R. *Elements d'hydrologie souterraines*, Paris Janvier 2007.
- [5] AMIOTTE P. *Les eaux souterraine : notion de porosité et perméabilité*, Université de Bourgogne
- [6] Benkhaldoun F. *Méthode des volumes finis*, 16 avril 2010.
- [7] Brezis H. *Functional Analysis, Sobolev spaces and Partial Differential Equations*. Springer New York.
- [8] Bedard R. *Equations aux dérivées partielle*, juillet 2007.
- [9] Bernard S. *Tout savoir sur le béton et ses applications* ,Disponible en ligne sur <http://www.guidebeton.com/differents-types-beton>. 2015.
- [10] Berton-Ofouémé Y. *L'approvisionnement en eau des populations rurales au Congo-Brazzaville* ,Université Marien Ngouabi 2010.
- [11] Batu V. *Applied Flow and Solute Transport Modeling in aquifers* , Octobre2002.
- [12] COULOMB J. et JOBERT G. *Traite de Geophysique Interne. 1. Sismologie et Pesanteur*, MASSON 1973.
- [13] Cappelaere B et Guinot V. *Méthodes numériques appliquées*.
- [14] C.I.E(Centre d'Information sur l'Eau). *L'eau c'est quoi?* Disponible en ligne sur <http://www.cieau.com/tout-sur-l-eau-3/l-eau-c-est-quoi>. juin 2013.
- [15] DEGOUTTE G. et ROYET P. *aide-mémoire de mécanique des sols*. Ecole Nationale du Génie Rural des Eaux et des Forêts.
- [16] DJENNO NGOMANDA M. *Schémas volumes finis pour les lois de conservation 1D*. Université des Sciences et Techniques de Masuku, GABON

- [17] DESVEAUX V. *Contribution à l'approximation numérique des systèmes hyperboliques*. Thèse de Doctorat, Université de Nantes
- [18] Debelmas J. et Mascle G. *Les grandes structures géologiques*, Paris 2008.
- [19] E.E (Economie d'énergie). *L'Eau*. Disponible en ligne sur <http://www.economiedenergie.fr/L-eau-presentation-generale>.
- [20] E.N.S Lyon(Ecole Normale Supérieure de Lyon). *Etude de la porosité et de la perméabilité* Disponible en ligne sur [http://eduterre.ens-lyon.fr/nappe/html/scenarii/TP section-1. juin 2013](http://eduterre.ens-lyon.fr/nappe/html/scenarii/TP%20section-1.%20juin%202013).
- [21] Evans C. *Partial Differential Equations*. Graduate Studies in Mathematics, Volume 9.
- [22] FRANCQUEVILLE G. *La technologie du béton*
- [23] GILLI E. et C. Mangan, J. Mudry. *Hydrogéologie : Objets, méthodes, applications*. 2008
- [24] Goncalvès E. *Résolution numérique, discrétisation des edp et edo*. Septembre 2005
- [25] Gallouët T. et Eymard R. *Finite Volume Methods*, October 2006.
- [26] GUERAOUI K. *Analyse numérique méthode des volumes finis*, UNIVERSITÉ MOHAMMED V- AGDAL FACULTÉ DES SCIENCES Rabat 2009 – 2010.
- [27] Gallouët T. et Herbin R. *Université Aix Marseille Master 2 de mathématiques Equations aux dérivées partielles*, 30 octobre 2013.
- [28] Haddar H. *Généralité sur la résolution numérique d'équations aux dérivées partielles*, Université paris Dauphine
- [29] ITOUA-TSELE C. *approximation de la solution d'une équation de diffusion non linéaire par la méthode des volumes finis*, Mémoire de Master, E.N.S Université Marien Ngouabi : Congo 2014 – 2015.
- [30] Joly P. *Schémas numériques pour les équations Hyperboliques non linéaires 1D*.
- [31] Koeper G. *Equations aux dérivées partielles*, Université René Descartes paris 5
- [32] Krell S. *Schémas Volumes Finis en mécanique des fluides complexes*. THESE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE PROVENCE
- [33] Legendre G. *Introduction à l'analyse numérique et au calcul scientifique*, Université paris Dauphine 6 juillet 2014
- [34] Laurent-Gengoux P. *Analyse des équations aux dérivées partielles*. École Centrale Paris, Année 2006 – 2007.
- [35] Legout C. *Hydrologie : De la pluie au debit*.

- [36] MALANDA N. *Problème de stockage de l'eau à usage domestique dans les réservoirs en béton armé enterrés sous un sol humide et pollué dans la ville de Brazzaville*, Université Marien Ngouabi, Congo, 2014
- [37] Musy A. *Hydrologie Générale*. 2005
- [38] Musy A. et Higy C. *Hydrologie appliquée*, Bucarest 1998.
- [39] MABIALA B. *Modélisation des pollutions de sols par des composés hydrocarbonés : effets des hétérogénéités sur la dissolution*. Université Marien Ngouabi, Congo : 2009.
- [40] Marsily G. *Cours d'Hydrologie*. Université Paris VI Septembre 2004
- [41] MAMPOUYA H. *Intégration d'un problème elliptique par la méthode des volumes finis*, Mémoire de Master, E.N.S Université Marien Ngouabi : Congo 2013 – 2014.
- [42] Monasse L. *Analyse d'une méthode de couplage entre un fluide Compressible et une structure déformable*. These, Université Paris-Est
- [43] Nicoud F. et Jourdan F. *Simulation numérique avancée*,
- [44] NGARMADJI K. *Contribution à l'étude numérique des processus d'extinction des solutions des équations aux dérivées partielles de type paraboliques non linéaires*. Thèse de Doctorat de l'Université CHEIKH ANTA DIOP, SENEGAL Année 2013 – 2014.
- [45] Olive P. *Introduction à la géochimie des eaux continentales*, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6 1996.
- [46] Parriaux A. *Géologie base pour l'ingénieur : 2^{eme} édition*, 2009.
- [47] Renard F. *Cours d'hydrogéologie*, Octobre 2002.
- [48] S.E.F (Syndicat de l'eau de la Faye). *Petite définition pour mieux comprendre les mot de l'eau*. Disponible en ligne sur <http://www.siaep.faye.fr/services/diceaun>
- [49] SMIDA H. *SIGI conférence francophone*. 2009
- [50] Saar O. *The relationship Between Permeability, Porosity, and Microstructure in Vesicular Basalt*, University of Oregon juin 1998.
- [51] Samba G. and Nganga D. *Rainfall variability in Congo-Brazzaville 1932-2007*. *Int. J. Climatol*, Published online in wiley online library 20. 2011.
- [52] TRAORE A. *Contribution à la résolution numérique de problèmes de détection de pollution en milieu fluide à structure géométrique complexe*. Thèse de Doctorat, SENEGAL Année Novembre 2008,
- [53] ZINE A. *Détermination du champ de températures dans une cavité pleine en utilisant la méthode mixte volumes finis-élément finis*, UNIVERSITE DE OUARGLA FACULTE DES SCIENCES ET SCIENCES DE L'INGENIEUR