

Optimisation de la méthode des éléments finis mixtes hybrides pour la modélisation des écoulements variablement saturés

B. BELFORT^a, F. RAMASOMANANA^a, A. YOUNES^a, et F. LEHMANN^a

a. Laboratoire d'Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg (LHyGeS), 1 rue Blessig, 67084 Strasbourg
Université de Strasbourg – UMR 7517

Résumé :

Parmi les méthodes de résolution numérique utilisées en mécanique, la méthode des éléments finis mixtes hybrides (EFMH) constitue une approche récente et performante. Certaines techniques, notamment la condensation de la masse et le raffinement fictif, permettent d'améliorer la précision et la rapidité de cette méthode.

L'illustration est réalisée pour un problème d'écoulement 2D en milieu poreux variablement saturé qui est décrit selon une approche mécaniste par l'équation de Richards.

Abstract :

The mixed hybrid finite elements are a powerful method recently developed for the numerical resolution of mechanical problems. Various techniques including mass lumping and fictitious mesh refinement allow to improve both the accuracy and the efficiency of this method.

A mechanical approach based on Richards' equation is used to describe variably saturated flow in porous media. A difficult 2D problem shows the benefits of the method.

Mots clefs : Milieux poreux, équation de Richards, Éléments finis mixtes hybrides, oscillations

1 Modélisation des écoulements variablement saturés

1.1 Introduction

La gestion de l'eau constitue un enjeu majeur en raison de l'inégale répartition des ressources et de leur vulnérabilité face aux pollutions. La compréhension des processus qui régissent les phénomènes d'écoulement et de transport en milieux poreux est donc déterminante. Au-delà de cette étape, dans laquelle elle s'inscrit complètement, la modélisation expérimentale et/ou numérique constitue un outil essentiel de prévision ayant, entre autre, pour objet de fournir des arguments « scientifiques » d'aide à la décision. La modélisation est sujette à des attentes fortes, qui justifient nos efforts d'amélioration sur le plan de l'efficacité des modèles, de la précision des solutions et de la quantification des erreurs.

Dans le domaine des écoulements souterrains, l'utilisation des équations de comportement et de conservation a contribué au développement de modèles mécanistes performants en termes de compréhension physique et de simulations prévisionnelles. Par rapport aux milieux poreux saturés, rencontrés généralement en profondeur et qui peuvent s'avérer très complexes en termes d'hétérogénéités, les écoulements en milieux variablement saturés, dits de sub-surface, procèdent dans un domaine comportant éventuellement de l'air en plus des phases solide (matrice poreuse) et liquide. Les phénomènes naturels, tels que la recharge ou l'intumescence de nappe par exemple, associent des écoulements en milieux saturés et non saturés.

1.2 Modèle mathématique

Du point de vue mécaniste, les écoulements en milieux poreux variablement saturés peuvent être décrits par l'équation de Richards (1931), qui combine l'équation de conservation de la masse (1) :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + S_s S_w(\theta) \frac{\partial H}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = f \quad (1)$$

et la loi de Darcy-Buckingham (2) (e.g. [1]) :

$$\mathbf{q} = -K(h) \cdot \nabla H \quad (2)$$

θ désigne la teneur en eau volumique ($L^3.L^{-3}$), t le temps (T), S_s le coefficient d'emménagement spécifique (L^{-1}), S_w la saturation relative de la phase liquide (-), H la charge hydraulique (L), \mathbf{q} le vecteur vitesse ($L.T^{-1}$), f le terme puits/sources (T^{-1}), K la conductivité hydraulique fonction de la pression ($L.T^{-1}$), $h = H - z$ la pression de la phase liquide (L) et z la coordonnée lu sur l'axe vertical orienté positivement vers le haut.

La résolution de ce problème mathématique requiert la définition d'un domaine assorti de conditions aux limites H_D (condition de Dirichlet à charge hydraulique imposée) et/ou Q_N (condition de Neuman à flux imposé) sur les frontières du domaine, et de conditions initiales H_{init} .

1.3 Relations constitutives

La loi de Darcy, modifiée par Buckingham (2), tient compte de l'interdépendance entre les variables d'états h et θ et de leur influence sur la conductivité hydraulique (ou perméabilité). Différents modèles (Brooks-Corey, Brutsaert, van Genuchten,...) ont été proposés dans la littérature pour décrire la courbe de rétention d'eau, i.e. la relation entre h et θ , et l'évolution de la conductivité hydraulique $K(h)$. Le modèle de van Genuchten, modifié récemment par l'introduction d'une pression d'entrée d'air pour améliorer son efficacité à proximité de la saturation [2] [3], compte parmi les plus utilisés par les modélisateurs.

La saturation effective S_e (-), qui relie h et θ , est définie par l'équation (3),

$$S_e = \begin{cases} = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \frac{1}{S_E^*} \left[1 + (\alpha|h|)^n \right]^{-m}, & h < -h_e \\ = 1, & h \geq -h_e \end{cases}, \text{ avec } S_E^* = \left[1 + (\alpha h_e)^n \right]^{-m} \quad (3)$$

où θ_r représente la teneur en eau à saturation ($L^3.L^{-3}$), θ_s la teneur en eau résiduelle ($L^3.L^{-3}$), α un paramètre de forme lié à la taille moyenne des pores (L^{-1}), n un paramètre lié à la distribution des tailles de pores (-) et $m = 1 - 1/n$ (-). S_E^* désigne la saturation effective à la pression d'entrée d'air h_e (L).

La conductivité hydraulique est caractérisée par l'équation (5) :

$$K(S_e) = \begin{cases} K_s S_e^{1/2} \left\{ \frac{1 - \left[1 - (S_E^* S_e)^{1/m} \right]^m}{1 - (1 - S_E^{*1/m})^m} \right\}^2, & S_e < S_E^* \\ K_s, & S_e \geq S_E^* \end{cases} \quad (5)$$

avec K_s la conductivité à saturation ($L.T^{-1}$), S_e donnée par l'équation (3) et $n > 1$.

Rappelons que le modèle modifié de van Genuchten est équivalent au modèle classique lorsque $n \gg 2$ et $\alpha.h_e \ll 1$ ainsi qu'en condition de saturation.

2 Résolution numérique de l'équation de Richards

2.1 Etat de l'art

Au-delà des hypothèses qui limitent son utilisation, notamment la mobilité de l'air dans le sol, l'équation de Richards (1) est largement utilisée pour modéliser les écoulements en milieux poreux. Du point de vue mathématique, ce modèle conduit à une équation aux dérivées partielles de type parabolique non linéaire en condition non saturée et de type elliptique en condition saturée. A cette difficulté « typologique » s'ajoute la prise en compte des hétérogénéités du milieu.

Par rapport aux méthodes de type différences finies, éléments finis et volumes finis, la méthode des éléments finis mixtes hybrides (EFMH) permet une approximation simultanée des pressions et du champ de vitesse. Elle est par ailleurs bien adaptée aux équations elliptiques et paraboliques et s'avère très performante pour modéliser des milieux très hétérogènes, discrétisés avec des maillages irréguliers. En outre elle assure une conservation locale et globale de la masse. Ces éléments ont contribué à la généralisation de sa mise en œuvre depuis quelques années ([4][5] et [6] parmi d'autres).

La méthode EFMH conduit à un système matriciel caractérisé par une matrice symétrique et définie positive, qui ne respecte généralement pas le critère de M-Matrice [7] [8]. La vérification de cette propriété, qui nécessite une matrice non singulière avec des coefficients diagonaux positifs $m_{ii} > 0$ et des coefficients hors-diagonaux négatifs $m_{ij} < 0$, permet de garantir le respect du principe du maximum discret. Dans ce cas et en l'absence de termes puits/sources, la solution numérique ne présente pas d'extremum locaux ; les variables d'état et le champ de vitesse conserveraient alors leur sens physique.

Pour les équations elliptiques, les maillages triangulaires présentant des angles inférieures à $\pi / 2$ conduisent à une M-Matrice [9]. Cette condition sur le maillage n'est plus suffisante en présence d'équations paraboliques. Il convient alors de changer les fonctions de base utilisées lors de l'écriture variationnelle du problème [10] ou de recourir à une technique de condensation de la masse, couramment utilisée avec la méthode des éléments finis. Des quadratures numériques ont ainsi été proposées pour des maillages rectangulaires [11], et de manière plus anecdotique pour des maillages triangulaires [12].

Une nouvelle procédure de condensation de la masse proposée récemment [13], et testée avec succès sur des problèmes elliptiques en régime transitoire, permet de s'affranchir des formules de quadrature. De plus, elle s'applique indépendamment du type de maillage utilisé. L'objet de cette communication est de présenter cette méthode pour la résolution de l'équation de Richards et d'explicitier quelques pistes d'optimisation.

2.2 EFMH avec condensation de la masse

2.2.1 Démarche

La solution H du problème (1) est approchée sur l'élément E par les quantités suivantes :

H_E (resp. θ_E) $\in \mathbb{R}$: la valeur moyenne de H (resp. θ) sur l'élément E

$\text{TH}_{E,i}$ (resp. $\text{T}\theta_{E,i}$) $\in \mathbb{R}$: la valeur moyenne de H (resp. θ) sur l'arête(2D)/facette(3D) E_i (6)

$\mathbf{q}_E \in \text{RT0}$: l'approximation de $\mathbf{q} = -K(h)\nabla H$ sur E

Par la suite, le système matriciel caractérisant l'équation (1) est obtenu en suivant les étapes décrites ci-après.

- Le flux d'eau \mathbf{q}_E à travers l'élément E est obtenu en utilisant les fonction de base $(\omega_{E,i})$ de l'espace de Raviart-Thomas d'ordre 0 (RT0) :

$$\mathbf{q}_E = \sum_{i=1}^{\text{ne}} Q_{E,i} \boldsymbol{\omega}_{E,i} \quad (7)$$

où ne désigne le nombre d'arrêtes/facettes de E ($\text{ne} = 3$ pour un triangle et $\text{ne} = 4$ pour un quadrangle).

- $Q_{E,i}$ représente le flux quittant l'élément E par la $i^{\text{ème}}$ arrête/facette :

$$Q_{E,i} = \bar{Q}_{E,i} + \frac{Q_{E,s}}{\text{ne}} - \frac{|E|}{\text{ne}} \left(\frac{\partial \text{T}\theta_{E,i}}{\partial t} + S_s S_w \frac{\partial \text{TH}_{E,i}}{\partial t} \right) \quad (8)$$

où $|E|$ représente la surface (2D) ou le volume (3D) de l'élément E .

- $\bar{Q}_{E,i}$ est le flux correspondant au régime stationnaire sans terme puits/sources :

$$Q_{E,i} = \sum_{j=1}^{\text{ne}} \mathbf{M}_{E,ij}^{-1} (H_E - \text{TH}_{E,j}) = \alpha_{E,i} H_E - \sum_{j=1}^{\text{ne}} \mathbf{M}_{E,ij}^{-1} \text{TH}_{E,j} \quad (9)$$

avec $\mathbf{M}_{E,ij} = \int_E \omega_{E,i} K_E^{-1} \omega_{E,j}$ la matrice locale et $\alpha_{E,i} = \sum_{j=1}^{\text{ne}} \mathbf{M}_{E,ij}^{-1}$

- En raison des non-linéarités importantes entre $h - \theta$ et K , la teneur en eau est approchée par un développement de Taylor à l'ordre 1 en fonction de la charge :

$$\text{T}\theta_{E,i}^{n+1,k+1} \simeq \text{T}\theta_{E,i}^{n+1,k} + \text{TC}_{E,i}^{n+1,k} (\text{TH}_{E,i}^{n+1,k+1} - \text{TH}_{E,i}^{n+1,k}) \quad (10)$$

où TC_E désigne la capacité capillaire (L^{-1}), le pas de temps courant et k le compteur d'itérations.

- Les équations (9) et (10) sont injectées dans l'équation (8), qui devient :

$$Q_E^{n+1,k+1} = \sum_{j=1}^{ne} \tilde{N}_{E,ij}^{n+1,k} TH_{E,j}^{n+1,k+1} + \mathbf{F}_{E,i}^{n+1,k} \quad (11)$$

$$\text{avec } \tilde{N}_{E,ij}^{n+1,k} = \frac{\alpha_{E,i}^{n+1,k} \alpha_{E,j}^{n+1,k}}{\alpha_E^{n+1,k}} - (\mathbf{M}_{E,ij}^{n+1,k})^{-1} - \lambda_{E,i}^{n+1,k} TH_{E,i}^{n+1,k+1} \delta_{ij},$$

$$\alpha_E^{n+1,k} = \sum_{i=1}^{ne} \alpha_{E,i}^{n+1,k}, \quad \lambda_{E,i}^{n+1,k} = \frac{|E|}{ne \Delta t^n} (\mathbf{TC}_E^{n+1,k} + S_{s,E} S_{w,E}^{n+1,k}),$$

$$\text{et } \mathbf{F}_{E,i}^{n+1,k} = \frac{|E|}{ne} f_E^{n+1} - \frac{|E|}{ne \Delta t^n} (\mathbf{T}\theta_{E,i}^{n+1,k} - \mathbf{TC}_{E,i}^{n+1,k} TH_{E,i}^{n+1,k} - \mathbf{T}\theta_{E,i}^n - S_{s,E} S_{w,E}^{n+1,k} TH_{E,i}^n)$$

- Le système matriciel final est obtenu en écrivant la continuité des flux et des pressions sur chaque arrêtes/facettes du domaine : $TH_{E,i} = TH_{E',j}$ et $Q_{E,i} + Q_{E',j} = 0$ (les arrêtes/facettes i de l'élément E et j de l'élément E' sont adjacentes) et en considérant, le cas échéant, les conditions aux limites.

2.2.2 Analyse

Pour le système global, la propriété de M-Matrice est vérifiée lorsque la matrice locale $\tilde{N}_{E,ij}$ est aussi de type M. Rappelons que cette propriété est importante, par exemple lors de l'infiltration d'eau en sol initialement sec, pour éviter l'apparition d'oscillations dans le front d'humectation.

Pour les problèmes 1D, cette propriété est toujours vérifiée alors qu'elle est conditionnée par une relation entre taille de maille et pas de temps pour la méthode standard [14]. Pour les maillages 2D rectangulaires, les EFMH avec condensation de la masse, tout comme la méthode standard, ne permettent pas de vérifier la propriété de M-Matrice. Concernant les triangles, la méthode proposée permet, dans le cas d'une triangulation aigüe (angles $< \pi/2$), d'obtenir une M-Matrice indépendamment, d'un rapport spatio-temporel.

2.2.3 Optimisation : le raffinement fictif

Consécutivement à l'analyse précédente, le cas de maillage quadrangulaire reste problématique et la méthode des EFMH avec condensation de la masse ne permet pas d'éviter les oscillations non physiques. Une technique proposée consiste alors à considérer chaque quadrangle E comme l'agrégation de deux triangles (A et B , cf. figure 1). La pression intérieure TH_{int} ($= TH_{A,3} = TH_{B,3}$) introduite est ensuite exprimée en fonction des pressions relatives au quadrangle initial :

$$TH_{\text{int}}^{n+1} = \frac{-1}{\tilde{N}_{A,33} + \tilde{N}_{B,33}} \left(\sum_{j=1}^2 \tilde{N}_{A,3j} TH_{A,j}^{n+1} + F_{A,3}^{n+1} + \sum_{j=1}^2 \tilde{N}_{B,3j} TH_{B,j}^{n+1} + F_{B,3}^{n+1} \right) \quad (12)$$

Le système matriciel correspondant aux triangles fictifs est alors simplifié en injectant l'équation (12). Il s'apparente ainsi à un système matriciel sur la base des quadrangles d'origine, mais avec une combinaison de matrices locales modifiées issues des triangles fictifs [15].

Ainsi, lorsque la triangulation fictive est aigüe, le système matriciel final vérifie la propriété de M-Matrice.

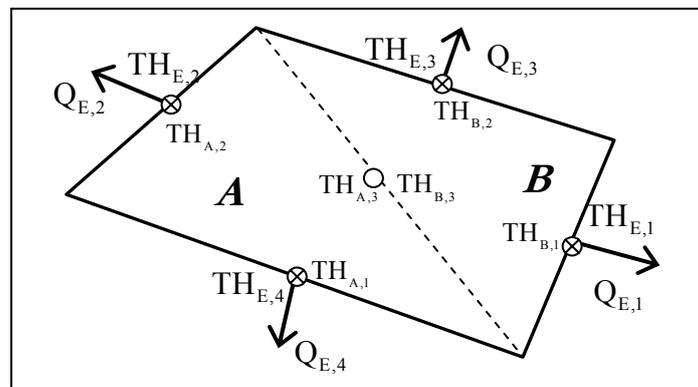


FIG. 1 - Principe et notations pour le raffinement fictif.

2.2.4 Résultats

Le tableau 1 décrit les caractéristiques (domaine, paramètres du sol, conditions initiales et aux limites) retenus pour le cas test traité. Il correspond à la propagation d'un front d'infiltration en sol homogène initialement sec, ce qui d'un point de vue numérique, pose des difficultés importantes pour éliminer les oscillations. Deux types de sol ont été utilisés.

Les maillages quadrangulaires de départ sont constitué de 625 (25x25), 2500 (50x50) et 6400 (80x80) éléments. Les méthodes utilisées et comparées sont i) les EFMH_{Std} standards, ii) les EFMH_C (avec condensation) et iii) les EFMH_{CR} (avec condensation et raffinement fictif).

La figure 1 rappelle les conditions de simulation et illustre l'évolution du front, tandis que le tableau 2 met en évidence l'efficacité de la méthode pour réduire les oscillations par rapport à l'approche standard.

Paramètres \ Problème	Infiltration 2D	
Dimension du domaine	$x \times z \in [0,100] \times [0,100]$ (cm)	
Caractéristiques pédologiques	Sol A de type sableux	Sol B de type argileux
	$\theta_r = 0.102$ (-) ; $\theta_s = 0.368$ (-)	$\theta_r = 0.106$ (-) ; $\theta_s = 0.4686$ (-)
	$\alpha = 0.0335$ (cm ⁻¹) ; $n = 2$ (-)	$\alpha = 0.0104$ (cm ⁻¹) ; $n = 1.3954$ (-)
	$h_e = 0.5$ cm ; $S_S = 1e^{-8}$ (cm ⁻¹) $K_S = 92.2e^{-4}$ (cm.s ⁻¹)	$h_e = 2$ cm ; $S_S = 1e^{-8}$ (cm ⁻¹) $K_S = 1.52e^{-4}$ (cm.s ⁻¹)
Conditions initiales	TH _{init} = -1000 cm TH = -1000 cm pour $z = z_{\min}$, Th _{x,zmin} = -1000 cm et Q _{latéral} = 0 cm.s ⁻¹	
Conditions aux limites	TH = 90 cm pour $z = z_{\max}$ et $x \in [0;25]$ (cm)	
	Q = 0 cm.s ⁻¹ pour $z = z_{\max}$ et $x \in [25;100]$ (cm)	
Temps de simulation	5400 s (sol A) et 21600 s (sol B)	

TAB. 1 – Paramètres utilisés pour les simulations.

Type de sol	Nb. mailles	Dépassement de la charge min. (%)			Temps CPU (s)		
		EFMH _{Std}	EFMH _C	EFMH _{CR}	EFMH _{Std}	EFMH _C	EFMH _{CR}
A	625	33.68	0.96	0.00	7.31	6.91	10.08
	2500	<i>Pas convergé</i>	0.70	0.00	<i>Pas convergé</i>	61.14	118.77
	6400	<i>Pas convergé</i>	0.54	0.00	<i>Pas convergé</i>	227.63	419.23
B	625	37.47	1.45	0.00	53.69	45.78	58.80
	2500	29.42	1.12	0.00	320.63	301.05	518.42
	6400	25.65	0.90	0.00	937.25	948.77	1483.75

TAB. 2 - Oscillations et temps de calcul pour les différentes méthodes – maillage – caractéristiques de sol.

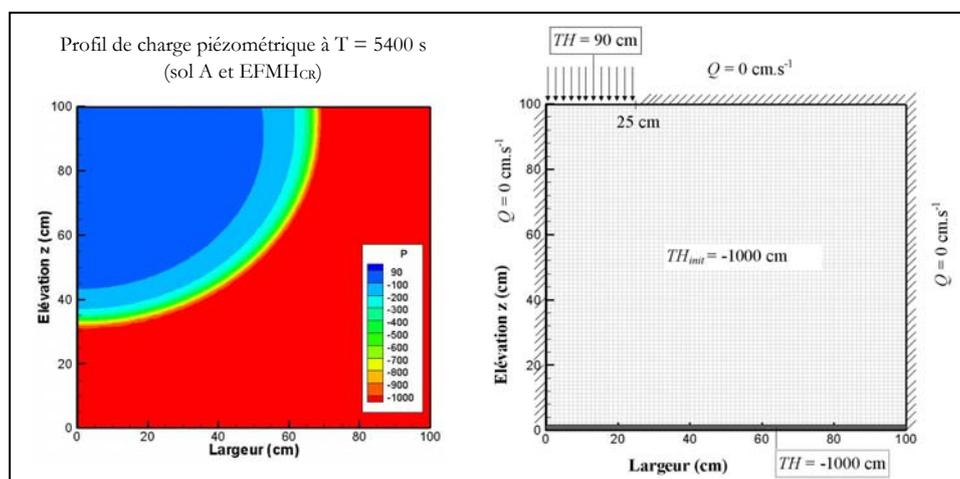


FIG. 2 – Illustration de l'avancée du front et du maillage dense avec conditions initiales et aux limites.

3 Conclusions

D'une manière générale, la modélisation de front raide constitue un problème numérique délicat à résoudre. Dans ce contexte, la méthode des EFMH rencontre également des difficultés pour éviter l'apparition d'oscillations non physiques.

Une technique de condensation de la masse a été présentée dans cet article pour traiter efficacement les équations aux dérivées partielles de types parabolique et elliptique. L'équation de Richards qui décrit les écoulements en milieux poreux variablement saturés, constitue le cadre mathématique pour la présentation de la méthode. Une analyse théorique et un exemple 2D numériquement difficile ont été explicités pour illustrer l'efficacité de la méthode. Ainsi, dans le cas d'une triangulation aigüe, les EFMH avec condensation de la masse permettent de vérifier la propriété de M-Matrice. Cette dernière constitue une condition suffisante pour le respect du principe du maximum discret. Le cas problématique des maillages quadrangulaires a également été étudié, et une optimisation basée sur un raffinement fictif triangulaire permet d'améliorer significativement les propriétés du système à résoudre. Par ailleurs, cette technique d'élimination des oscillations, qui peut être appliquée localement dans un maillage quadrangulaire, reste intéressante en termes de temps de calcul par rapport à un maillage triangulaire équivalent.

Enfin, il convient de rappeler que la méthode de condensation de la masse peut d'une part être enrichie avec des techniques de gestion automatique du pas de temps et d'autre part, être généralisée à d'autres problèmes de la mécanique.

References

- [1] Narasimhan T.N., Darcy's law and unsaturated flow, *Vadose Zone Journal*, 3:1059, 2004.
- [2] Vogel T., van Genuchten M. T. et Cislerova M., Effect of the shape of the soil hydraulic functions near saturation on variably-saturated flow predictions, *Advances in Water Resources*, 24(2):133-144, 2001.
- [3] Ippisch O., Vogel H.-J. et Bastian P., Validity Limits for the van Genuchten-Mualem Model and Implications for Parameter Estimation and Numerical Simulation, *Advances in Water Resources*, 29(12):1780-1789, 2006.
- [4] Mosé R., Siegel P., Ackerer P. et Chavent G., Application of the mixed hybrid finite element approximation in a groundwater flow model: Luxury or necessity? *Water Resources Research*, 30:3001–3012, 1994.
- [5] Bergamaschi L., Mantica S. et Saleri F., A mixed finite element–finite volume formulation of the black-oil model, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 20:970–997, 1998.
- [6] Younes, A., Ackerer P. et Chavent G., From mixed finite elements to finite volumes for elliptic PDEs in 2 and 3 dimensions, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 59:365–388, 2004.
- [7] Raviart P.A. et Thomas J.M., A mixed finite element method for second order elliptic problems. p. 292–315. In I. Galligani and E. Magenes (ed.) *Mathematical aspects of finite element methods*, Springer, New York, 1977.
- [8] Wheeler M.F., et Peszynska M., Computational engineering and science methodologies for modeling and simulation of subsurface applications, *Advances in Water Resources*, 25:1147–1173, 2002.
- [9] Brezzi F. et Fortin M., *Mixed and hybrid finite element methods*. Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [10] Marini L.D. et Pietra P., New mixed finite element schemes for current continuity equations, *International Journal for Computation and Mathematics in Electrical and Electronic Engineering (COMPEL)*, 9:257–268, 1990.
- [11] Chavent G. et Roberts J.E., A unified physical presentation of mixed, mixed hybrid finite elements and standard finite difference approximations for the determination of velocities in waterflow problems, *Advances in Water Resources*, 14:329–348, 1991.
- [12] Baranger J., Maitre J.F. et Oudin F., Application de la théorie des éléments finis mixtes à l'étude d'une classe de schémas aux volumes-différences finis pour les problèmes elliptiques, *Compte Rendu de l'Académie des Sciences*, 319:401–404, 1994.
- [13] Younes A., Ackerer P. et Lehmann F., A new mass lumping scheme for the mixed hybrid finite element method, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 67:89–107, 2006.
- [14] Belfort B. et Lehmann F., Comparison of equivalent conductivities for numerical simulation of one-dimensional unsaturated flow, *Vadose Zone Journal*, 4:1191–1200, 2005.
- [15] Belfort B., Ramasomanana F., Younes A. et Lehmann F., An Efficient Lumped Mixed Hybrid Finite Element Formulation for Variably Saturated Groundwater Flow, *Vadose Zone Journal*, in press.