



République Tunisienne  
Ministère de l'Enseignement supérieur et de la Recherche  
scientifique  
Université de Tunis El Manar  
École Nationale d'Ingénieurs de Tunis



# THÈSE

Présentée Par

**Marwen BEN REFIFA**

**EN VUE DE L'OBTENTION DU GRADE DE  
DOCTEUR de l'École Nationale  
d'Ingénieurs de Tunis**

**SPÉCIALITÉ GÉNIE  
HYDRAULIQUE**

**Titre :**

*Optimisation numérique et parallélisation du code GEODENS  
pour le calcul des écoulements et du transport réactif dans les  
milieux poreux :  
Applications au dôme de sel avec dissolution et à la lagune du  
domaine marin*

Le Mardi 27/10/2020 à 14h00

Devant Le Jury composé de :

M. Mahmoud Moussa	Professeur, École Nationale d'Ingénieurs de Tunis	Président
Mr. Maher Mouakher	Professeur, École Nationale d'Ingénieurs de Tunis	Examinateur
Mme NajlaTlatli-Hariga	Professeure, Institut National Agronomique de Tunis	Rapporteur
M. Damien Tromeur-Dervout	Professeur, Polytech Lyon, Université de Lyon	Rapporteur
Mme Rachida Bouhlila	Professeure, École Nationale d'ingénieurs de Tunis	Directrice de thèse
M. Edouard Canot	Chargé de recherche, HDR, Institut de Physique de Rennes, Université de Rennes 1	Codirecteur de Thèse
Mme Lamia Guellouz	Maître Assistante, École Nationale d'ingénieurs de Tunis	Invitée

# ***DÉDICACES***

*« Les bienfaits ne se paient noblement que par une vive reconnaissance »*

*Pierre-Claude-Victor Boiste*

*Je dédie ce travail ...*

*À mes chers parents Jaafar & Jamila*

*À mon cher frère et sœur Raouf & Faten*

*À mes chers (Maram, Ranim, Jaafour et Raysen)*

*À mon cher Mourad (que Dieu bénisse son âme)*

*À tous mes amis (e), à mes collègues et à tous ceux que j'aime et qui m'aiment...*

***Marwen BEN REFIFA***

# ***REMERCIEMENTS***

Ce travail est l'aboutissement d'un long cheminement au cours duquel j'ai bénéficié de l'encadrement, des encouragements et du soutien de plusieurs personnes, à qui je tiens à dire profondément et sincèrement **Merci**. Il m'est donc très agréable de réserver ces lignes comme témoins de ma profonde reconnaissance :

**À Mme Rachida Bouhlila**  
**Professeure, École Nationale d'ingénieurs de Tunis**  
**Directrice de thèse**

Vous m'avez fait l'honneur de m'accueillir au sein de votre équipe durant toutes ces années de recherche depuis mon projet de fin d'études. Vous m'avez accompagné de très près, à vrai dire pas à pas, jour par jour, et avec beaucoup de patience, tout au long de la réalisation de ce travail. Je vous prie de voir dans ce travail, l'expression de ma grande estime et de ma sincère reconnaissance. J'espère être toujours à la hauteur de votre confiance.

**À M. Edouard Canot**  
**Chargé de recherche, HDR, Institut de Physique de Rennes, Université de Rennes 1**  
**Codirecteur de Thèse**

L'appui, le soutien et les encouragements que vous m'avez apportés pendant mes recherches, votre détermination, votre attention aiguë jusqu'aux moindres petits détails, votre rigueur, ainsi que toutes vos nombreuses autres qualités humaines, a apporté une valeur inestimable et déterminante dans l'achèvement de cette thèse. J'aimerais simplement dire que vous m'avez beaucoup donné, bien loin au-delà de ce que je pouvais attendre... Je vous dis tout simplement Un grand Merci.

**BEN REFIFA Marwen**

**À M. Mahmoud Moussa**  
**Professeur, École Nationale d'Ingénieurs de Tunis**  
**Président du jury de thèse**

Vous m'avez honoré en acceptant de présider mon jury de thèse, j'ai eu la chance d'être votre étudiant et de profiter de votre longue expérience, de vos nombreuses qualités humaines, pédagogiques et professionnelles. Vous demeurez un exemple à suivre pour toutes ces qualités... Veuillez trouver dans ce travail, l'expression de mon profond respect et de la grande estime que je vous dois.

**À M. Maher Mouakher**  
**Professeur, École Nationale d'Ingénieurs de Tunis**  
**Examineur**

Je tiens, monsieur, à vous exprimer ma reconnaissance pour votre présence parmi nous et je vous remercie de m'avoir consacré votre temps, d'examiner mon rapport et d'assister à ma soutenance de thèse en me faisant l'honneur d'être parmi les membres du jury.

**À Mme Najla Tlatli-Hariga**  
**Professeure, Institut National Agronomique de Tunis**  
**Rapporteur de thèse**

Je suis très touché de l'honneur que vous me faites, Madame, en acceptant de juger ce travail et d'en être le rapporteur. Veuillez accepter, Madame, mes plus sincères remerciements pour votre présence dans ce jury et soyez assuré de tout mon respect et de ma profonde gratitude.

**À M. Damien Tromeur-Dervout**  
**Professeur, Polytech Lyon, Université de Lyon**  
**Rapporteur de Thèse**

Je vous remercie, Monsieur, d'avoir pris connaissance de ce travail et de me faire l'honneur d'en être rapporteur. Le regard critique, juste et avisé que vous avez porté sur mes travaux ne peut que m'encourager à être encore plus perspicace et engagé dans mes recherches. Les remarques et suggestions que vous m'avez accordées ne pourront que mieux m'orienter dans mes projets de recherche futurs.

**BEN REFIFA Marwen**

**À Mme Lamia Guellouz**  
**Maître Assistante, École Nationale d'ingénieurs de Tunis**  
**Invitée**

Je ne peux qu'être reconnaissant à tous vos encouragements, vos soutiens. Je me fais un devoir de manifester le plaisir que j'ai éprouvé en travaillant avec vous tout au long de ces années. Vous me faites un grand honneur en acceptant de faire partie du jury. Vos remarques et suggestions ne pourront qu'améliorer la qualité de mes travaux en cours et élargir les horizons de mes travaux futurs.

**À tous les membres de l'ENIT et de l'LMHE**  
**Collègues et amis (e)**

Je tiens également à exprimer ma reconnaissance envers votre amitié, votre générosité et tout votre amour. Je ne saurais citer chacun (e) par son nom. J'espère que vous trouverez tous ici l'expression de ma franche et profonde gratitude. Merci pour **TOUT** !

## **Abstract**

The modeling of flows and reactive transport in porous media is one of the main concerns of hydrogeologists. The bibliographic study carried out as part of this work has shown us that the resolution of this type of problem is only possible by numerical methods. This complexity is due primarily to the high nonlinearity equations and by a strong coupling existing between the different processes (flow, transport and geochemistry). The GEODENS code (Bouhlila, 1999), the object of this work, is a numerical tool for solving problems of transport and density flow. A computational code must always ensure not only the reliability of the results, but also its competitiveness with respect to other existing codes; indeed, it must offer a reduced computing time as well as be able to solve large problems.

The objectives of this work consist in, firstly, improving the numerical performances of the code GEODENS (Bouhlila, 1999) [mono-species] and, secondly, deriving a multi-species version that answers to current computer and digital evolution. These new performances enabled us to study complex hydrogeological problems. The thesis begins with a presentation, based on a bibliographic synthesis, of the mathematical formulation of coupled flow and transport problems in porous media. In chapter two, the GEODENS code is described and its numerical weaknesses are underlined. Then we propose improvements for the one-species version of the code, followed by the validation of the new version. In the third part, we propose a multi-species version of the GEODENS code which is based on a parallel coupling between the improved version of GEODENS and the geochemical code SELSAUM (Bouhlila, 1999), via the MPI protocol. The code architecture adopted offers us several advantages such as an easy substitution of one code by another (chemical or even physical) and also a computing time saving, depending on the number of the machine processors. Therefore, it is possible to take into account an arbitrary number of solutes and to attack problems with a high resolution, the size limit being imposed only by the type of machine used.

The last part presents two hydrogeological applications. The first application concerns the salt dome problem, which is a well-known hydrogeochemical challenge for the density driven flow and transport modeling. The hydrogeologists usually consider the salt rock as impervious and the salt dome top is taken as the bottom of the retained domain. In reality, and despite its very low permeability, a water flow and salt transport inside the rock could be significant at large geological time scales. We use a coupled model of flow, transport and

## **BEN REFIFA Marwen**

geochemistry dealing with high concentrations, to simulate the coupled processes in the HYDROCOIN 4 classical problem to quantify these dissolution processes and their impact on the buried waste transport to the biosphere at large time scales. We quantify the time evolution of the rock porosity of the dome as well as the quantities of salt dissolved. We show that the porosity of the top band of the dome increases by a factor of 4.5 after 10 000 years. For the same duration, the top layer of the dome lost 50% of its salt mass. A radionuclide element that migrates from the center of the dome, where waste burial facilities may have been stored, will reach the surface after 2200 years. We conclude that the salt dome is not impermeable and that the risk of migration of a pollutant through the dome is considerable. The second application concerns the study of a saline depression. In order to understand the various extremely complex hydrodynamic and geochemical processes that characterize these saline depressions, we will use the sebkha El Maleh configuration (southern Tunisia) as a geometric and temporal model in order to quantitatively reproduce the genesis of a marine sebkha. We studied the sensitivity of the hydrodynamic and geochemical configuration to initial conditions. We have shown that the direction of seawater infiltration decides the distributions of the final velocity and concentration fields.

**Keywords:** porous media, geochemistry, numerical simulation, code coupling, salt dome, salt dissolution, Sebkha.

## **Résumé**

La modélisation des écoulements et du transport réactif, dans les milieux poreux, représente une des principales préoccupations des hydrogéologues. L'étude bibliographique, réalisée dans le cadre de ce travail, nous a montré que la résolution de ce type de problèmes n'est possible que par des méthodes numériques. Cette complexité est due essentiellement à la forte non-linéarité des équations et par le fort couplage existant entre les différents processus (écoulement, transport et géochimie). Le code GEODENS (Bouhlila, 1999), objet de ce travail, est un outil de résolution de problèmes de transport et d'écoulement densitaire. Un code de calcul doit toujours garantir non seulement la fiabilité des résultats, mais aussi sa compétitivité par rapport aux autres codes existants ; en effet, il doit offrir un temps de calcul réduit ainsi que la possibilité de résoudre les grands problèmes.

Les objectifs de ce travail consistent, en premier lieu, à améliorer les performances numériques du code GEODENS (Bouhlila, 1999) [mono-espèce] pour passer, en deuxième lieu, à une version multiespèces qui répond aux évolutions informatiques et numériques actuelles. Ces nouvelles performances nous ont permis d'étudier des problèmes hydrogéologiques d'actualité et complexes tels que le dôme de sel en tenant compte du processus de dissolution.

Le mémoire commence par une présentation, sur la base d'une synthèse bibliographique, de la formulation mathématique des problèmes d'écoulement et de transport couplés dans les milieux poreux. Dans le deuxième chapitre, nous décrivons le code GEODENS et nous présentons ses faiblesses. Ensuite, nous proposons des améliorations pour la version mono-espèce du code, suivie par la validation de la nouvelle version. L'utilisation des matrices creuses d'une part (au lieu du stockage « ligne de ciel » d'origine), d'un solveur creux direct (UMFPACK) d'autre part, a permis d'améliorer significativement les performances numériques du code.

Dans la troisième partie, nous proposons une version multiespèces du code GEODENS qui se base sur un couplage parallèle entre la version améliorée de GEODENS et le code géochimique SELSAUM (Bouhlila, 1999), via le protocole MPI. L'architecture numérique adoptée nous offre plusieurs avantages tels que la facilité de substitution d'un code par un autre (chimique ou même physique) mais aussi un gain de temps de calcul en fonction du nombre de processeurs de la machine. Elle permet ainsi de prendre en compte un nombre de solutés arbitraire et d'attaquer des problèmes avec une grande résolution, la seule limite n'étant imposée que par le type de machine utilisée.

## **BEN REFIFA Marwen**

La dernière partie représente deux applications hydrogéologiques. La première application concerne le dôme de sel. Nous présentons un bref inventaire sur l'historique de formation ainsi que l'évolution des travaux qui ont abordé le sujet du dôme de sel et sa dissolution. Nous prouvons que la roche qui forme le dôme ne peut pas être considérée comme complètement imperméable. La porosité de dôme est multipliée par un facteur estimé à 4,5 pour une simulation de 10 000 ans. Pour cette même durée par ailleurs, la couche supérieure de dôme perd 50 % de la quantité de sel emmagasinée dans ses pores. Le processus de dissolution est assez lent, mais nous avons prouvé qu'il ne peut pas être négligé. Finalement, vu son utilisation pour le captage des déchets nucléaires, nous avons proposé un scénario d'un accident de stockage où nous estimons que la molécule nucléaire peut s'échapper du dôme dans une durée de 2200 ans. La seconde application concerne l'étude d'une lagune d'origine marine. Afin de comprendre les différents processus hydrodynamiques et géochimiques extrêmement complexes qui caractérisent ces dépressions salines, nous nous servons de la configuration de la sebkha El Maleh (sud de la Tunisie) comme modèle géométrique et temporel afin de reprendre de façon quantitative le schéma de genèse des sebkhas d'origine marine. Nous avons étudié la sensibilité de la configuration hydrodynamique et géochimique aux conditions initiales. Nous avons démontré que la direction d'infiltration d'eau de mer décide les répartitions des champs de vitesses et de concentration finales.

**Mots-clés :** Milieux poreux ; écoulements densitaire ; transport réactif ; géochimie ; couplage de codes ; dôme de sel ; dissolution ; stockage des déchets nucléaires, lagune, sebkha.

**TABLE DES MATIÈRES**

<b>INTRODUCTION GENERALE .....</b>	<b>11</b>
<b>CHAPITRE.I. ECOULEMENT ET TRANSFERT COUPLES DANS LES MILIEUX POREUX.....</b>	<b>16</b>
<b>1. INTRODUCTION.....</b>	<b>17</b>
<b>2. ETUDE FONDAMENTALE DES MILIEUX POREUX.....</b>	<b>19</b>
2.1. Approche continue et VER .....	19
2.2. Les équations de conservation.....	20
<b>3. LES TRANSFERTS EN MILIEUX POREUX.....</b>	<b>21</b>
3.1. La loi de Darcy .....	21
3.2. Loi de Fick .....	22
3.3. La dispersion.....	22
3.4. Equations d'état du fluide .....	23
3.5. Couplage entre les équations et cas particulier.....	24
<b>4. PROBLEME DENSITAIRE : DEFINITION ET METHODE DE RESOLUTION.....</b>	<b>25</b>
<b>5. GEOCHIMIE DANS LES MILIEUX POREUX .....</b>	<b>26</b>
5.1. Définitions .....	26
5.2. L'énergie d'un système chimique :.....	27
5.3. Les solutions chimiques.....	28
<b>6. PROPRIETES VOLUMIQUES DES SAUMURES .....</b>	<b>29</b>
6.1. La règle de Young .....	30
6.2. Modèle de l'interaction ionique de Guggenheim .....	30
6.3. Modèle de l'interaction ionique de Pitzer .....	30
<b>7. CONCLUSION.....</b>	<b>31</b>
<b>CHAPITRE.II. MODELISATION DES ECOULEMENTS ET DES TRANSPORTS DENSITAIRES DANS LES MILIEUX POREUX : GEODENS (ETAT DE L'ART ET AMELIORATIONS NUMERIQUES).....</b>	<b>33</b>
<b>1. INTRODUCTION.....</b>	<b>34</b>

<b>2.</b>	<b>GEODENS : DESCRIPTION ET GENERALITES .....</b>	<b>36</b>
2.1.	Méthode des éléments finis et option de calcul du modèle GEODENS.....	38
2.2.	Système d'équations : .....	40
2.3.	Forme intégrale .....	42
2.4.	Discrétisation temporelle .....	43
2.5.	Méthodes de stockage .....	46
2.6.	Méthode de résolution (schéma numérique et solveur).....	48
<b>3.</b>	<b>NOUVELLE VERSION DE GEODENS .....</b>	<b>49</b>
3.1.	Passage de Windows à Linux.....	49
3.2.	Passage au FORTRAN 90.....	50
3.3.	Différence entre allocations statique et dynamique : .....	50
3.4.	Changement de la méthode de stockage .....	50
3.5.	Changement de schéma numérique .....	54
<b>4.</b>	<b>VALIDATION ET AMELIORATIONS NUMERIQUES .....</b>	<b>56</b>
4.1.	Cellule de Rayleigh .....	56
4.2.	Le problème d'ELDER .....	60
4.3.	Améliorations numériques.....	64
<b>5.</b>	<b>CONCLUSION .....</b>	<b>68</b>
<b>CHAPITRE.III. MODELISATION DES ECOULEMENTS ET DES TRANSPORTS REACTIFS DANS LES MILIEUX POREUX : GEODENS (VERSION MULTI ESPECES) .....</b>		
<b>70</b>		
<b>1.</b>	<b>INTRODUCTION .....</b>	<b>71</b>
<b>2.</b>	<b>CONCEPTUALISATION DES PHENOMENES ET FORMULATION MATHEMATIQUE .....</b>	<b>72</b>
2.1.	Densité et calcul Chimique.....	72
2.2.	La Perméabilité.....	73
2.3.	La Porosité .....	74
2.4.	Flux géochimique .....	74

<b>3.</b>	<b>METHODE ADOPTEE ET IMPLEMENTATION NUMERIQUE.....</b>	<b>75</b>
3.1.	Couplage entre les Processus (écoulement, transport, chimie) .....	75
3.2.	Version Multi espèce.....	76
3.3.	Outils numériques .....	79
<b>4.</b>	<b>VALIDATION DE CODE.....</b>	<b>83</b>
4.1.	Processus de diffusion.....	83
4.2.	Processus de transport :.....	85
4.3.	Variation de la porosité .....	87
4.4.	Validation du couplage.....	88
<b>5.</b>	<b>CONCLUSION.....</b>	<b>94</b>
	<b>CHAPITRE.IV. APPLICATION HYDROLOGIQUE : DISSOLUTION D’UN</b>	
	<b>DOME DE SEL .....</b>	<b>96</b>
<b>1.</b>	<b>INTRODUCTION.....</b>	<b>97</b>
<b>2.</b>	<b>HISTORIQUE DE FORMATION DU DOME DE SEL.....</b>	<b>99</b>
<b>3.</b>	<b>MISE EN QUESTION DE LA DISSOLUTION DU DOME DE SEL.....</b>	<b>100</b>
<b>4.</b>	<b>MODELISATION DU DOME DE SEL.....</b>	<b>101</b>
4.1.	Dôme de sel classique (Projet HYDROCOIN) .....	101
4.2.	Nouvelle approche : dissolution du dôme de sel.....	103
4.3.	Modèle physique.....	103
	C’est celui de l’écoulement en milieu poreux couplé au transport de solutés qu’utilise GEODENS : .....	103
<b>5.</b>	<b>RESULTATS .....</b>	<b>109</b>
5.1.	Paramétrisation et lois adoptées .....	104
5.2.	Dôme de sel classique (Projet HYDROCOIN) : .....	109
5.3.	Dôme avec dissolution .....	109
5.4.	Porosité et bilan de masse .....	112
5.5.	Cas d’un accident de stockage radioactif.....	116
<b>6.</b>	<b>CONCLUSION :.....</b>	<b>118</b>

<b>CHAPITRE.V. EVAPORATION D'UNE LAGUNE DU DOMAINE MARIN.....</b>	<b>120</b>
<b>1. INTRODUCTION.....</b>	<b>121</b>
<b>2. SEBKHAT EL MALEH .....</b>	<b>122</b>
2.1. Progression des recherches, morphologie générale et historique de formation .....	123
2.2. Description du remplissage de la sebkha.....	125
<b>3. FORMATION DES SELS ET DES SAUMURES.....</b>	<b>126</b>
3.1. Les sels.....	126
3.2. Les saumures .....	127
<b>4. LES ECHELLES D'ESPACE ET DE TEMPS .....</b>	<b>129</b>
<b>5. MODELE ADOPTE.....</b>	<b>129</b>
<b>6. CAS D'UN BASSIN PARFAITEMENT MELANGE .....</b>	<b>131</b>
6.1. Modèle conservatif Analytique .....	131
6.2. Évaporation simulée d'une lagune du domaine marin .....	133
<b>7. LA GENESE D'UN BASSIN EVAPORITIQUE .....</b>	<b>135</b>
7.1. L'entrée de l'eau de mer par le côté gauche .....	135
7.2. L'entrée de l'eau de mer par le bas.....	138
<b>8. CONCLUSION.....</b>	<b>143</b>
<b>CONCLUSION GENERALE .....</b>	<b>144</b>
<b>BIBLIOGRAPHIE.....</b>	<b>148</b>

## LISTE DES FIGURES

FIGURE 2 1:ORGANIGRAMME DE L'ALGORITHME DE CALCUL DE GEODENS (DHATT ET TOUZOT, 1981).....	37
FIGURE 2 2:ALGORITHME D'EULER SEMI-IMPLOCITE, POUR PROBLÈMES NON STATIONNAIRES ET NON LINÉAIRES, UTILISANT LA MÉTHODE DE NEWTON-RAPHSON (DHATT ET TOUZOT, 1981) .....	48
FIGURE 2 3:STRATEGIE DE STOCKAGE EN FORMAT CSCCHANGEMENT DE SOLVEUR .....	53
FIGURE 2.4 EVOLUTION DU LOG10 (F(X)) EN FONCTION DES PAS DES TEMPS.....	54
FIGURE 2 5:VARIATION DE LA NORME DE DIFFÉRENCE ENTRE LES DEUX SCHEMAS NUMERIQUES PAR RAPPORT AU TEMPS ( $N = \sqrt{(S1 - S2)^2} / \max(S1)$ ) .....	55
FIGURE 2 6:CELLULE DE CONVECTION SALINE (BOUHLILA, 1999). .....	56
FIGURE 2.7:ISO-CONCENTRATIONS ET CHAMP DE VITESSES POUR LE NOMBRE DE RAYLEIGH RA=100, AVEC VISCOSITE CONSTANTE (M=M0) POUR LA NOUVELLE VERSION DU CODE .....	58
FIGURE 2.8:ISO-CONCENTRATIONS ET CHAMP DE VITESSES POUR LE NOMBRE DE RAYLEIGH RA=100, AVEC VISCOSITE CONSTANTE (M=M0), (BOUHLILA, 1999) .....	58
FIGURE 2. 9:ISO-CONCENTRATIONS ET CHAMP DE VITESSES POUR LE NOMBRE DE RAYLEIGH RA=250, AVEC VISCOSITE CONSTANTE (M=M0) POUR LA NOUVELLE VERSION DU CODE .....	58
FIGURE 2. 10:ISO-CONCENTRATIONS ET CHAMP DE VITESSES POUR LE NOMBRE DE RAYLEIGH RA=250, AVEC VISCOSITE CONSTANTE (M=M0), (BOUHLILA, 1999) .....	58
FIGURE 2.11:ISO-CONCENTRATIONS ET CHAMP DE VITESSES POUR LE NOMBRE DE RAYLEIGH RA=500, AVEC VISCOSITE CONSTANTE (M=M0), (BOUHLILA, 1999) .....	59
FIGURE 2.12:ISO-CONCENTRATIONS ET CHAMP DE VITESSES POUR LE NOMBRE DE RAYLEIGH RA=500, AVEC VISCOSITE CONSTANTE (M=M0) POUR LA NOUVELLE VERSION DU CODE .....	59
FIGURE 2.13:CONFIGURATION ET CONDITIONS AUX LIMITES DU PROBLEME D'ELDER.....	60
FIGURE 2.14:SOLUTION NUMERIQUE DU PROBLEME D'ELDER ; LES ISOCONCENTRATIONS 20% ET 60% POUR UNE SIMULATION DE 10 ANS. (VOSS ET AL., 1987) .....	61
FIGURE 2 15:REPARTITION DU CHAMP DE VITESSE POUR LE PROBLEME D'ELDER . .....	63
FIGURE 2 16:REPARTITION DU CHAMP DE VITESSE POUR LE PROBLEME D'ELDER. ZOOM SUR LE CHAMP CENTRAL .....	63
FIGURE 2 17:SOLUTION DU PROBLEME D'ELDER : REPARTITION DES ISO-CONCENTRATION. SIMULATION DE 10 ANS .....	64
FIGURE 2 18:SOLUTION DU PROBLEME D'ELDER : REPARTITION DES ISO-CONCENTRATION. SIMULATION DE 20 ANS .....	64
FIGURE 2 19:NORMES DE CONVERGENCE A CHAQUE PAS DE TEMPS POUR L'ANCIEN SCHEMA NUMERIQUE... ..	66
FIGURE 2 20:NORMES DE CONVERGENCE POUR L'ANCIEN SCHEMA NUMERIQUE (NORME_METH_1) ET LE NOUVEAU SCHEMA NUMERIQUE (NORME_METH_2).....	66
FIGURE 2 21:MAILLAGE DE LA CELLULE DE RAYLEIGH (512 ELEMENTS /1089 NŒUDS) .....	67
FIGURE 2 22:ISO-CONCENTRATIONS ET CHAMP DE VITESSES POUR LE NOMBRE DE RAYLEIGH RA=100, AVEC VISCOSITE CONSTANTE (M=M0) POUR UN MAILLAGE DE 512 ELEMENTS. ....	68
FIGURE 3. 1:SCHEMA DESCRIPTIF DE LA MÉTHODE DU COUPLAGE ADOPTÉE .....	76
FIGURE 3. 2: DIAGRAMME DESCRIPTIF DE L'APPROCHE DE COUPLAGE ADOPTÉE POUR UN PAS DE TEMPS .....	78
FIGURE 3. 3:COLLECTE GÉNÉRALE : MPI_ALLGATHER .....	82
FIGURE 3. 4:CHAMPS DE CONCENTRATION POUR T= 0.1 .....	84
FIGURE 3. 5:COMPARAISON DE LA SOLUTION NUMERIQUE ET ANALYTIQUE POUR T= 0.1.....	84
FIGURE 3. 6: ERREUR = DIFFÉRENCE ENTRE LES SOLUTIONS NUMERIQUE ET ANALYTIQUE POUR T= 0.1 .....	85
FIGURE 3. 7:COMPARAISON DE LA SOLUTION NUMERIQUE AVEC LA SOLUTION ANALYTIQUE A T= 25 JOURS ET T=50 JOURS POUR PE=1 (A), PE=0.5 (B).....	86
FIGURE 3. 8:PROBLEME TEST POUR LA VALIDATION DE PROCESSUS DE VARIATION DE LA POROSITE: .....	87
FIGURE 3. 9:CHAMPS DE POROSITE POUR UNE SIMULATION DE 160 ANS .....	87
FIGURE 3. 10:CHAMPS DE CONCENTRATION .....	87
FIGURE 3. 11:ERREUR DU BILAN DE MASSE EN FONCTION DE TEMPS DE SIMULATION (PAS DES TEMPS) .....	88
FIGURE 3. 12:DOMAINE PHYSIQUE ET CONDITIONS AUX LIMITES .....	89
FIGURE 3. 13:CHAMPS DE CONCENTRATION DU NA+ET MG++ ET DE PRECIPITATION DE HALITE.....	90
FIGURE 3. 14:CHAMPS DE CONCENTRATION DU NA+ ET MG++ ET DE PRECIPITATION DU SYLVITE.....	91
FIGURE 3. 15:CHAMPS DE CONCENTRATION DU CA++ ET MG++ ET DE PRECIPITATION DU GYPSE.....	91

FIGURE 3. 16:COMPARAISON ENTRE LA SOLUTION ANALYTIQUE DE COUDRAIN-RIBSTEIN (1988) AVEC LA SOLUTION NUMERIQUE DU MODELE DEVELOPPE .....	94
FIGURE 4. 1:GEOMETRIE ET CONDITIONS AUX LIMITES DU PROBLEME DE DOME DE SEL .....	102
FIGURE 4. 2: GEOMETRIE ADOPTEE DU DOME DE SEL .....	103
FIGURE 4. 3:VISCOSITE DYNAMIQUE (M) DES SOLUTIONS DE NACI.....	105
FIGURE 4. 4:EVOLUTION DE LA PERMEABILITE EN FONCTION DE LA POROSITE .....	107
FIGURE 4. 5:EVOLUTION DE LA CONCENTRATION EN FONCTION DE LA LOI DE PERMEABILITE .....	108
FIGURE 4. 6: ISO-CONCENTRATIONS ET CHAMP DE VITESSES AU-DESSUS DU DOME DE SELS (T=1000 ANS) ...	109
FIGURE 4. 7:CHAMPS DES VITESSES ET DES CONCENTRATIONS POUR UNE SIMULATION DE 1000 ANS .....	110
FIGURE 4. 8:CHAMPS DES VITESSES ET CELLULES DE RECIRCULATION.....	111
FIGURE 4. 9:EVOLUTION DE LA CONCENTRATION AU POINT 1 : X= 0.00 ; Y= 850.....	111
FIGURE 4. 10:EVOLUTION DE LA CONCENTRATION AU POINT 2 : X= 450 ; Y= -250 .....	112
FIGURE 4. 11:CHAMPS DE POROSITE POUR UNE SIMULATION DE 10 000 ANS .....	113
FIGURE 4. 12:EVOLUTION DE LA QUANTITE DE SEL DISSOUS DE LA ROCHE DE DOME EN % PAR RAPPORT A LA QUANTITE INITIALE .....	114
FIGURE 4. 13: EVOLUTION DE LA QUANTITE DE SEL DISSOUS PAR AN .....	114
FIGURE 4. 14:POURCENTAGE DE LA QUANTITE DE SEL DISSOUS DANS LA COLONNE SUPERIEURE DE DOME DE SEL POUR DEUX MAILLAGES DIFFERENTS .....	115
FIGURE 4. 15:SCENARIO PROPOSE .....	116
FIGURE 4. 16:DIFFUSION DU TRACEUR DANS LE DOME .....	117
FIGURE 5.1 : LOCALISATION DE SEBKHA EL MALEH .....	122
FIGURE 5.2 : COUPE SCHEMATIQUE DE LA SEBKHA EL MALEH (FONTES, ET AL., 1971). .....	124
FIGURE 5.3 : COUPE DE REMPLISSAGE DE SEBKHA EL MALEH (PERTHUISOT, 1975).....	126
FIGURE 5.4 : SOLUTIONS DU MODELE ANALYTIQUE POUR PLUSIEURS RAPPORTS ENTRE LES FLUX INFILTRES ET LES FLUX SORTANTS .....	132
FIGURE 5.5 : SEQUENCES TEMPORELLES DE LA PRECIPITATION DU GYPSE LORS DE L'EVAPORATION SIMULEE D'UNE LAGUNE DU DOMAINE MARIN SOUMISE A UN FLUX D'EVAPORATION DE 1 M/AN .....	134
FIGURE 5.6 : SEQUENCES TEMPORELLES DE SELS PRECIPITES LORS DE L'EVAPORATION SIMULEE D'UNE LAGUNE DU DOMAINE MARIN SOUMISE A UN FLUX D'EVAPORATION DE 1 M/AN .....	135
FIGURE 5.7:CHAMP DE VITESSES ET ISOCONCENTRATIONS (G/KG DE MILIEU POREUX) DE LA SAUMURE EN NA+ A 120 ANS . .....	136
FIGURE 5.8: FRACTION MASSIQUE (KG/KG DE MILIEU POREUX) D'HALITE DANS LA MATRICE SOLIDE A 120 ANS. ....	136
FIGURE 5.9: FRACTION MASSIQUE(KG/KG DE MILIEU POREUX) DE GYPSE DANS LA MATRICE SOLIDE A 120 ANS. ....	137
FIGURE 5.10 : CHAMPS DE POROSITE DE LA LAGUNE A 120 ANS.....	137
FIGURE 5.11 : CHAMP DE VITESSES ET ISOCONCENTRATIONS (G/KG DE MILIEU POREUX) DE LA SAUMURE EN NA+ A 15 ANS. ....	138
FIGURE 5.12: CHAMPS DES VITESSES ET FRACTION MASSIQUE DE GYPSE (KG/KG DE MILIEU POREUX) DANS LA MATRICE SOLIDE A 15 ANS. ....	139
FIGURE 5.13 : CHAMPS DE VITESSE ET FRACTION MASSIQUE(KG/KG DE MILIEU POREUX) DE L'HALITE A 100 ANS .....	140
FIGURE 5.14 : CHAMPS DE VITESSE ET FRACTION MASSIQUE (KG/KG DE MILIEU POREUX) DU POLYHALITE A 100 ANS .....	140
FIGURE 5.15 : FRACTION MASSIQUE (KG/KG DE MILIEU POREUX) DE L'ANHYDRITE A 100 ANS.....	141
FIGURE 5.16 : FRACTION MASSIQUE DU SYLVITE A 100 ANS.....	141
FIGURE 5.17 : FRACTION MASSIQUE (KG/KG DE MILIEU POREUX) DU CARNALLITE A 100 ANS.....	142

**LISTE DES TABLEAUX**

TABLEAU 2. 1:PARAMETRES DU PROBLEME D'ELDER.....	61
TABLEAU 2. 2:DIRECTION DE L'ECOULEMENT CENTRALE EN FONCTION DU MAILLAGE (OLTEAN, ET AL., 2001)	62
TABLEAU 3. 1:CALCUL DES DENSITES .....	72
TABLEAU 3. 2:PARAMETRES PHYSIQUES.....	89
TABLEAU 4. 1:PARAMETRES PHYSIQUES DU DOME DE SEL.....	102
TABLEAU 4. 2:CALCUL DES DENSITES .....	105
TABLEAU 4. 3:PARAMETRES PHYSIQUES DU DOME DE SEL.....	116
TABLEAU 4. 4:TEMPS DE MIGRATION DU TRACEUR DANS LE DOME .....	118
TABLEAU 5.1 : CONCENTRATIONS MOYENNES EN IONS MAJEURS ET MASSE VOLUMIQUE DES EAUX DES NAPPES GYPSEUSE ET HALITIQUE, D'APRES FLORIDIA (1971) (BOUHLILA, 1999) .....	127
TABLEAU 5.2 : LE COEFFICIENT D'ACTIVITE $\Gamma$ ET LA MOLALITE DES IONS MAJEURS DE LA NAPPE DANS LA COUCHE GYPSEUSE.....	127
TABLEAU 5.3 : LES INDICES DE SATURATION DES SELS DANS L'EAU DE LA NAPPE DE LA COUCHE GYPSEUSE ..	127
TABLEAU 5.4 : LE COEFFICIENT D'ACTIVITE $\Gamma$ ET LA MOLALITE DES IONS MAJEURS DE LA NAPPE DANS LA COUCHE HALINE .....	128
TABLEAU 5.5 : LES INDICES DE SATURATION DES SELS DANS L'EAU DE LA NAPPE DE LA COUCHE HALINE .....	128
TABLEAU 5.6 : COMPOSITION DE LA SAUMURE ET DE LA MATRICE SOLIDE A DIFFERENTS INSTANTS, POUR UN FLUX EVAPORE DE 1M/AN (BOUHLILA, 1999) .....	134

## Introduction générale

Les études concernant l'écoulement et le transport dans les milieux poreux naturels ont toujours été liées à une forte demande en ressources souterraines. Cela couvre, pour ne citer que quelques exemples, la gestion des ressources en eaux souterraines, la production pétrolière, l'énergie géothermique, la séquestration du carbone, la gestion et le stockage des déchets radioactifs... Cette variété de domaines d'application a fait que la compréhension des processus et des lois de transfert dans le système terrestre profond a pris une importance majeure pour la communauté scientifique. De ce fait, les hydrologues et les géophysiciens s'intéressent de plus en plus aux études impliquant des échelles de longueurs et de temps extrêmement importantes, ce qui donne à ces études une complexité majeure parce que les méthodes expérimentales traditionnelles peuvent ne pas être valides, ou encore deviennent très coûteuses et même parfois impraticables (Zhao C., 2009). La modélisation numérique a donc été la meilleure alternative pour acquérir des connaissances sur la physique, comprendre les processus complexes, concevoir et prendre des décisions. En hydrogéologie, la modélisation numérique consiste à transformer les processus physiques, chimiques et biologiques dans les milieux poreux naturels en modèles mathématiques. Ces modèles reposent principalement sur des bilans de conservation concernant la masse, la quantité de mouvement et l'énergie, tout en impliquant parfois des relations phénoménologiques traduisant les lois chimiques et biologiques. Il est à noter que ces équations sont généralement couplées entre elles d'une part, et fortement non linéaires d'autre part ; en raison de cette complexité, elles ne peuvent pas être résolues analytiquement (sauf pour des cas particuliers) d'où l'intérêt des méthodes numériques. Malgré l'existence de certains modèles très anciens (pensons à la loi de Darcy qui date du XIX<sup>e</sup> siècle), leur mise en œuvre et leur utilisation pour des applications réelles ont été très limitées en raison de la complexité liée à la procédure de résolution. Cependant, depuis une cinquantaine d'années, avec l'évolution des nouvelles technologies informatiques, plusieurs méthodes numériques, des techniques, des algorithmes et des procédures ont été développés et utilisés avec succès permettant de fournir les solutions de problèmes mathématiques complexes liés à des applications d'ingénierie.

La modélisation numérique des écoulements et des transports réactifs dans les milieux poreux se caractérise par des complications spécifiques qui n'existent pas dans d'autres domaines (Miller, et al., 2013). En effet, les grandes échelles d'espace et de temps, le fort couplage entre les différents processus (physique, chimique), la non-linéarité des équations physiques, l'hétérogénéité..., ne sont que quelques exemples qui traduisent cette complexité.

Ces difficultés mathématiques ainsi que physiques ont été l'objet de motivation pour toute une communauté scientifique multidisciplinaire (mathématiciens, physiciens, chimistes, numériciens, hydrogéologues et géophysiciens). Ces recherches ont donné des progrès remarquables dans le développement de modèles numériques sophistiqués. Cependant, en raison de la nature même des problèmes hydrogéologiques, les géosciences numériques sont toujours en phase de développement et les modèles numériques actuels font face à des défis majeurs tels que la robustesse, l'exactitude et la fiabilité (Dawson, et al., 2013). Dans le but d'améliorer la capacité des simulateurs actuels et d'inclure les réflexions théoriques et informatiques d'aujourd'hui, il existe un besoin toujours croissant de nouvelles méthodes et algorithmes numériques s'appuyant sur les nouvelles conceptions et technologies. La technologie la plus adéquate et qui permet de profiter des performances matérielles et logicielles est la parallélisation (Miller, et al., 2013). Un grand nombre d'outils numériques existants ne permettent pas (ou n'ont pas été testés) d'utiliser le calcul parallèle (Polmann, et al., 1991; Borsi, et al., 2013).

Plusieurs problèmes hydrogéologiques ont profité de ces évolutions physiques et informatiques. Nous citons le problème du dôme de sel qui a été mentionné depuis plus d'une centaine d'années. Ce problème est d'une importance majeure puisqu'il représente une alternative pour le stockage des déchets radioactifs. Il est caractérisé par une grande complexité vu son historique de formation. Malgré l'évolution des méthodes numérique et de la géologie moderne, il n'existe pas une unique théorie qui rassemble l'unanimité des chercheurs sur la question de l'origine de formation des dômes de sel. Malgré l'évolution numérique, la résolution du problème du dôme est caractérisée par une grande sensibilité aux méthodes de résolutions et n'admet pas une unique solution.

L'objet du présent travail est de développer, à partir d'un code existant, GEODENS (Bouhlila, 1999), un outil numérique de simulation et de prédiction des processus hydrodynamiques, de transport et géochimiques dans les milieux poreux tout en profitant des avancées actuelles. Pour ce faire, ce mémoire commence par une présentation, sur la base d'une synthèse bibliographique, d'une formulation mathématique de l'écoulement et du transport couplés dans les milieux poreux. Dans le deuxième chapitre, nous décrivons le code GEODENS actuel et nous détaillons ses faiblesses. Ensuite nous proposons des améliorations pour la version uni-espèce du code et nous poursuivons par la validation de la nouvelle version. Dans le troisième chapitre, nous proposons une version multi-espèces du code

GEODENS qui est bâti à partir de plusieurs instances du code uni-espèce couplées en parallèle grâce au protocole MPI. Le quatrième chapitre concerne l'application au dôme de sel : il est composé d'un bref inventaire de l'histoire ainsi que de l'évolution des travaux qui ont abordé ce problème hydrogéologique. Nous traitons ensuite, dans le chapitre cinq, le problème du dôme de sel en le comparant aux résultats existants et en menant une étude de sensibilité de la nouvelle configuration du dôme. Nous étudions ainsi l'évolution de la porosité des roches des sels dans le temps pour pouvoir estimer une vitesse de disparition du dôme de sel par dissolution. Par ailleurs, comme le risque d'un accident de stockage nucléaire n'est jamais nul, nous simulons le scénario d'un accident d'échappement de particules radionucléides et nous étudions leur transport au sein même du dôme. Enfin, le sixième et dernier chapitre s'intéresse aux lagunes d'origine marine. Afin de comprendre les différents processus hydrodynamiques et géochimiques extrêmement complexes qui caractérisent ces dépressions salines, nous nous servons de la configuration de la sebkha El Maleh (sud de la Tunisie) comme modèle géométrique et temporel afin de reprendre de façon quantitative le schéma de genèse des sebkhas d'origine marine. Nous nous proposons de reproduire à l'aide de notre modèle numérique un schéma simplifié et représentatif d'une sebkha.



## Chapitre.I.

# Écoulement et transfert couplés dans les milieux poreux

## 1. Introduction

L'écoulement et le transport des différentes substances solubles dans les fluides circulant dans les milieux poreux représentent des processus complexes qui interviennent dans plusieurs domaines des sciences de la terre et de l'environnement, et de l'ingénierie. Le milieu poreux est l'ensemble de grains solides ou d'agrégats autour desquels existent des espaces vides appelés pores, qui peuvent être connectés ou non (Mermoud, 1998).

Les ressources en eaux souterraines sont de plus en plus menacées par le lessivage des contaminants provenant des décharges non contrôlées, l'infiltration des pesticides et des engrais des zones agricoles, les fuites d'une large gamme de polluants organiques des stations-service, les raffineries, les pipelines [ (Trauth, et al., 1997) (Holt, 2000) (Anderson, et al., 2000) (Langwaldt, et al., 2000); (Johnson, et al., 2001) (Babiker, et al., 2004)], etc.. L'existence et le mélange des contaminants avec le système d'eau souterraine engendrent de nombreuses réactions géochimiques telles que la sorption, la biodégradation, l'oxydoréduction et la précipitation / dissolution. Les différences de densité entre les panaches de contaminants et l'eau ambiante peuvent influencer le transport des contaminants en particulier lorsque des instabilités se développent et entraînent une augmentation de la diffusion de contaminants ou d'autres constituants des eaux souterraines [ (Simmons, et al., 1998); (Zhang, et al., 2002)]. En la mécanique des fluides, un fluide (ou une phase fluide) est considéré comme un milieu effectivement continu avec une densité  $\rho$  (masse de fluide par unité de volume de fluide), propriété primordiale. La densité d'un fluide n'est souvent pas uniforme. En général, le fluide est composé de  $N$  espèces chimiques miscibles avec une densité partielle  $\rho_k$  (masse du constituant  $k$  par unité de volume de fluide). Parmi les variables d'état, la densité mérite une attention particulière, car ses variations spatiales et temporelles sont fondamentales pour la classe des problèmes densitaires.

Mathématiquement, cela s'exprime par la présence de  $\rho$  dans le terme de gravité dans l'équation de l'équilibre pour un fluide. Dans les systèmes à densité variable, assez différents mais physiquement corrects, plusieurs modèles d'écoulement peuvent être appliqués. Les modèles mathématiques correspondants sont intéressants malgré la non-uniformité de leurs solutions.

Les processus de flux à densité variable dans les milieux poreux ont attiré l'attention de nombreux chercheurs au cours des 40 dernières années, bien que le travail de pionnier dans ce domaine soit encore plus ancien ( (Diersch, et al., 2001). (de Josselin de Jong, 1960) a

développé la théorie du vortex pour les fluides à densité variable dans des milieux poreux saturés. Les premiers calculs numériques des processus de convection bidimensionnels dans des milieux poreux ont été donnés par (Wooding, 1957) en utilisant une méthode de relaxation itérative. (Elder, 1967) A été le premier à calculer les courants de convection thermique dans les milieux poreux pour des problèmes à deux dimensions. Depuis lors, les recherches sur les processus d'écoulement à densité variable dans les milieux poreux n'ont pas cessé de croître.

Les modèles de transport réactifs s'intéressent généralement à l'étude des systèmes chimiques. Les études chimiques sont caractérisées par leur complexité, due à la multitude d'espèces mobiles impliquées dans les réactions. [ (Sanford, et al., 1985); (Walter, et al., 1994); (Steeffel, et al., 1996); (Ghogomu, et al., 2000); (Saaltink, et al., 2001); (Freedman, et al., 2002) ; etc. ]. De nombreux auteurs ont examiné le transport de solvant réactif dans les milieux poreux en admettant une densité constante de fluide [ (Steeffel, et al., 1996); (Steeffel, et al., 1996)]. Cependant (Bolton, et al., 1998) a étudié l'impact de l'écoulement densitaire sur des réactions chimiques. (Freedman, et al., 2002) ont étudié numériquement la migration horizontale d'un panache de concentration dans un milieu poreux non fracturé où la densité varie seulement en fonction de la salinité et pas avec la température. (Bolton, et al., 1998) ont étudié le couplage de la convection thermique et de la dissolution / précipitation de quartz à grande échelle spatiotemporelle. Ils ont constaté que les changements à long terme de la porosité et de la perméabilité peuvent soit accélérer ou modérer les vitesses d'écoulement et le degré de saturation (dans les régions de dissolution/ précipitation).

Ce chapitre représente, sur une base de synthèse bibliographique, une formulation mathématique des problèmes de l'écoulement et du transport couplés dans les milieux poreux. À cause de la complexité des phénomènes mécaniques, thermodynamiques et chimiques qui interviennent dans ce type de situations, nous nous proposons de les dissocier dans un premier temps pour en faciliter la présentation.

## 2. Etude fondamentale des milieux poreux

### 2.1. Approche continue et VER

Dans le but de pouvoir étudier les phénomènes physiques dans les milieux poreux, caractérisés par leur discontinuité, l'approche continue est le moyen standard et le plus efficace pour décrire les processus fondamentaux d'écoulement et de transport dans ces milieux (Diersch, et al., 2001). L'hypothèse de considérer les milieux poreux comme continus implique que les propriétés physiques (telles que la vitesse, la porosité, la pression, la concentration, la température, etc.) sont continuellement distribuées dans l'espace et existent donc pour un point matériel infiniment petit. Dans la réalité des problèmes des milieux poreux, les quantités de masse, d'écoulement et d'énergie ne peuvent ni être mesurées ni résolues à un niveau microscopique en raison de la complexité géométrique des médias géologiques réels. Ces difficultés sont résolues par une transformation au niveau macroscopique en faisant des moyennes de volume, ce qui conduit à des quantités mesurables et résolubles pour lesquels l'hypothèse de continuité est alors évoquée. Cette approche consiste en un calcul d'une moyenne spatiale à une échelle macroscopique qui s'appelle volume élémentaire représentatif (VER) composé de plusieurs phases [ (Bear, et al., 1990) ; (Hassanizadeh, et al., 1979) ; (Hassanizadeh, et al., 1980) ; (Hassanizadeh, 1986) ; (Gray, 1999) ; (Cushman, 1990) ; (Whitaker, 1999) ; etc.]. Le VER doit être choisi de manière que les fluctuations des propriétés moyennes spatiales soient négligeables. Les différentes phases sont considérées comme des domaines matériels séparés par des interfaces de phase (par exemple solide, solide, fluide-solide, fluide-fluide) où les propriétés du système subissent un changement brusque (discontinuité). Chaque phase est composée des plusieurs espèces chimiques miscibles, elle représente un mélange moléculaire de plusieurs composants chimiques identifiables. La taille du VER dans un milieu donné dépend du degré d'hétérogénéité de ce milieu. La porosité en tout point est le rapport entre le volume des vides par le volume du VER, noté ici  $V_t$  :

$$\Phi = \frac{V_v}{V_t} \quad (1.1)$$

## 2.2. Les équations de conservation

La base des modèles des écoulements et transports à densité variable est énoncée par les principes physiques fondamentaux de la conservation de la masse et de l'énergie. En outre, la fermeture du système de lois d'équilibre qui en résulte nécessite un nombre suffisant d'équations, de sorte que toutes les inconnues puissent être déterminées.

### 2.2.1. Equation de conservation de la Masse

L'équation locale de conservation de la masse de l'espèce  $\alpha$ , au point  $M(x,y,z)$  et à l'instant  $t$ , s'écrit :

$$\frac{\partial \rho^\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho^\alpha u^\alpha) = r^\alpha \quad (1.2)$$

Où  $r^\alpha$  est le terme d'échange de masse de l'espèce fluide  $\alpha$  avec le reste du système.  $\rho^\alpha$  représente la masse de  $\alpha$  échangée par unité de temps dans l'unité de volume,  $u^\alpha$  est la vitesse absolue de particule  $\alpha$  par rapport à la vitesse moyenne. (Bouhlila, 1999).

Afin d'établir l'équation de conservation des toutes les espèces fluides, il suffit d'additionner l'équation précédente pour toutes les espèces fluides c.-à-d de 1 à  $n$  dans le cas où il ne s'agit que de réactions homogènes en phase fluide et sans interaction fluide-solide. Dans ce cas :

$$\sum_{\alpha=1}^n r^\alpha = 0 \quad (1.3)$$

En remplaçant la vitesse intrinsèque de l'espèce fluide  $\alpha$ ,  $u^\alpha$ , par son expression en fonction de la vitesse moyenne  $u$  et de la vitesse relative par rapport à  $u$ ,  $U^\alpha$ , il vient :

$$\frac{\partial \rho^\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho^\alpha u) + \nabla \cdot (\rho^\alpha U^\alpha) = r^\alpha \quad (1.4)$$

On note  $J^\alpha$  le flux relatif de l'espèce fluide  $\alpha$  par rapport à la vitesse moyenne  $u$  comme le produit de sa densité relative par la vitesse moyenne :  $J^\alpha = \rho^\alpha u$  qui peut être aussi exprimé en fonction de la fraction massique de l'espèce  $\alpha$  :  $J^\alpha = \rho C^\alpha u$ .

En tenant compte de cette écriture, l'équation 1.5 vient :

$$\frac{\partial \rho C^\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C^\alpha u) + \nabla \cdot (J^\alpha) = r^\alpha \quad (1.5)$$

### 2.2.2. Equation de conservation de l'énergie

Nous considérons que l'énergie totale de  $\alpha$  comme la somme de la densité volumique de l'énergie interne de  $\alpha$   $e^\alpha$  et l'énergie cinétique de  $\alpha$  :  $\frac{1}{2}(u^\alpha)^2$ . La conservation de l'énergie de  $\alpha$  s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho^\alpha \left( e^\alpha + \frac{1}{2} (u^\alpha)^2 \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \rho^\alpha \left( e^\alpha + \frac{1}{2} (u^\alpha)^2 \right) u_j^\alpha - t_{ij}^\alpha u_i^\alpha + q_j^\alpha \right] \\ = I^\alpha + \rho^\alpha F_i^\alpha u_i^\alpha \end{aligned} \quad (1.6)$$

Avec  $I^\alpha$  est la production interne d'énergie qui vérifie  $\sum_{\alpha=1}^n I^\alpha = 0$ .  $q^\alpha$  est le vecteur flux de chaleur associé à  $\alpha$ .

## 3. Les transferts en milieux poreux

Les écoulements et les transferts dans les milieux poreux interviennent dans les sciences hydrologiques et concernent la circulation de l'eau dans le sol. La formulation mathématique de ces processus est basée essentiellement sur la loi de Darcy pour décrire l'écoulement de la phase fluide dans l'espace poral (Bear, 1972). La loi de Fick pour exprimer les phénomènes de diffusions et de dispersion. Les modèles physico-mathématiques qui fournissent des relations entre les paramètres du milieu : la porosité, la perméabilité et les dispersivités, et les champs de concentrations dans le fluide évoluant dans l'espace poral.

### 3.1. La loi de Darcy

Expérimentalement, Darcy en 1856 a prouvé que le débit d'eau à travers un massif de sable saturé est proportionnel à la section totale de celui-ci, au gradient de charge hydraulique entre la face d'entrée et celle de sortie du fluide et à la conductivité hydraulique  $K$  [ $LT^{-1}$ ]. Plus tard et avec les préoccupations des spécialistes des écoulements des hydrocarbures dans les roches et celles des spécialistes des sols, cette loi a été généralisée à tous les fluides et tous les milieux, non homogènes et non isotropes, et a été exprimée à l'échelle locale de l'espace et du temps sous la forme suivante :

$$q_i = u_i \Phi = -\frac{k_{ij}}{\mu} \left( \frac{\partial p}{\partial x_j} - \rho g_j \right) \quad (1.7)$$

Où  $k_{ij}$  est le tenseur de perméabilité géométrique [ $L^2$ ], caractéristique intrinsèque du milieu poreux, indépendamment du fluide qui y circule,  $p$  [ $Kg.m^{-1}.S^{-2}$ ] la pression locale du fluide,  $\mu$  [ $Kg.m^{-1}.S^{-1}$ ] sa viscosité,  $\rho$  [ $Kg.m^{-3}$ ] sa densité,  $g_i$  [ $m.S^{-2}$ ] l'accélération de pesanteur dans la direction  $i$ ,  $\Phi$  [-] la porosité,  $x_j$ [m] valeur sur l'axe de mouvement,  $u_i$  [ $m.S^{-1}$ ] la vitesse effective (interstitielles) et  $q$  [ $m.S^{-1}$ ] est la vitesse de Darcy.

Bien qu'il s'agisse d'une loi empirique (mais démontrée rigoureusement pour certaines formes de conduits internes, comme des conduites tubulaires), cette loi peut être interprétée comme l'expression de la loi de conservation de la quantité de mouvement appliquée aux écoulements très lents d'un fluide homogène dans les milieux poreux.

### 3.2. Loi de Fick

La diffusion représente la variation de flux du soluté d'une région de forte concentration à une région de faible concentration due au mouvement Brownien des ions et molécules (Bird, et al., 1960). La loi de Fick représente le flux diffusif  $F_s$  d'ions en solution dans l'eau sous l'effet du gradient de leur concentration  $c$  :

$$F_s = -d_0 \nabla c \quad (1.8)$$

Avec  $d_0$  est le coefficient de diffusion moléculaire [ $L^2.T^{-1}$ ]. Il est déterminé empiriquement ou par le biais d'arguments de physique statistique (Bouhlila, 1999).

La dispersion est le mécanisme de propagation du panache de concentration des espèces fluides, dans l'espace poral, dans la direction et à travers l'écoulement dû à l'hétérogénéité présente à toutes les échelles.

L'ensemble de ces mécanismes de diffusion-dispersion est désigné par la loi de Fick généralisée. En effet, La loi de Fick permet de relier le flux relatif d'une espèce fluide  $\alpha$  par rapport au mouvement d'ensemble du fluide, décrit par une vitesse moyenne du mélange (Bouhlila, 1999). Cette loi décrit la relation directe entre les différents phénomènes de dispersion et de diffusion.

### 3.3. La dispersion

Le déplacement de panache de pollution, dans un milieu poreux saturé, n'est pas unidirectionnel. Il est nécessaire de tenir compte de la dispersion effective ( $De$ ) des particules d'eau chargées en soluté.

La dispersion effective peut être exprimée par :

$$De = [d_0 \cdot \tau] + [u_1 \cdot \alpha] \quad (1.9)$$

Avec  $[d_0 \cdot \tau]$  représente la diffusion moléculaire.  $\tau$  est la tortuosité du milieu poreux  $[u_1 \cdot \alpha]$  représente le terme de la dispersion mécanique où  $\alpha$  est le coefficient de dispersivité. La dispersion mécanique est un phénomène lié essentiellement à l'hétérogénéité des vitesses d'écoulement à travers le milieu poreux et entre les pores. Plusieurs études ont étudié ce phénomène et ils ont adopté la notion de coefficient de dispersion ou tenseur de dispersion  $K$  pour décrire ce phénomène de mélange mécanique dans les milieux poreux.

$$K = \begin{vmatrix} K_L & & \\ & K_T & \\ & & K_T \end{vmatrix}$$

Avec  $K_L$  est dispersion longitudinale et  $K_T$  est la dispersion transversale. Ces deux types de dispersion, longitudinale et transversale, sont proportionnels à la vitesse effective  $u$  ou la vitesse des pores. La forme la plus simple qui relie  $K$  à  $u$  est donnée par (Scheidegger, 1974) pour des nombres de Peclet ( $Pe$ ) qui vérifient la proportionnalité existante entre  $K_L$  et  $u$  ( $Pe < 50$ ) et entre  $K_T$  et  $u$  ( $Pe > 10000$ ):

$$K_L = \alpha_L \|u\| \quad (1.10)$$

$$K_T = \alpha_T \|u\| \quad (1.11)$$

Les facteurs de proportionnalité,  $\alpha_L [L]$  et  $\alpha_T [L]$ , intègrent les effets d'hétérogénéité du milieu à petite échelle et s'expriment à l'aide de paramètres géométriques propres au milieu poreux (Bouhlila, 1999).

### 3.4. Equations d'état du fluide

Les équations d'états décrivent les relations entre les variables d'états d'un système à l'équilibre thermodynamique. Plusieurs travaux ont établies des lois empiriques afin de décrire ces variables d'états.

- **La densité :**

La relation entre la densité et la concentration est donnée en fonction d'une densité de référence  $\rho_0$  [ (Henry, 1964) ; (Frind, 1982) ; (Huyakorn, et al., 1987) ; (Voss, et al., 1987) ] :

$$\rho = \rho_0 (1 + \varepsilon c) \quad (1.12)$$

Avec

$\rho_0$  est la densité de l'eau douce [ $M/L^3$ ]

$\varepsilon = \frac{\rho_s - \rho_0}{\rho_0}$  est le contraste de densité.

$\rho_s$  est la densité à concentration maximale [ $M/L^3$ ].

$c = \frac{C}{C_{max}}$  est la concentration normalisée.

(Kolditz et al, 1961) proposent une autre description de la densité sous forme exponentielle :

$$\rho = \rho_0 e^{\beta_c (c - c_0)} \quad (1.13)$$

avec  $\beta_c$  est paramètre qui reste à déterminer.

(Al bitar, 2007) utilise une relation de la densité analogue à l'équation des gaz parfaits :

$$\frac{C_{max}}{\rho(c)} = \frac{C_{max} - c}{\rho_0} + \frac{c}{\rho_{max}} \quad (1.14)$$

### • *La Viscosité*

La viscosité est donnée en fonction de la concentration du présent et de la température. Pour des problèmes à température ambiante (Herbert, et al., 1988) ont donné l'expression de la viscosité sous une forme polynomiale de troisième degré écrite pour des concentrations adimensionnelles ( $0 \leq c \leq 1$ ):

$$\mu(c) = \mu_0 (1 + 0,4819 c - 0,2774 c^2 + 0,7814 c^3) \quad (1.15)$$

### 3.5. Couplage entre les équations et cas particulier

Le couplage entre l'équation de conservation de la masse et celle de l'écoulement se fait à travers plusieurs termes :

- Le vecteur vitesse dans le terme convectif ainsi que dans l'expression de la dispersion mécanique.
- Les équations d'état du fluide :  $\rho(p, C)$ ,  $\mu(p, C)$

Le cas de traceur est un cas particulier simple, il est vérifié essentiellement pour des problèmes isothermes avec un fluide incompressible et lorsque le soluté se trouve à des concentrations très faibles. Le cas du traceur signifie physiquement que les paramètres d'état du fluide, sa masse volumique et sa viscosité, ne dépendent pas de la concentration (Bouhlila,

1999) . Pour ce type de problème, les équations de l'écoulement et de transport sont découplées et peuvent être résolues indépendamment. Plusieurs études s'intéressent à ce type de problème tel que les études de quantification de la pollution des nappes et l'interprétation des expériences de traçage.

#### 4. Problème densitaire : définition et méthode de résolution

Pour plusieurs situations, la variation de température, de pression ou de concentration engendre une variation significative de la densité et de la viscosité de la solution ( (Simmons, et al., 1998); (Diersch, et al., 2001)). Ces variations de densité, peuvent générer du fait de la gravité, des déplacements du fluide (convection libre) qui s'ajoute ou s'oppose à son écoulement naturel (advection), qualifient ces écoulements comme "densitaires". Dans la littérature, on parlera également d'écoulements à densité variable (variable-density flow), d'écoulements dépendant de la densité (density-dependent flow), ou encore d'écoulements pilotés par la densité (density-driven flow) (Comte, 2008). La densité représente un paramètre d'état dans les équations d'écoulements dans les milieux poreux. Elle dépend des variables d'état : la concentration, la température et la pression.

Pour certains problèmes, cette interdépendance ne peut pas être négligée. Ce qui nous ramène à considérer le couplage à densité variable. L'application de ces problèmes à des milieux poreux représente le sujet de plusieurs problèmes hydrogéologiques, tels que les problèmes du transport des polluants, l'intrusion saline, le stockage des déchets industriels et tant d'autres (Diersch, et al., 2001).

La non-linéarité ainsi que l'interdépendance des équations de transport et d'écoulement, fait que leur résolution numérique est un vrai challenge numérique.

Pour l'équation de transport, le calcul du terme de convection représente la difficulté majeure. Pour faciliter le calcul et en utilisant des méthodes numériques adaptées, (Essink, 2001) on traite séparément l'opérateur d'advection et celui de dispersion. Pour des contrastes de densités supérieurs à 20%, les problèmes de lessivage de dôme de sels, (Herbert, et al., 1988) utilisent une technique de paramétrisation graduelle et une interpolation mixte pour le calcul des vitesses.

Dans l'équation d'écoulement, afin de faciliter et accélérer les calculs, le recours à des approximations est nécessaire. L'une des approximations utilisées est celle de Boussinesq qui consiste à négliger les variations de la masse volumique dans les équations de conservation de

la masse du fluide et du soluté, et à ne les retenir que dans le terme de gravité de la vitesse de Darcy. Avec cette approximation, seul le flux de Darcy dépend de la variation de densité.

## 5. Géochimie dans les milieux poreux

Les écoulements et le transport des solutés dans les milieux poreux sont associés à des échanges de masse. Ces échanges sont dus à plusieurs mécanismes physiques, biologiques et géochimiques. Nous nous intéressons aux réactions géochimiques qui sont essentiellement la sorption (adsorption et l'échange d'ions), ainsi que la dissolution- précipitation [ (Stumm, et al., 1970); (Morel, 1983)]. Ces réactions sont conditionnées aussi bien par la nature de la phase solide que par la composition de la phase fluide et l'ensemble de réactions chimiques qui s'y déroulent. Par comparaison à la vitesse de l'écoulement et aux phénomènes du transport, les réactions géochimiques sont considérées comme instantanées et que les réactions en phase aqueuse atteignent rapidement l'équilibre. Cette hypothèse est la source d'une génération de modèles géochimiques qui calculent la spéciation à l'équilibre d'une eau évoluant dans un milieu donné, c'est-à-dire les concentrations à l'équilibre des différentes espèces chimiques présentes en solution [ (Morel, 1983) ; (Coudrain-Ribstein, 1988)].

La quantification du bilan chimique et l'intégration des variations de la configuration chimique des solutés dans les équations de conservation, se font à travers deux méthodes différentes (Marsily, 1981) :

Une méthode explicite qui quantifie l'évolution réelle des réactions chimiques dans le système et évalue ainsi les termes sources dans l'équation de transport. Les calculs sont basés soit sur le concept d'équilibres thermodynamiques ou sur une description cinétique. Cette méthode est assez complexe et relative à des systèmes particuliers.

Une méthode globale où la sorption et la dissolution/précipitation sont considérées comme un phénomène unique pouvant être décrit par des lois générales le plus souvent déduites à partir d'expériences physiques (Goblet, 1981).

### 5.1. Définitions

L'étude des systèmes chimiques se base sur plusieurs méthodes et systèmes. Les réactions chimiques font l'objet d'une multitude des recherches depuis des décennies. Le système de notation ou bien d'appellation de différentes composantes chimiques n'est pas

forcement unique. Pour cela, nous procédons à quelques définitions que nous utilisons dans notre travail :

- **Les espèces chimiques :**

Ce sont les entités chimiques supposées, tout au moins à notre niveau de conceptualisation des phénomènes, exister réellement dans la solution :  $H_2O$ ,  $H^+$ ,  $OH^-$ ,  $Cl^-$  et  $Na^+$ .

- **Les composantes chimiques :**

Ce sont des entités chimiques permettant une description complète de la stœchiométrie d'un système chimique. Les composantes ne sont pas nécessairement des éléments chimiques. Ils sont usuellement choisis comme une combinaison de blocs simples tels que les métaux :  $H^+$ ,  $Na^+$ ,  $K^+$ ,  $Ca^{++}$ ,  $Mg^{++}$ ,  $Cu^{++}$ ,  $Fe^{3+}$ ,  $Al^{3+}$ , ..., les ligands :  $OH^-$ ,  $Cl^-$ ,  $SO_4^{--}$ ,  $OH^-$ ,  $NO_3^-$ ,  $PO_4^{3-}$ ,  $SiO_3^{2-}$  et l'électron  $e^-$ . Les composantes sont indépendantes : aucune composante ne peut-être écrite sous forme de produit de réaction entre d'autres composantes. Ils forment une base du système des espèces au sens de l'algèbre linéaire. Le nombre de composantes d'un système noté  $N_c$  est tel que :  $N_c = N_e - N_r$ , avec  $N_e$  qui représente le nombre total d'espèces chimiques présentes dans le système et  $N_r$  le nombre de réactions chimiques indépendantes entre les espèces. Ils ne sont pas nécessairement des espèces chimiques.

## 5.2. L'énergie d'un système chimique :

- **Energie Libre :**

C'est l'énergie nécessaire pour « reproduire » un système à partir d'un état de référence arbitraire. C'est une propriété d'état, donc indépendante du cheminement suivi. Pour un système fermé, constitué de  $N_e$  espèces chimiques, à pression et température constantes,  $G$  s'écrit dans l'échelle des molalités

$$G = \sum_{i=1}^{N_e} n_i \mu_i \quad (1.16)$$

Où  $n_i$  est le nombre de moles de l'espèce  $i$ , et  $\mu_i$  son énergie partielle molaire.

- **Energie chimique :**

Les réactions chimiques produisent ou consomment de l'énergie. Par hypothèse, ou référence, l'énergie de formation de l'ion  $H^+$  est prise égale à zéro.

- **Energie de concentration :**

soit  $X_i$  la fraction molaire de l'espèce  $i$ , d'après la loi semi-empirique de Boile–Mariotte sur l'équilibre d'une solution avec sa vapeur saturante, le travail nécessaire pour ramener la concentration de l'espèce  $i$ , d'une valeur  $X_i$  à une valeur  $X_i'$  est égal à  $w$  tel que

$$W = RT \ln\left(\frac{X_i}{X_i'}\right) \quad (1.17)$$

Avec  $R$ , la constante des gaz parfaits (8.3143 J/d°K/mol) et  $T$  la température en degré K.

### 5.3. Les solutions chimiques

- **Force ionique d'une solution :**

La grandeur déterminante pour préciser les activités de toutes les espèces en présence est la force ionique  $I$  de la solution. Elle s'écrit :

$$I = \frac{1}{2} \sum_i z_i^2 m_i \quad (1.18)$$

où  $z_i$  est le nombre de charges de l'espèce  $i$  et  $m_i$  sa molalité.

$I$  Représente une mesure des interactions électrostatiques entre les différents ions présents dans la solution et constitue une indication précieuse qui permet de comparer des solutions de compositions variées.

- **Activité du Solvant :**

L'état standard du solvant correspond au liquide pur. L'activité du solvant  $y$  est prise, par convention, égale à l'unité et le potentiel chimique égal à  $\mu_s$ . Dans une solution quelconque, le potentiel chimique  $\mu_s$  du solvant, s'écrit :

$$\mu_s = \mu_s^0 + RT \ln(a_s) \quad (1.19)$$

où  $a_s$  est l'activité du solvant.

Dans les solutions aqueuses assez peu concentrées, c'est à dire de force ionique inférieure à 0.1 mol/l, l'activité de l'eau est égale à sa molalité  $m_s$ .

Dans les solutions plus concentrées, on définit pour l'eau une activité  $a_s$  qui est liée au coefficient osmotique molal  $\Phi$  par la relation :

$$\ln(a_s) = \frac{\phi \sum_i m_i}{n_s} \quad (1.20)$$

où  $n_s$  est le nombre de moles du solvant et  $\sum m_i$  représente la somme des molalités des solutés présents dans la solution.

- **Solutions diluées :**

Dans les solutions diluées, les réactions prédominantes sont les attractions-répulsions électrostatiques entre ions et qui sont à l'origine des réactions chimiques de complexations que l'on considère en phase aqueuse. La théorie de Debye-Hückel modélise ces interactions et spécifie leur contribution à l'énergie libre des ions.

- **Solution concentrée :**

Une fois que les forces ioniques  $I$  dépassent le 0,1 mol/l, expérimentalement, nous constatons une déviation des coefficients d'activité en fonction de la force ionique par rapport à la loi de Debye-Hückel (Michard, 1989). Le calcul des activités de ces solutions se fait à travers la formule de Davies qui permet de reproduire correctement des solutions avec des forces ioniques qui ne dépassent pas 0,7 mol/l Valeur qui correspond à celle de l'eau de mer (Morel, 1983) :

$$\ln \gamma_i = -Az_i^2 \left( \frac{\sqrt{I}}{1 + \sqrt{I}} - bI \right) \quad (1.21)$$

Avec  $b$  est un paramètre empirique :  $0.2 \leq b \leq 0.3$

- **Les Saumures :**

Ce sont les concentrations où la force ionique peut dépasser la valeur de 10.0 mol/l. concentrées telles que les saumures des Sebkhass. L'étude de ces solutions est beaucoup plus complexe vu que les interactions à courtes distances entre les ions doivent être prises en considération. Ces interactions peuvent être calculées par le moyen de deux modèles : le modèle de l'association ionique et celui de l'interaction ionique spécifique [ (Gueddari, 1984) ; (Michard, 1989)]

## 6. PROPRIETES VOLUMIQUES DES SAUMURES

Les problèmes hydrogéochimiques sont attachés généralement à des solutions fortement concentrées (saumures) telles que la sebkhass, le chott... La connaissance de la masse volumique  $\rho$  n'est plus simple et est d'une importance majeure pour les modèles de transports denses couplés. Dans la littérature, trois méthodes de calcul des propriétés volumiques des solutions ont été développées: la règle d'Young, le modèle d'interaction ionique de Guggenheim, et le modèle d'interactions spécifiques de Pitzer.

### 6.1. La règle de Young

Cette méthode est conçue pour des solutions diluées et moyennement concentrées. En effet, elle n'est pas applicable pour les solutions concentrées puisqu'elle nécessite la connaissance, du volume molaire pour une solution binaire (cation/anion) du sel, dans les solutions à force ioniques élevées qui peuvent ne pas être réalisables (Monnin, 1987).

La différence de volume  $\Delta V$  entre  $V$ , le volume molaire d'un soluté dans la solution, et  $V_w$  le volume molaire du même soluté dans l'eau pure en fonction du nombre total d'équivalents pour la solution  $e_T$ :

$$\Delta V = \frac{V - V_w}{e_T} \quad (1.22)$$

### 6.2. Modèle de l'interaction ionique de Guggenheim

Ce modèle a été élaboré par (Guggenheim, 1935) et a été développé par (Millero, 1977). Il est dédié aux solutions concentrées qui sont caractérisées par une force ionique qui ne dépasse pas l'unité. Selon cette méthode, le volume partiel molaire d'un électrolyte ca dans une solution binaire, s'écrit :

$$V_{ca} = V_{ca}^0 + \frac{S_v \sqrt{I}}{1 + \sqrt{I}} + 2V_c V_a B_{ca} m_{ca} \quad (1.23)$$

Avec :

$I$  : la force ionique de la solution.

$m_{ca}$  la molalité du sel ca,

$S_v$  : coefficient de Debye- Hückel,

$v_c$  et  $v_a$  : respectivement les coefficients stœchiométriques des ions c et a dans le sel ca

$B_{ca}$  un paramètre d'ajustement spécifique à chaque sel.

### 6.3. Modèle de l'interaction ionique de Pitzer

Ce modèle a été fondé par (Pitzer, 1973) sur la base du modèle thermodynamique des solutions concentrées d'électrolytes. Il a été développé ensuite par (Monnin, 1987) qui a établi la relation entre le volume  $V$  et l'énergie libre  $G$  d'un système à plusieurs composants :

$$V = \left( \frac{\partial G}{\partial p} \right)_{n_i, T} \quad (1.24)$$

Avec  $G = G^{id} + G^{ex}$  et donc  $V = V^{id} + V^{ex}$

De même pour une solution aqueuse

$$V = \sum n_i V_i^0 + V^{ex} \quad (1.25)$$

En utilisant les molalités :

$$V = 1000V_w + \sum m_i V_i^0 + V^{ex} \quad (1.26)$$

Avec  $V_w$  est le volume spécifique de l'eau pure, et  $V_i^0$  est le volume molaire partiel standard du soluté  $i$ .

L'expression du volume d'excès de mélange  $V^{ex}$  peut être déduite donc à partir de l'expression de l'énergie  $G^{ex}$  (Monnin, 1987)

$$V^{ex} = \left( \frac{\partial G^{ex}}{\partial p} \right)_{n_i, T} \quad (1.27)$$

## 7. Conclusion

Ce chapitre nous a permis de comprendre les phénomènes hydrogéologiques complexes en donnant les différentes équations qui gèrent le processus d'écoulement densitaire et transport couplé. Pour décrire l'écoulement et le transport en milieux poreux, il est nécessaire de pouvoir caractériser, à chaque instant, l'écoulement, par la connaissance des champs de pressions et de vitesses, le transport, en précisant le champ de concentrations de chacune des espèces en présence. Les équations qui décrivent les transferts couplés d'eau et de solutés, dans les milieux poreux, apparaissent fortement non linéaires. En général, seules les techniques numériques permettent de trouver des solutions.



## Chapitre.II.

Modélisation des écoulements et des transports  
densitaires dans les milieux poreux : GEODENS  
(état de l'art et améliorations numériques)

## 1. Introduction

Les problèmes hydrogéologiques sont de plus en plus multiples et variables. L'une des préoccupations principales des hydrogéologues concerne les questions d'écoulement et de transport de substances dans l'eau souterraine. Actuellement, le nombre des substances qu'on peut trouver dans les eaux souterraines est extrêmement important, ce qui reflète le problème généralisé de la contamination des aquifères. L'une de ses substances est le sel, ou le chlorure de sodium. D'autre part, la salinisation des eaux et des sols due à l'évaporation intense dans les zones arides ou à l'intrusion des eaux salées de mer ou de Chott ou Sebkhah, est un problème qui s'intensifie de jour en jour à cause des différents changements et facteurs climatiques ainsi que la surexploitation des eaux sous terraines.

Le transport des espèces dans les milieux poreux est caractérisé par une forte complexité due à l'occurrence de processus physique (écoulement et transport), le processus chimique (avec un nombre important des espèces) en conséquence de la variété de ces réactions. Mathématiquement, l'écoulement et le transport réactif dans les milieux poreux sont souvent modélisés comme un système fortement couplé d'équations différentielles partielles non linéaires (PDE). La nature des espèces et des réactions chimiques conduit à une large gamme de comportements mathématiques possibles du système d'équations. C'est pourquoi les solutions analytiques pour ce type de problèmes sont très limitées, complexes et non triviales. En conséquence, les modèles numériques sont un outil indispensable pour résoudre ce système d'équations.

De nombreux algorithmes et méthodes numériques ont été développés. Parmi les premiers modalisateurs de ce type de problème on trouve (Lee, et al., 1974) qui utilisent une méthode aux éléments finis dans l'objectif d'étudier le biseau salé en discrétisant les équations en  $\Psi$  la fonction courant, et en  $C$ , la concentration en sel. Par la même technique, méthode des éléments finis, (Senger, et al., 1987) formulent l'écoulement à l'aide de la fonction courant  $\Psi$  et de la charge d'eau douce équivalente  $h$  pour étudier les écoulements densitaires permanents. Aussi par la méthode des éléments finis (Segol, et al., 1975) ont étudié ces problèmes en utilisant les pressions, les concentrations et les vitesses comme des variables principales. D'autres codes utilisent la méthode de différences finies pour ce même type de problème tel que : le code SWIFT utilisé par (Butow, et al., 1989). Plus récemment, le travail de (Trompert, et al., 1993) porte sur la modélisation de l'écoulement et le transport des saumures par une méthode aux différences finies avec une grille adaptative qui raffine la discrétisation

aux voisinages des fronts. Les modèles SUTRA de (Voss, et al., 1987) et METROPOL de (Sauter, et al., 1990) consiste à discrétiser les deux équations de conservation du fluide et du soluté par la même méthode, et les résolvent en utilisant les pressions et les concentrations comme variables principales. Le calcul du champ de vecteur vitesse se fait à partir des champs de pression et de concentration en se basant sur la loi de Darcy. Ceci est réalisé en utilisant les dérivées des fonctions de pondération pour l'interpolation de la masse volumique dans le terme de gravité de l'équation de Darcy selon la méthodologie développée par (Voss, et al., 1987). Des progrès importants ont été accomplis au cours des dernières années sur la solution numérique des équations de l'écoulement et le transport réactif. En conséquence, de nombreux algorithmes et méthodes numériques ont été développés et de nombreux articles sont apparus sur cette thématique [ (Yeh, et al., 1991) ; (Friedly, et al., 1992) ; (Clement, et al., 1998); (Saaltink, et al., 1998) ; (Saaltink, et al., 2001) ; (Robinson, et al., 2000); (S., et al., 2004)] .

Les codes numériques existants sont arrivés à un degré de développement impressionnant, sauf que la solution numérique continue d'être l'objet d'un grand nombre de recherches. Plusieurs questions sur l'exactitude et la robustesse des modèles numériques restent ouvertes et des contributions précieuses restent à faire pour profiter de la nouvelle technologie informatique et des techniques numériques [ (Simpson, et al., 2007); (Bea, et al., 2009) ; (Hoffmann, et al., 2010) ; (Fan, et al., 2012) ; (Hammond, et al., 2014) ; (Steeffel, et al., 2015) ; (Parkhurst, et al., 2015) ; (Beisman, et al., 2015) ; (Leal, et al., 2016)]

Dans ce travail, nous adoptons Le modèle GEODENS de (Bouhlila, 1999) qui entre dans le même cadre que les codes déjà cités. Il adopte la pression et la concentration comme variables principales, la méthodologie de (Voss, et al., 1987) pour le calcul des vecteurs vitesses et il s'intéresse aux réactions de précipitation et de dissolution. Ce code est le fruit de plusieurs années de recherche [ (Bouhlila, 1999) ; (Laabidi, 2007) (Bouhlila, et al., 2008) ; (Laabidi, et al., 2015)] où il a prouvé sa fiabilité physique sauf qu'il présente plusieurs défaillances numériques. Ce travail consiste à développer et améliorer les performances numériques de ce code pour bénéficier des nouvelles technologies informatiques et pour élargir ses capacités de résolution.

Dans ce chapitre nous décrivons le code GEODENS et nous présentons ses défaillances. Ensuite nous proposons les améliorations pour la version uni-espèce du code suivies par la validation de la nouvelle version.

## 2. GEODENS : Description et généralités

GEODENS est un code de modélisation des écoulements densitaires et du transport couplés dans les milieux poreux. Il utilise une méthode Eulérienne pour la résolution simultanée des termes parabolique et hyperbolique de l'équation de transport. La méthode retenue pour GEODENS est celle des éléments finis qui présente des avantages par rapport à la méthode de différences finis (Bouhlila, 1999):

- La facilité du traitement de domaines et de frontières quelconques avec des maillages adaptés.
- La possibilité d'avoir des fonctions inconnues à degrés élevés de dérivabilité et de continuité.
- La représentation relativement aisée des flux et cela même en milieux anisotropes.
- La possibilité de suivre aisément les directions principales du tenseur de dispersion.

Afin de profiter le maximum possible des avantages de cette méthode et de rejeter ses inconvénients (la lourdeur du calcul des matrices des systèmes d'équations), il était nécessaire d'utiliser des codes généraux de calcul par MEF. Celui utilisé pour GEODENS est le modèle développé par Dhatt et Touzot (1981).

Le code GEODENS utilise la méthode des éléments finis de Galerkin il traite les différents problèmes d'écoulements saturés, non saturés, linéaire et non linéaire. Le principe de résolutions de ce code, comme il est cité précédemment, est inspiré de l'algorithme de (Dhatt, et al., 1981), (figure 2.1.)

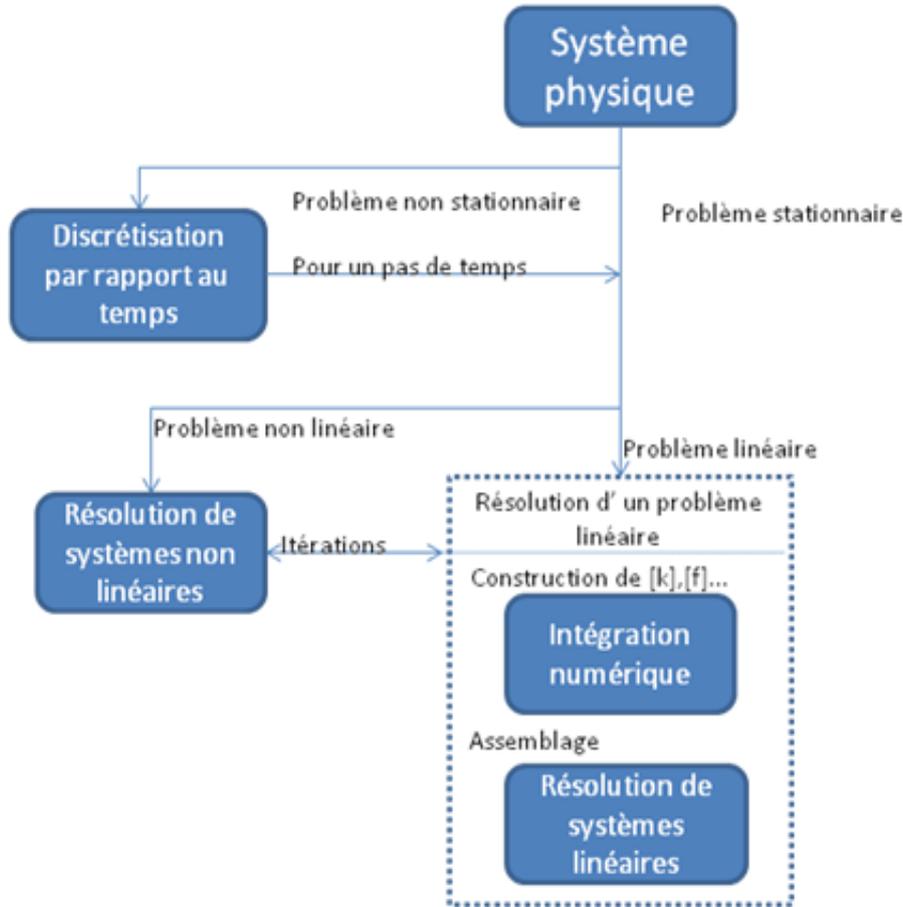


Figure 2 1: Organigramme de l'algorithme de calcul de GEODENS (Dhatt et Touzot, 1981).

- **Données du modèle :**

Les données sont principalement des données hydrodynamiques. Pour le code GEODENS les données comportent essentiellement les données sur le maillage, les propriétés élémentaires, les conditions aux limites et les conditions initiales :

- Le maillage aux éléments finis du domaine d'étude comportant la description des nœuds et des éléments.
- Les propriétés élémentaires telles que les perméabilités, les porosités initiales pour chaque élément ainsi que les dispersions et le coefficient de diffusion.
- Les conditions aux limites pour chaque degré de liberté.
- Les conditions initiales sous forme d'un champ de pressions et de concentrations en chaque nœud du maillage.
- Les pas de temps et leur nombre pour définir la durée du temps de simulation.

## 2.1. Méthode des éléments finis et option de calcul du modèle GEODENS

### 2.1.1. Méthode adoptée

La méthode des éléments finis est très répandue dans les codes numériques en relation avec l'industrie, en particulier en construction aéronautique, aérospatiale, navale et nucléaire (Dhatt, et al., 1981) elle est de plus en plus développée dans les applications de la mécanique des fluides et hydrogéologiques telle que le code GEODENS. Elle a pour objectif la transformation des équations aux dérivées partielles à des équations algébriques en utilisant une approximation des variables inconnues. Dans cette partie, nous expliquerons la base et les principes de cette méthode. Ces explications sont inspirées principalement du livre [ (Dhatt, et al., 1981) ; (Bouhlila, 1999) ; (Laabidi, 2007) ; (Laabidi, et al., 2015)].

La méthode des éléments finis consiste à discrétiser une formulation intégrale pour conduire à un système d'équations algébriques qui fournit une solution approchée du problème. Ce passage se base sur trois principes :

- la formulation des équations aux dérivés partielles à partir du problème physique.
- La formulation intégrale de ces équations en utilisant la méthode du Résidu pondéré.
- Le passage au système d'équations algébriques par une approximation des fonctions inconnues par éléments finis et organisation matricielle.

Les éléments utilisés dans le modèle GEODENS sont des éléments triangulaires à six nœuds. Ce sont des éléments quadratiques de continuité  $C^0$ . C'est-à-dire que les variables  $p$  et  $C$  y sont continues ainsi que leurs dérivées par rapport au temps sur tout le domaine, alors que leurs dérivées spatiales, par rapport à la normale du côté du triangle  $\frac{\partial p}{\partial n}$  et  $\frac{\partial c}{\partial n}$ , ne le sont pas.

Un modèle mathématique d'un système physique fait intervenir plusieurs variables ou fonctions dites exactes  $u_{ex}(x)$  telle que la pression, vitesse, concentration... Celles-ci sont représentées par des fonctions dites approchées  $u(x)$  tels que la différence entre les deux types de fonction c.-à-d.  $u(x) - u_{ex}(x)$  soit minimale.

Une étape primordiale dans la MEF est la discrétisation du domaine du travail en éléments finis. Cette partition doit respecter deux règles principales :

- Deux éléments distincts ne peuvent avoir en commun que les points situés sur leur frontière commune, si elle existe.

- L'ensemble de tous les éléments doit constituer un domaine aussi proche que possible du domaine discrétisé.

Afin de simplifier la définition analytique des éléments de formes complexes, nous introduisons la notion d'éléments de référence. Un élément de référence est un élément de forme très simple, repéré dans un espace de référence, qui peut être transformé en chaque élément réel par une transformation géométrique.

### 2.1.2. Discrétisation spatiale des équations

- **Méthode de Galerkin**

La méthode de Galerkin est une méthode très utilisée avec la MEF. Nous n'allons pas donner une description détaillée de cette méthode, mais nous donnerons leur principe de base. Partant d'un problème donné dans un espace de dimension finie, pour un opérateur  $L$  donné, le critère de Galerkin consiste à minimiser le résidu entre la solution exacte et la solution approchée. En effet, ce résidu est minimal lorsque l'erreur sur l'opération ' $\varepsilon_i$ ' est orthogonale aux fonctions de base à chaque nœud. En d'autres termes, le produit scalaire entre l'opérateur  $N_i$  et l'erreur  $\varepsilon_i$  s'annule.

$$\langle N_i, \varepsilon_i \rangle = 0 \quad (2.1)$$

- **Méthode de résidu pondéré**

Cette méthode permet le passage des équations physiques aux dérivées partielles à une formulation intégrale de ces équations tout en utilisant des fonctions de pondération.

- **Résidu**

Pour un système physique continu stationnaire dont le comportement est représenté par un système d'équations aux dérivées partielles, linéaires ou non linéaires :

$$L(u) + f_v = 0 \quad (2.2)$$

Avec «  $v$  » est le domaine de résolution

Les variables inconnues  $u$  dépendent des coordonnées  $x$ . Les fonctions  $u$  représentent une solution du problème si elles satisfont à la fois (2.2)

Les conditions aux limites de Type Dirichlet sont retranchées du second membre dans l'équation sur le domaine. Les conditions de Neuman sont dans l'opérateur  $L(u)$ .

Le résidu est la quantité  $R(u)$  définie par :

$$R(u) = L(u) + f_v \quad (2.4)$$

Pour une solution approchée  $u$  du système  $R$  tend vers zéro, mais ne s'annule pas.  $R$  s'annule pour  $u_e$  la solution exacte. (Dhatt, et al., 1981).

○ **Fonction de pondération**

Une approximation nodale a été adoptée pour les variables  $p$  et  $c$  :

$$p(x, y, t) = \sum_{l=1}^n N^l(x, y) p^l(t) \quad (2.5)$$

$$C(x, y, t) = \sum_{l=1}^n N^l(x, y) C^l(t) \quad (2.6)$$

Avec  $N^l$  sont les fonctions de pondération sous forme des polynômes de deuxième degré.  $p^l, c^l$  sont respectivement la pression et la concentration au nœud  $l$  à l'instant  $t$ .

Les fonctions d'interpolation  $N^l$  vérifient :

$$N^j(x^l, y^l) = 0 \quad \text{si } l \neq j \quad (2.7)$$

$$N^j(x^l, y^l) = 1 \quad \text{si } l = j \quad (2.8)$$

**2.2. Système d'équations :**

Le système d'équations qui gouverne un problème de transport et de l'écoulement saturé pour une seule espèce est :

• **Equation de conservation de la phase fluide :**

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho \frac{k_{ij}}{\mu} \left( \frac{\partial p}{\partial x_j} - \rho g_j \right) \right) = \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \quad (2.9)$$

Le second membre de cette équation peut être développé (Bouhlila, 1999) :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = \phi \frac{\partial \rho}{\partial c} \frac{\partial c}{\partial t} + \phi \frac{\partial \rho}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \rho \frac{\partial \phi}{\partial c} \frac{\partial c}{\partial t} + \rho \frac{\partial \phi}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = \left( \phi \frac{\partial \rho}{\partial c} + \rho \frac{\partial \phi}{\partial c} \right) \frac{\partial c}{\partial t} + \left( \phi \frac{\partial \rho}{\partial p} + \rho \frac{\partial \phi}{\partial p} \right) \frac{\partial p}{\partial t} \quad (2.11)$$

En négligeant les variations de  $\phi$  en fonction de la concentration  $C$  :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = \rho S_s \frac{\partial p}{\partial t} + \phi \left( \frac{\partial \rho}{\partial c} \right) \frac{\partial c}{\partial t} \quad (2.12)$$

Avec  $S_S$  [ $L T^2 M^{-1}$ ] est le coefficient d'emmagasinement. Il décrit la compressibilité du milieu poreux en fonction du coefficient de compressibilité de fluide  $\beta$  [ $L T^2 M^{-1}$ ] et celui de la matrice poreuse  $\alpha$  [ $L T^2 M^{-1}$ ] :

$$S_S = \phi\beta + (1 - \phi)\alpha \quad (2.13)$$

- **Equation de Darcy :**

$$q_i = u_i\phi = -\frac{k_{ij}}{\mu} \left( \frac{\partial p}{\partial x_j} - \rho g_i \right) \quad (2.14)$$

- **Equation de conservation du soluté :**

L'équation de conservation de soluté évoluant à la fraction massique  $C$  vient :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho\phi D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho\phi C u_i) = \frac{\partial(\rho\phi C)}{\partial t} \quad (2.15)$$

Avec  $D_{ij}$  est le coefficient de dispersion donné par :

$$D_{ij} = (d + \alpha_L u) \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{u_i - u_j}{u} \quad (2.16)$$

Avec  $\delta_{ij}$  est le symbole de Kronecker,  $i$  et  $j$  les axes de l'espace de travail.

En tenant compte de l'équation de conservation de fluide ainsi que celle de Darcy, nous obtenons la forme non conservative de l'équation de transport :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho\phi D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - \rho\phi u_i \frac{\partial(c)}{\partial x_i} = \rho\phi \frac{\partial(c)}{\partial t} \quad (2.17)$$

Ces équations sont complétées par les équations d'état du fluide  $\rho$  et  $\mu$ .

- **Equations d'état du fluide**

Les équations d'état retenues pour le Code GEODENS sont :

- **La densité :**

$$\rho = \rho_0 (1 + \varepsilon c) \quad (2.18)$$

Avec

$\rho_0$  est la densité de l'eau douce [ $M/L^3$ ]

$\varepsilon = \frac{\rho_s - \rho_0}{\rho_0}$  est le contraste de densité.

$\rho_s$  est la densité à concentration maximale [ $M/L^3$ ].

$c = \frac{C}{C_{max}}$  est la concentration normalisée.

○ **La Viscosité**

$$\mu(c) = \mu_0 (1 + 0,4819 c - 0,2774 c^2 + 0,7814 c^3) \quad (2.19)$$

**2.3. Forme intégrale**

Le Passage aux formes intégrales se base sur l'utilisation de l'approximation nodale précédente et le critère de Galerkin de minimisation des résidus.

• **Equation de conservation de la phase fluide**

$$\int_{\Omega} N^I \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho \frac{k_{ij}}{\mu} \left( \frac{\partial p}{\partial x_j} - \rho g_j \right) \right) - \rho S_s \frac{\partial p}{\partial t} - \Phi \frac{\partial p}{\partial c} \frac{\partial c}{\partial t} \right] d\Omega = 0 \quad (2.20)$$

Une intégration par partie permet le passage à une forme intégrale faible :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\rho k_{ij}}{\mu} \frac{\partial N^I}{\partial x_i} \frac{\partial p}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega} \rho S_s \frac{\partial p}{\partial t} N^I d\Omega + \int_{\Omega} \left( \Phi \frac{\partial p}{\partial c} N^I \frac{\partial c}{\partial t} \right) d\Omega = \\ \int_{\Omega} \rho \frac{k_{ij}}{\mu} \rho g_i \frac{\partial N^I}{\partial x_i} d\Omega + \int_{\Gamma} \left( \frac{\rho k_{ij}}{\mu} \left( \frac{\partial p}{\partial x_j} - \rho g_j \right) \right) v_i d\Gamma \end{aligned} \quad (2.21)$$

L'approximation nodale de p et c permet le passage aux formes matricielles

$$[A_p(I, J)] \{p^J\} + [B_p(I, J)] \left\{ \frac{\partial p^J}{\partial t} \right\} + [D_p(I, J)] \left\{ \frac{\partial c^J}{\partial t} \right\} = \{F_p^I\} + \{Q_m^I\} \quad (2.22)$$

Avec :

$$[A_p(I, J)] = \int_{\Omega} \frac{\rho k_{ij}}{\mu} \frac{\partial N^I}{\partial x_i} \frac{\partial N^J}{\partial x_j} d\Omega \quad (2.23)$$

$$[B_p(I, J)] = \int_{\Omega} \rho S_s N^I N^J d\Omega \quad (2.24)$$

$$[D_p(I, J)] = \int_{\Omega} \rho \frac{\partial p}{\partial c} N^I N^J d\Omega \quad (2.25)$$

$$\{F_p^I\} = \int_{\Omega} \rho \frac{k_{ij}}{\mu} \rho g_i \frac{\partial N^I}{\partial x_i} d\Omega \quad (2.26)$$

$$\{Q_m^I\} = \int_{\Gamma} \left( \frac{\rho k_{ij}}{\mu} \left( \frac{\partial p}{\partial x_j} - \rho g_j \right) \right) v_i d\Gamma \quad (2.27)$$

• **Equation de transport**

$$\int_{\Omega} N^I \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho \Phi D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - \rho \Phi u_i \frac{\partial c}{\partial x_i} \right] d\Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial(\rho \Phi c)}{\partial t} N^I d\Omega \quad (2.28)$$

En appliquant une intégration par partie sur le terme diffusif uniquement, nous obtenons la forme convective de l'équation de transport (Bouhlila, 1999):

$$\int_{\Omega} \rho \Phi D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \frac{\partial N^I}{\partial x_i} d\Omega - \int_{\Omega} \rho \Phi u_i \frac{\partial c}{\partial x_i} N^I d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial(\rho \Phi c)}{\partial t} N^I d\Omega = \int_{\Gamma} \left( \rho \Phi S_w D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) v_i d\Gamma \quad (2.29)$$

Enfin, la forme matricielle vient avec l'approximation nodale :

$$[A_c(I, J)] \{C^J\} + [B_c(I, J)] \left\{ \frac{\partial C^J}{\partial t} \right\} + [D_c(I, J)] \left\{ \frac{\partial p^J}{\partial t} \right\} = \{F_c^I\} \quad (2.30)$$

Avec :

$$[A_c(I, J)] = \int_{\Omega} \left[ \rho \Phi D_{ij} \frac{\partial N^J}{\partial x_j} \frac{\partial N^I}{\partial x_i} - \rho \Phi u_i \frac{\partial N^I}{\partial x_i} N^J \right] d\Omega \quad (2.31)$$

$$[B_c(I, J)] = \int_{\Omega} \Phi \left( C \frac{\partial p}{\partial C} + \rho \right) N^J N^I d\Omega \quad (2.32)$$

$$[D_c(I, J)] = \int_{\Omega} C \rho S_s N^J N^I d\Omega \quad (2.33)$$

Le terme  $F_c^I$  représente le flux total, dispersif et convectif à la frontière.

- **Equation de Darcy**

Dans l'équation de transport, les composantes de la vitesse de Darcy interviennent explicitement dans le terme convectif, et pour le calcul du tenseur de dispersion dans le terme dispersif. Deux façons de procéder sont possibles : l'évaluation discontinue de la vitesse, la EDV, et l'évaluation continue, ou la ECV. Une démarche différente a été utilisée pour l'équation de Darcy. Cette démarche est bien définie dans (Bouhlila, 1999). En effet, elle consiste à calculer le terme de gravité de l'équation de Darcy dans l'élément triangulaire à six (6) nœuds uniquement en fonction des valeurs des concentrations des trois nœuds sommets et à l'aide de fonctions d'approximation nodales linéaires. Ce qui revient à une formulation aux éléments finis mixtes pour ce terme, et aboutit par conséquent, au même degré d'approximation, du premier ordre, pour  $\frac{\partial p}{\partial x_j}$  et pour  $\rho g_j$ .

#### 2.4. Discrétisation temporelle

Pour une variable simple X , la discrétisation temporelle peut être écrite selon deux schémas :

- Explicite

$$\left(\frac{\partial X}{\partial t}\right)_t = \frac{X_{t+\Delta t} - X_t}{\Delta t} \quad (2.34)$$

- Implicite

$$\left(\frac{\partial X}{\partial t}\right)_{t+\Delta t} = \frac{X_{t+\Delta t} - X_t}{\Delta t} \quad (2.35)$$

En mélangeant les deux approches, avec un pondérateur  $\alpha \in [0, 1]$ , on obtient une expression semi-implicite

Le schéma de discrétisation temporelle choisit est un schéma semi-implicite par une expression aux différences finies, il vient donc

$$\left(\frac{\partial X}{\partial t}\right)_{t+\alpha\Delta t} = \frac{X_{t+\alpha\Delta t} - X_t}{\Delta t} \quad (2.36)$$

Avec  $X_t$  et  $X_{t+\Delta t}$  Sont respectivement les valeurs de la variable X (dans ce cas p ou C) à l'instant t et (t+Δt).  $0 \leq \alpha \leq 1$ .

La valeur de X à (t + α.Δt) s'écrit :

$$X_{t+\alpha\Delta t} = \alpha X_{t+\Delta t} + (1 - \alpha)X_t \quad (2.37)$$

En adoptant ce schéma de discrétisation, les deux systèmes d'équations précédents, d'écoulement et de transport, s'écrivent comme suit :

à (t + αΔt)

$$\begin{aligned} & \left( \alpha [A_p]^{n+1} + \frac{1}{\Delta t} [B_p]^{n+1} \right) \{p\}_{t+\Delta t} + \frac{1}{\Delta t} [D_p]^{n+1} \{C\}_{t+\Delta t} \\ & = \alpha [F_p]_{t+\Delta t} + (1 - \alpha) [F_p]_t + (-(1 - \alpha) [A_p]^{n+1} - \frac{1}{\Delta t} [B_p]^{n+1}) \{p\}_{t_{n+1}} \\ & \quad - \frac{1}{\Delta t} [D_p]^{n+1} \{C\}_{t_{n+1}} \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} & \left( \alpha [A_c]^{n+1} + \frac{1}{\Delta t} [B_c]^{n+1} \right) \{C\}_{t+\Delta t} \\ & = \alpha [F_c]_{t+\Delta t} + (1 - \alpha) [F_c]_t + (-(1 - \alpha) [A_c]^{n+1} \\ & \quad - \frac{1}{\Delta t} [B_c]^{n+1}) \{p\}_{t_{n+1}} \end{aligned} \quad (2.39)$$

Les matrices  $A_p, B_p, D_p, A_c$  et  $B_c$  sont non linéaires vu qu'elles dépendent de  $\square$ ,  $\square$  et  $K$  qui dépendent de la concentration  $C$  et de la pression  $P$ . Donc ces matrices sont re-calculées à chaque itération de résolution du problème non linéaire.

Les vecteurs  $F_p$  et  $F_c$  sont remplacés à  $t+\alpha\Delta t$  par :  $F_{t+\alpha\Delta t} = \alpha F_{t+\Delta t} + (1 - \alpha)F_t$

Donc le premier vecteur est ré-évalué à chaque itération alors que le deuxième est calculé en début de pas.

Afin de résoudre ce système fortement non linéaire, il est nécessaire d'adopter un calcul itératif à chaque pas de temps.

Une extrapolation linéaire est utilisée pour déterminer une estimation des variables  $p$  et  $C$ .  $\{p\}^{proj}$  et  $\{C\}^{proj}$  à  $(t + \Delta t_{n+1})$ .

Cette estimation n'est faite que pour la première itération de chaque pas de temps supplémentaire ( $\Delta t_{n+1}$ ).

$$\{p\}^{proj} = \{p\}_t + \frac{\Delta t_{n+1}}{\Delta t_n} (\{p\}_t - \{p\}_{t-\Delta t_n}) \quad (2.40)$$

$$\{C\}^{proj} = \{C\}_t + \frac{\Delta t_{n+1}}{\Delta t_n} (\{C\}_t - \{C\}_{t-\Delta t_n}) \quad (2.41)$$

Ce sont ces valeurs qui permettent d'initialiser à  $(t+\Delta t_{n+1})$  le système à résoudre, lors des itérations suivantes. Nous actualisons les matrices des systèmes à l'aide des valeurs de  $\{p\}_{t+\Delta t_n}$  et  $\{C\}_{t+\Delta t_n}$  ;  $i = 1, N_{es}$ , c'est-à-dire celles de l'itération précédente.

Le critère de convergence choisi, pour arrêter le calcul itératif, est la norme relative du vecteur des inconnues,  $X$  :  $\frac{\|\Delta X\|}{\|X\|} \leq \varepsilon$

Avec  $\{\Delta X\}$  est le vecteur accroissement de  $\{X\}$  entre deux itérations successives.

- **Les conditions aux limites :**

La spécification des valeurs des variables inconnues ( $p$  et  $C$ ) aux nœuds de frontière réduit la taille des systèmes à résoudre. En effet, les équations correspondantes sont supprimées et par conséquent les matrices et les vecteurs des systèmes sont restructurés (Dhatt, et al., 1981).

- Pour l'écoulement :

Sur  $\Gamma_1$  : pression imposée :  $p=p_1$ .

Sur  $\Gamma_2$ : flux normal imposer :  $q=q_1$

- Pour le transport et pour chacune des espèces en solution :

Sur  $\Gamma_3$  : Concentration imposée :  $C=C_1$ .

Sur  $\Gamma_4$ : Flux de dispersion du soluté imposé  $q_c = -\rho\Phi D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j}$  (BOUHLILA, 1999).

La frontière  $\Gamma$  du domaine d'étude vérifie :  $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 + \Gamma_4$

Comme il est mentionné, GEODENS est un code qui se base sur des méthodes numériques publiées par DHATT et TOUZOT. Cette partie est essentiellement inspirée du livre (Dhatt, et al., 1981).

### 2.5. Méthodes de stockage

Pour le stockage des matrices globales, le code utilise la méthode de la « ligne de ciel ». Elle consiste à stocker les termes de la matrice globale  $[K]$ , de dimension  $n \times n$ , par ligne et colonnes variables. Cette méthode consiste à utiliser trois tables de stockage :

- VKGD : contient les termes diagonaux.
- VKGS : contient les termes du triangle supérieur organisés par colonnes descendantes (sans les termes diagonaux).
- VKGI : contient les termes du triangle inférieur organisés par ligne de gauche à droite (sans les termes diagonaux).

La ligne de ciel est l'enveloppe des sommets des colonnes de hauteurs variables. Elle est symétrique, par rapport à la diagonale, de l'enveloppe des extrémités gauches des lignes, que  $[K]$  est symétrique ou non . Elle est définie par la table des hauteurs des colonnes  $h_j$ .

Les termes nuls de  $[K]$  extérieurs aux deux enveloppes ne sont pas stockés alors que les termes nuls intérieurs sont stockés.

Afin de déterminer la position d'un terme  $k_{ij}$  dans les tables VKGS et VKGI, cette méthode utilise une table appelée "table de localisation des débuts de colonnes" KLD, de dimension  $n+1$ , définie par :

$$KLD(1) = 1; KLD(2) = 1 \quad (2.42)$$

$$\text{KLD}(i) = \text{KLD}(i-1) + h_j(i-1) \quad I=3,4,\dots, n+1 \quad (2.43)$$

La place d'un terme  $k_{ij}$  de la matrice  $[K]$  se trouve placé dans :

- Si  $i = j$  en VKGD(i).
- Si  $i < j$  en VKGS (l) avec  $l = \text{KLD}(j+1) - j + i$ .
- Si  $i > j$  en VKGI (l) avec  $l = l = \text{KLD}(i+1) - i + j$ .

L'espace de stockage nécessaire est :

- $n$  mots réels pour VKGD
- $\text{KLD}(n+1)-1$  mots réel pour VKGS ou VKGI

Avec un octet est un mot de 16 bits ou DOUBLE mots de 32 bits.

- **Inconvénients de la méthode de ligne de ciel**

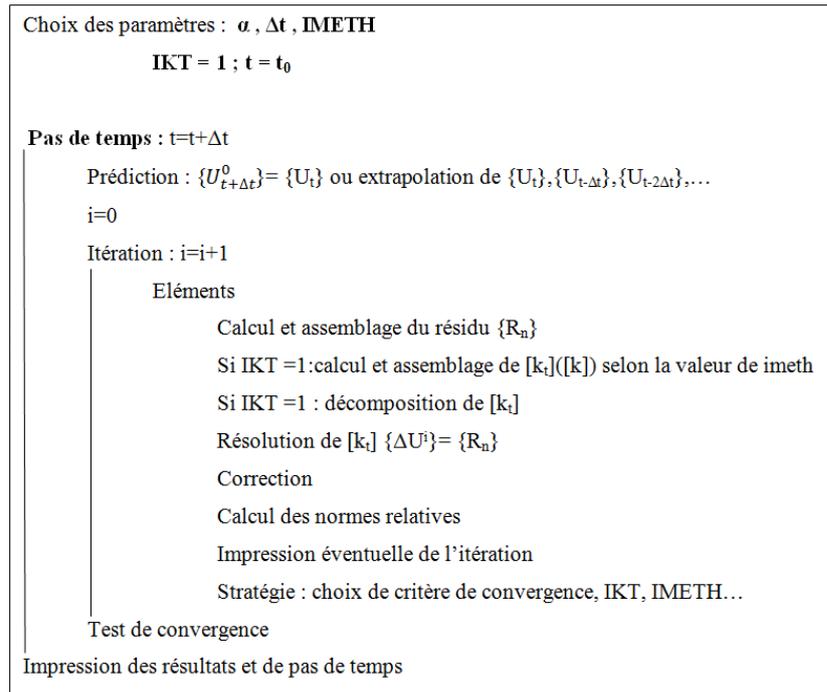
La puissance de cette méthode provient en grande partie du fait qu'elle ne modifie pas la matrice du système. Les seules opérations nécessaires sont des multiplications de matrices par des vecteurs et des produits scalaires. Mais L'inconvénient majeur de la méthode est la nécessité de stocker tous les zéros de la matrice sous la ligne de ciel. Il faut donc pouvoir mémoriser uniquement les éléments non nuls de la matrice, car ce sont eux et, uniquement eux, qui interviendront dans les opérations de calcul. Pour des structures à trois dimensions, cela peut représenter une quantité de mémoire très importante (trois à quatre fois supérieure à celle utilisée pour stocker les termes non nuls). Ce problème limite les performances du code. En effet :

- Pour le temps de calcul : le stockage de nombre nul représente une augmentation des nombres traités au cours du calcul, ce qui fait un travail de plus pour le processeur que ce soit au cours de la lecture de données ou bien au cours des opérations de calcul, c'est une perte de temps.
- Pour la taille de mémoire : actuellement, le code utilise la notion de « super vecteur » pour le stockage de tous les tableaux et des paramètres utilisés. L'utilisation de cette notion représente une limitation de la quantité de mémoire disponible pour le code. Cette limitation devient de plus en plus limitante avec la méthode de ligne de ciel qui utilise des espaces mémoire énormes en stockant tous les termes non nuls à l'intérieur de l'enveloppe.

2.6. Méthode de résolution (schéma numérique et solveur)

• **Schéma numérique :**

Le schéma numérique actuel se base sur l’algorithme d’Euler semi-implicite (figure 2.2.). Les étapes de cet algorithme sont analogues aux opérations correspondant à l’algorithme de Newton-Raphson pour des problèmes non stationnaires et non linéaires qui garantit une meilleure convergence [ (Paniconi, et al., 1994) ; (Lehmann, et al., 1998)].



**Figure 2 2:Algorithme d’Euler semi-implicite, pour problèmes non stationnaires et non linéaires, utilisant la méthode de Newton-Raphson (Dhatt et Touzot, 1981)**

• **Solveur :**

Malgré son schéma numérique itératif, le code utilise un solveur ou une méthode directe pour la résolution du système linéaire. Cette méthode est celle de GAUSS. Elle est constituée de deux étapes :

- Triangularisation : Cette étape consiste à transformer le système d’équations à un système triangulaire :

$$\begin{bmatrix} d & Sup \\ 0 & d \end{bmatrix} \{U_n\} = \{F'\} \tag{2.44}$$

- Résolution du système triangulaire supérieur : cette étape consiste à calculer les inconnues  $U_n$ , de la dernière à la première, par résolution du système triangulaire précédent.

- **Inconvénients :**

Cet algorithme, bien qu'il utilise un solveur direct, se base sur un calcul itératif qui se termine par un test de convergence pour la solution à la fin de chaque itération et pour chaque pas de temps. Le solveur existant permet une convergence après un certain nombre d'itérations par pas de temps.

Ce système de résolution est l'un des algorithmes le plus robustes pour le calcul du système non linéaire et non stationnaire. En effet, il garantit la convergence et la stabilité du système. Le seul point faible existant est le temps de calcul élevé.

### 3. Nouvelle version de GEODENS

La modélisation des problèmes d'écoulement et de transport couplé est très gourmande en mémoire de stockage à cause de la grande taille des matrices systèmes. Même avec l'évolution et l'amélioration des performances des outils informatiques, la résolution numérique de ces problèmes nécessite un temps de calcul CPU élevé. L'utilisation des méthodes numériques non adéquates risque d'augmenter le temps de calcul ainsi que la mémoire de stockage nécessaire. Comme il est mentionné, GEODENS est un code qui se base sur des méthodes numériques publiées par DHATT et TOUZOT en 1981. Les différentes méthodes de calcul utilisées sont vieilles et dépassées et c'est la principale source des problèmes numériques du code. En effet, le problème se pose pour la méthode de stockage des matrices et la méthode de résolution avec un temps de calcul élevé et la nécessité d'un grand espace mémoire.

Afin de résoudre les différents problèmes numériques du code, il fallait passer par plusieurs étapes :

#### 3.1. Passage de Windows à Linux

Le système d'exploitation 'Linux' permet une utilisation plus simple et plus efficace pour tout type de programmation et surtout pour le FORTRAN, en effet il offre une stabilité pour le noyau de calcul ainsi qu'une manipulation beaucoup plus simple pour les différentes options de compilation : debug, Valgrind , contrôle de la mémoire utilisée , changement du compilateur...

Plusieurs modifications ont été nécessaires pour ce passage tel que le changement du format des fichiers (DOS2UNIX), vérifications des allocations de mémoire pour chaque tableau afin d'éviter le débordement de la mémoire (gdb, idb, valgrind...).

Afin de garantir la stabilité du programme, il était nécessaire d'utiliser plusieurs compilateurs fortran tel que : ifort (compilateur INTEL), gfortran(compilateur GNU),fortran SUN.... et de corriger les différentes erreurs pour chaque type de compilateur ce qui nous offre un programme compatible avec les différents compilateurs.

### 3.2. Passage au FORTRAN 90

Un des problèmes du programme GEODENS est la limitation de la mémoire utilisée due à sa méthode de stockage "super vecteur" qui se base sur l'utilisation d'un énorme vecteur pour le stockage des différentes variables. Comme il n'est pas possible de changer toute cette méthode (faute de temps), l'idée était de passer au fortran 90 qui nous offre l'utilisation de l'allocation dynamique de la mémoire qui n'est pas possible avec le fortran 77 qui ne permet d'utiliser que l'allocation statique.

### 3.3. Différence entre allocations statique et dynamique :

L'allocation statique se base sur trois étapes :

- ◆ Prévision de l'espace mémoire nécessaire avant l'exécution du programme (définir la quantité nécessaire dans le code source).
- ◆ Réserve de l'espace défini juste à la compilation.
- ◆ L'espace mémoire réservé devient accessible juste avant l'exécution.

L'allocation dynamique nous permet de ne pas initialiser ni la taille ni la quantité de mémoires nécessaire pour un tableau, en effet l'allocation et la libération de mémoire se font au cours de l'exécution.

Un autre avantage du Fortran 90 est l'utilisation des modules et des pointeurs ce qui permet d'éviter l'utilisation des COMMON qui peuvent être une source de faute et d'encombrement de la mémoire.

### 3.4. Changement de la méthode de stockage

Le premier objectif de ce travail est le changement de la méthode de stockage de la matrice globale. La méthode actuelle 'ligne de ciel' est stockée sur trois vecteurs :

- ◆ VKGD: termes diagonaux
- ◆ VKGS: termes du triangle sup organisés par colonnes descendantes
- ◆ VKGI: termes du triangle inférieur organisés par ligne de gauche à droite.

Une des méthodes les plus adéquates et la plus utilisée pour le stockage des matrices creuses dans des problèmes des éléments finis c'est le format CSR (compressed sparse row) ou CSC (compressed sparse column). Ce format offre un stockage optimum en éliminant tous les éléments nuls de la matrice. Il est aussi le format le plus utilisé par la majorité des codes des éléments finis actuels.

La structure de données CSC pour une matrice  $n \times n$  possédant  $m$  coefficients non nuls comprend trois tableaux. Le tableau values, de taille  $m$ , contient toutes les valeurs non nulles de la matrice, en parcourant la matrice colonne par colonne de gauche à droite et de haut en bas. Le tableau row, de taille  $m$  également, contient à l'indice  $i$  le numéro de la ligne sur laquelle se trouve le coefficient values[ $i$ ]. Enfin, le tableau colptr de taille  $n + 1$  contient les indices de début des colonnes dans le tableau values : ainsi, les coefficients de colonne de la matrice sont stockés entre les indices colptr[ $j$ ] et colptr[ $j+1$ ] - 1 du tableau values.

Pour passer du stockage 'SKYLIGNE' au stockage 'CSC' il fallait tout d'abord comprendre le principe de cette méthode.

- ◆ Une première étape obligatoire à faire est le passage au format 'i-j-val' ou 'coord' à partir du format ligne de ciel. Cette étape permet à la fois de bien comprendre le principe de fonctionnement du format actuel et elle nous sert après comme une référence pour la comparaison des sorties de deux méthodes (ligne de ciel et csc). Cette étape est générée en utilisant la subroutine 'ligne\_to\_coord'.
- ◆ Le passage directement au format CSC est très délicat puisqu'il nécessite beaucoup de calcul et d'espace mémoire au cours de l'exécution, pour cela il fallait passer par 3 grandes étapes :
  - Ignorer le passage au format ligne de ciel et l'assemblage de la matrice globale directement au format 'coord' sans aucun test ni sur les éléments nuls ni sur les éléments dupliqués. Cette étape est faite par la subroutine 'assemb\_coord'.
  - Passage au format CSC aussi en gardant les éléments dupliqués et en utilisant la subroutine COO2CSC qui est construite à l'origine par ( Saad, 1994) dans sa

bibliothèque 'Sparcekit' ensuite elle été modifiée par (Canot, 2011) dans sa bibliothèque Muesli et elle est aussi modifiée une troisième fois pour l'adapter à notre code.

- Faire un tri des éléments sous le format 'coord' en utilisant la subroutine 'row\_sort' qui est aussi une subroutine de la bibliothèque SPARCEKIT2 et qui a subi des modifications pour l'adapter à notre cas.
- Il ne reste plus qu'à enlever les valeurs dupliquées et faire un réarrangement des vecteurs de la matrice en utilisant la subroutine 'add\_dupl\_entries' élaborée par (Canot, 2011), bien sûr, en ajoutant des modifications.

Après ces quatre étapes, le programme tourne bien avec la méthode de stockage CSC.

Comme l'un des objectifs de ce travail est de gagner en temps de calcul, l'idée était l'élimination du passage par ces quatre étapes à chaque itération puisque la structure de la matrice ne change pas au cours de l'exécution. Le principe de l'étape suivante est d'utiliser un vecteur qui garde la trace de chaque élément à partir du premier pas de temps et donc en se basant sur ce vecteur chaque élément calculé connaît directement son emplacement dans le nouveau format sans passer par toutes les autres étapes. Pour faire cela, on était obligé, au cours du premier pas de temps, d'ajouter des modifications à chacune des subroutines précédentes pour garder la trace de chaque élément et de la mettre dans un vecteur 'MAP'. (Voir figure 2.3).

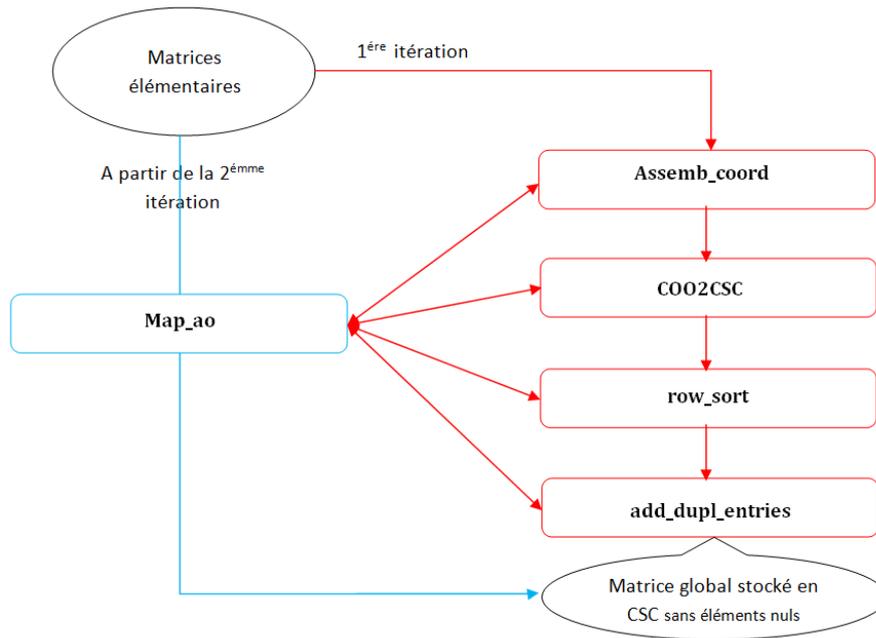


Figure 2 3:Stratégie de stockage en format CSC

- **Changement de solveur**

Le type de solveur dépend de plusieurs facteurs, tel que le format de stockage des matrices, la norme de convergence choisie et la méthode discrétisation utilisée. Les solveurs des systèmes linéaires sont de deux types : direct ou itératif. Actuellement, il existe plusieurs bibliothèques de résolutions des systèmes linéaires tels que : ITPACK 2C, UMFPACK ...

Le solveur choisi est UMFPACK (Davis, et al., 1997) qui utilise une méthode de résolution directe. Afin d'adapter ce solveur à notre code, il fallait utiliser un 'Wrappeur ' qui permet le passage du langage c au langage fortran puisque UMFPACK est programmé en langage C.

- **UMFPACK**

UMFPACK est un ensemble de routines pour résoudre des systèmes d'équations linéaires,  $Ax = b$ , lorsque A est une matrice creuse et non symétrique. La matrice creuse A peut-être carrée ou rectangulaire, singulière ou non singulière et réelle ou complexe (ou toute combinaison). Seules les matrices carrées A, peuvent être utilisées pour résoudre le système  $Ax = b$  ou tout autre système lié. La résolution se fait par une méthode multifrontale.

- **Efficacité numérique du nouveau solveur**

Le résidu pour tout système non linéaire  $AX=B$  ( $F(x)=0$ ) est le vecteur : Résidu  $AX-B= F(x)$ , nous remarquons que pour les deux schémas notre résidu s'approche des valeurs  $10^{-11}$  à la fin du problème. Nous avons présenté (figure ci-dessous) l'évolution du  $\log_{10}(F(x))$  en fonction des pas de temps. Pour les deux méthodes le résidu diminue progressivement, sauf que nous remarquons que l'évolution du nouveau solveur est plus linéaire et stable. nous jugeons donc que notre nouveau solveur est plus fiable et adéquat au nouveau schéma.

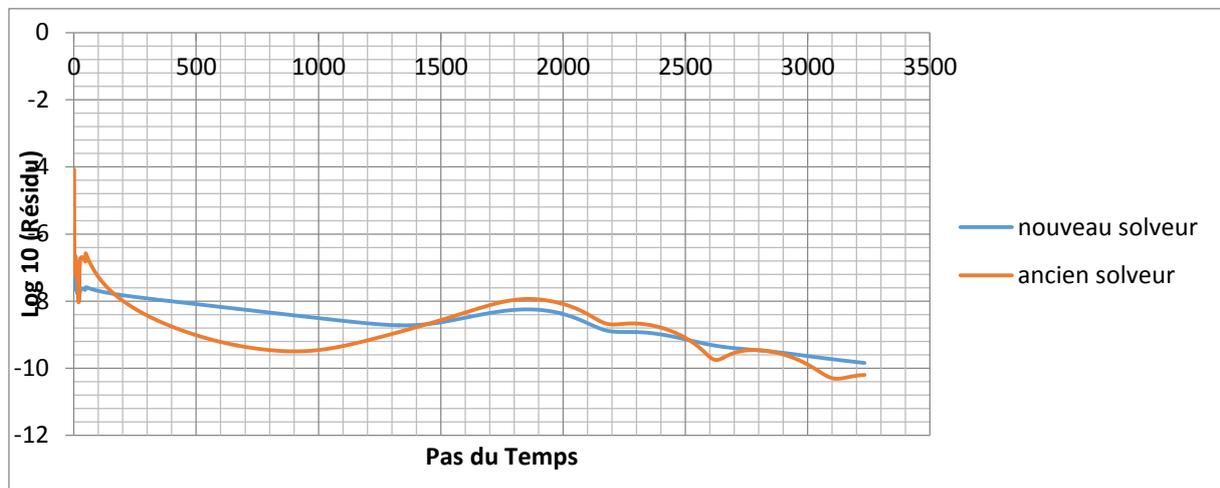


figure 2.4 Evolution du  $\log_{10}(F(x))$  en fonction des pas des temps

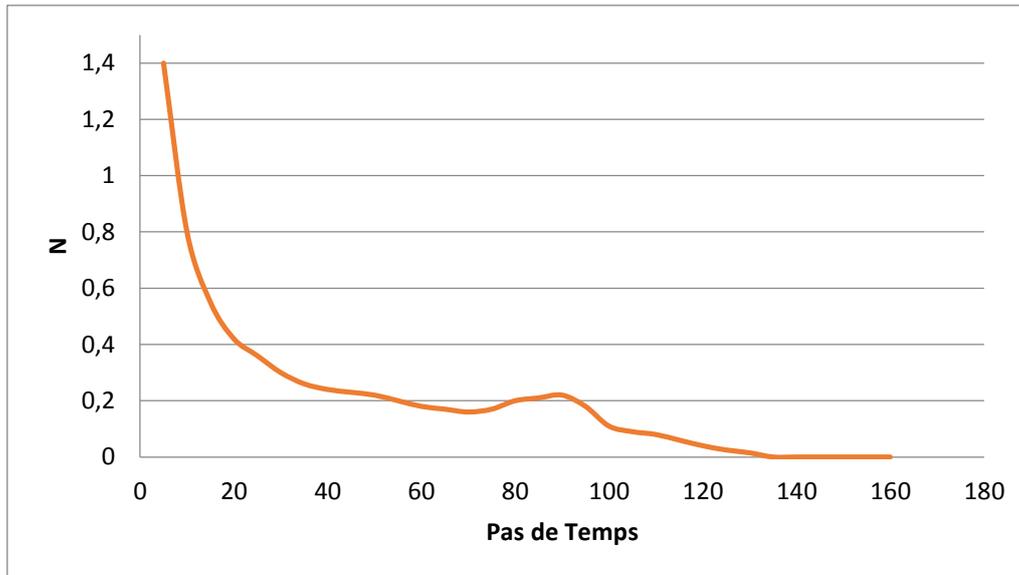
### 3.5. Changement de schéma numérique

Afin de résoudre le système d'équation fortement non linéaire, GEODENS utilise un schéma itératif de type Newton-Raphson. Classiquement les systèmes non linéaires sont résolus par la méthode de Newton ou une de ses variantes. Ces méthodes sont très performantes et ils ont une convergence quadratique près de la solution d'où leur grand intérêt (Dieuleveult, 2008).

Pour garantir l'efficacité de ce changement, une comparaison a été établie entre l'ancien schéma numérique (avec les itérations) et le nouveau schéma qui utilise le solveur UMFPACK. Cette comparaison se base sur le calcul de la norme de la différence entre les deux vecteurs solutions (pour chaque schéma) divisés par le max du vecteur solution.

$$N = \frac{\sqrt{\| (S1 - S2)^2 \|}}{\| \max(S1) \|} \quad (2.44)$$

Ce calcul est établi à chaque pas de temps et il donne une convergence de cette norme vers une valeur nulle (voir figure 2.5) :



**Figure 2 5:variation de la norme de différence entre les deux schémas numériques par rapport au temps ( $N = \frac{\sqrt{\| (S1 - S2)^2 \|}}{\| \max(S1) \|}$ )**

La Figure 2.4 montre que la norme N passe très rapidement de 1,3 juste au début du calcul vers une valeur nulle juste après une minute. Ce qui montre que les vecteurs solutions des deux méthodes s'accordent très rapidement pour donner exactement le même résultat physique. La Figure 2.4 montre une différence entre les deux vecteurs résultats des deux méthodes justes au lancement du calcul, cette différence est due essentiellement au principe de résolution du code qui se base sur un vecteur résultat initialisé et qu'il corrige au fur et à mesure que le calcul avance.

Dans le cas de couplages importants, ou de non - linéarités entre les équations du problème, il est difficile d'explicitier des critères de convergence et de stabilité numériques. Nous procédons donc et dans un premier temps par essais et échecs successifs, en s'inspirant tout de même des critères explicites du cas linéaire. En fait et dans la version actuelle des modèles proposés, le choix du pas de temps de calcul est fait d'une façon empirique, au vu de la qualité de convergence de la solution. En général, nous sommes amenés à prendre un pas

de temps relativement court au début du processus. Il est alors possible ultérieurement de l'allonger progressivement.

#### 4. Validation et améliorations numériques

Afin de tester les pouvoirs et les performances numériques du code, nous allons tester son comportement avec une application physique. Le problème test proposé est la cellule de Rayleigh qui est une transposition du cas de la convection thermique libre et qui a fait l'objet de plusieurs travaux [ (Bear, et al., 1968); (Scheidegger, 1974)] . Ce problème a été traité et testé par BOUHLILA en 1999 et le code a montré une grande fiabilité physique. Ce qui nous offre une bonne évaluation de performances physique du code après son amélioration numérique.

##### 4.1. Cellule de Rayleigh

###### 4.1.1. Description physique

Le problème physique consiste en une cavité verticale de hauteur  $L$  et de largeur  $B$  remplie d'un matériau poreux où peut circuler un fluide à concentration globale en sels,  $C$  variable. Cette cavité est caractérisée par un flux nul sur tous les côtés, à une concentration fixée  $C_0$  à la base et à une concentration fixée  $C_1$  supérieure à  $C_0$  en haut de la cellule (voir Figure 2.6).

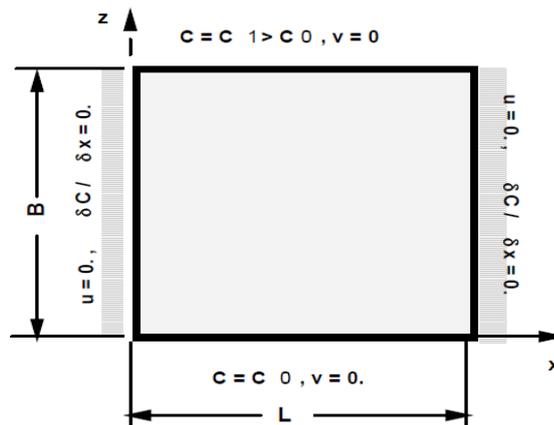


Figure 2 6:Cellule de convection saline (BOUHLILA, 1999).

Ce problème est connu sous le nom de Rayleigh car il est gouverné essentiellement par le nombre de Rayleigh :

$$Ra = \frac{\Delta\rho \cdot g \cdot k \cdot B^2}{L \cdot \mu \cdot \Phi d_0} \quad (2.45)$$

Avec  $\Delta\rho$  représente la différence de masse volumique du fluide entre le haut et le bas de la cellule,  $\mu$  la viscosité du fluide,  $k$  et  $\Phi$  respectivement la perméabilité et la porosité du milieu poreux remplissant la cavité et  $d_0$ , le coefficient de diffusion moléculaire du sel dans l'eau.

En contrôlant le nombre de Rayleigh l'écoulement dans la cellule représente trois régimes différents. En effet, on montre que, par exemple (Elder, 1967) et (Scheidegger, 1974) :

- ◆ Si  $Ra \leq 4\pi^2$ , soit environ 40, il n'y a pas de courant de convection.
- ◆ Si  $4\pi^2 \leq Ra \leq 240$  à 390 : Il s'installe un régime de convection stable. Ce sont les cellules de convections.
- ◆  $Ra \geq 240$  à 390 : le régime est transitoire et fluctuant.

Pour cela le travail consiste à tester aussi la fiabilité du code pour chaque régime avec trois valeurs différent du nombre de Rayleigh.

#### 4.1.2. Validation

Dans tous les calculs, le maillage utilisé est de 441 nœuds. C'est le même maillage adopté par (Bouhlila, 1999), nous comptons qu'après les améliorations nous pourrions traiter des maillages de plus en plus raffinés.

Il faut noter que pour toutes les simulations nous déterminons au préalable un régime hydro-dynamiquement stable avec  $C = C_0$  partout. Ensuite, et à partir d'un instant initial, nous démarrons le calcul transitoire avec  $C = C_1$  imposée en haut de la cavité.

Le code GEODENS a été bien testé et validé par BOUHLILA depuis 1999. Pour le problème actuel, cellule de Rayleigh, le code a été testé pour trois nombres de Rayleigh différents afin de vérifier son efficacité pour les trois régimes différents : les nombres de Rayleigh utilisés sont : 100, 250 et 500.

La fiabilité physique du code est très importante, pour cela, nous avons répété les mêmes simulations effectuées par (Bouhlila, 1999)

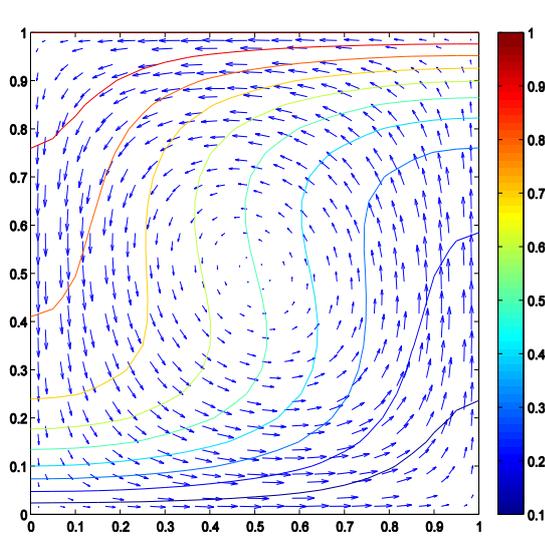


Figure 2.7: Iso-concentrations et champ de vitesses pour le nombre de Rayleigh  $Ra=100$ , avec viscosité constante ( $\mu=\mu_0$ ) pour la nouvelle version du code

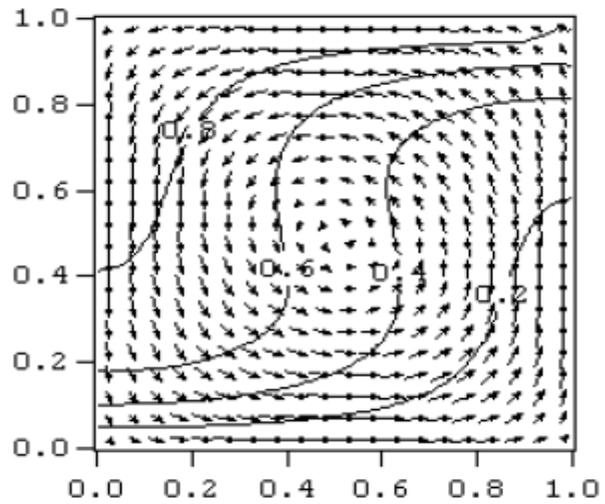


Figure 2.8: Iso-concentrations et champ de vitesses pour le nombre de Rayleigh  $Ra=100$ , avec viscosité constante ( $\mu=\mu_0$ ), (BOUHLILA, 1999)

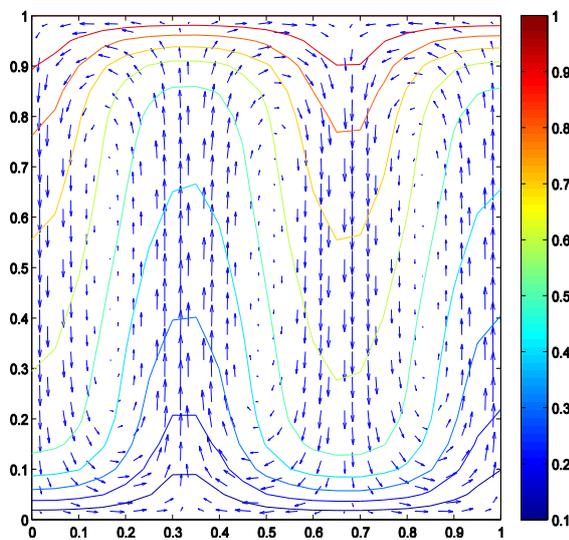


Figure 2. 9: Iso-concentrations et champ de vitesses pour le nombre de Rayleigh  $Ra=250$ , avec viscosité constante ( $\mu=\mu_0$ ) pour la nouvelle version du code

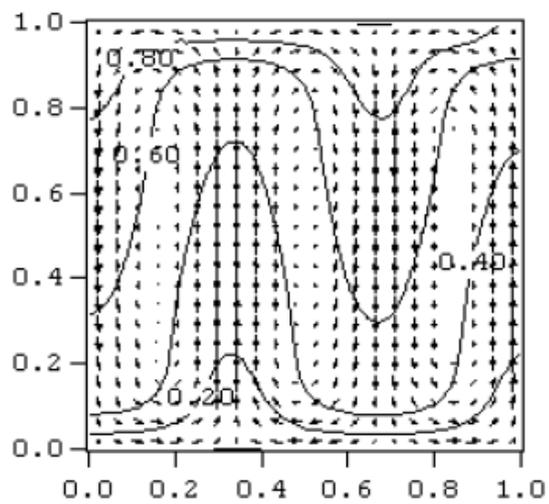
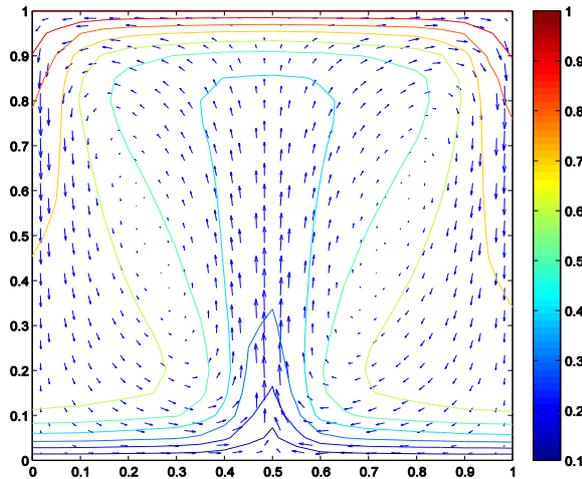
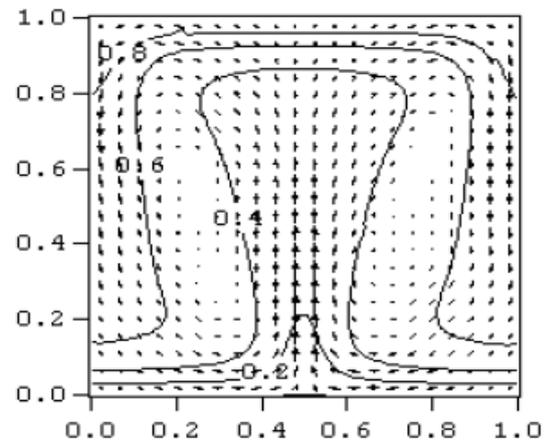


Figure 2. 10: Iso-concentrations et champ de vitesses pour le nombre de Rayleigh  $Ra=250$ , avec viscosité constante ( $\mu=\mu_0$ ), (BOUHLILA, 1999)



**Figure 2.11: Iso-concentrations et champ de vitesses pour le nombre de Rayleigh  $Ra=500$ , avec viscosité constante ( $\mu=\mu_0$ ) pour la nouvelle version du code**



**Figure 2.12: Iso-concentrations et champ de vitesses pour le nombre de Rayleigh  $Ra=500$ , avec viscosité constante ( $\mu=\mu_0$ ), (BOUHLILA, 1999)**

Les trois tests précédents (Figure 2.7 à 2.12) ont montré la fiabilité de la nouvelle version du code. En effet, les modifications apportées ont amélioré la performance numérique, mais elles n'ont pas modifié l'efficacité physique du code.

4.2. Le problème d’ELDER

4.2.1. Description physique

Le problème d’Elder représente un exemple des phénomènes de la convection libre. (Elder, 1967) est le premier qui a étudié expérimentalement et numériquement la convection thermique en chauffant une partie de la frontière d’un milieu poreux. La première expérience réalisée a été appelée ‘short-heater problem’. Elder n’a pas seulement étudié expérimentalement ce phénomène, mais il a aussi donné des suggestions pour éliminer les problèmes d’instabilité numérique. Le problème d’Elder est l’un des phénomènes les plus intéressants à étudier et il sert aussi comme un Benchmark pour les problèmes liés aux écoulements et transferts densitaires.

(Diersch, 1981) et (Voss, et al., 1987) sont les premiers qui ont transformé le problème de la convection thermique d’Elder en un problème purement densitaire en plaçant de l’eau salée lourde sur le haut du domaine poreux. Depuis, le problème d’Elder est devenu un problème densitaire en respectant l’analogie avec le problème thermique original.

Le problème étudié dans ce travail est un problème imaginaire, mais qui peut exister réellement et qui peut jouer un rôle très important dans les nappes et les aquifères réels. Le problème étudié est similaire à celui étudié dans la documentation du code FEFLOW, il est aussi similaire à celui étudié par (Voss, et al., 1987). La configuration et les paramètres du problème sont donnés par la Figure 2.13 et le tableau 2.1.

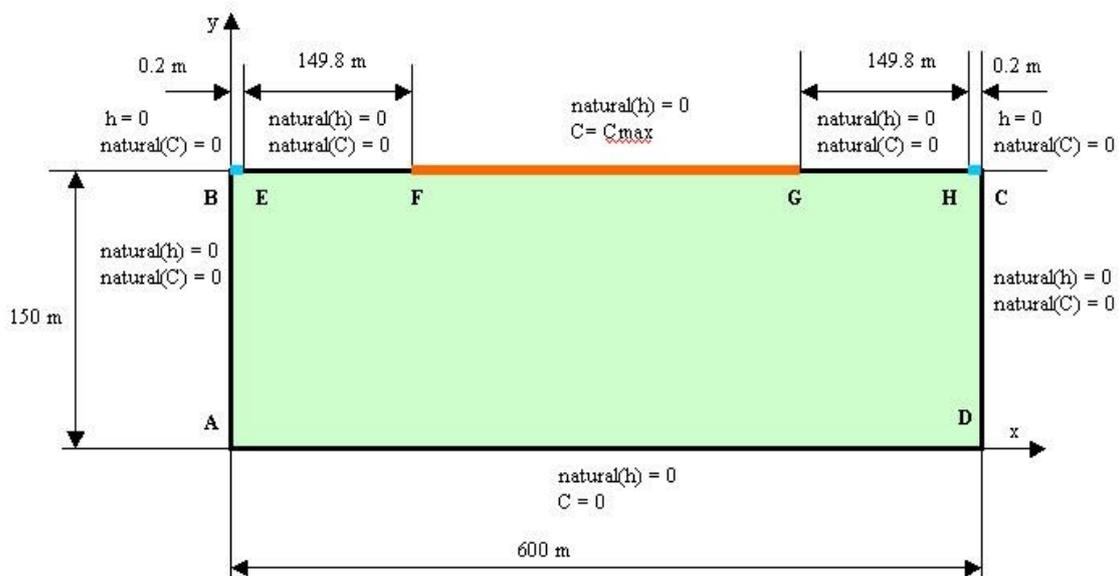


Figure 2.13: Configuration et conditions aux limites du problème d’Elder

Tableau 2. 1: Paramètres du problème d'Elder

Symbole	Quantité	Valeur	unité
$g$	Accélération de pesanteur	9.81	$ms^{-2}$
$k$	Perméabilité	$4.845 \cdot 10^{-13}$	$m^2$
$Ra$	Nombre de Rayleigh	400	-
$\Phi$	porosité	0.1	-
$D$	Diffusion moléculaire	$3.565 \cdot 10^{-6}$	
$\alpha_l / \alpha_t$	Dispersion longitudinale et transversale	0.00/0.00	m
$\rho_0 / \rho_s$	Densité de l'eau et de de la solution à concentration maximale	$1.0 \cdot 10^3 / 1.2 \cdot 10^3$	$Kg m^{-3}$

Le problème d'Elder ne possède pas une solution analytique exacte qu'on peut utiliser comme référence. La seule méthode pour vérifier une solution est en la comparant à des solutions numériques telles que celle donnée par Voss et Souza (Figure 2.14).

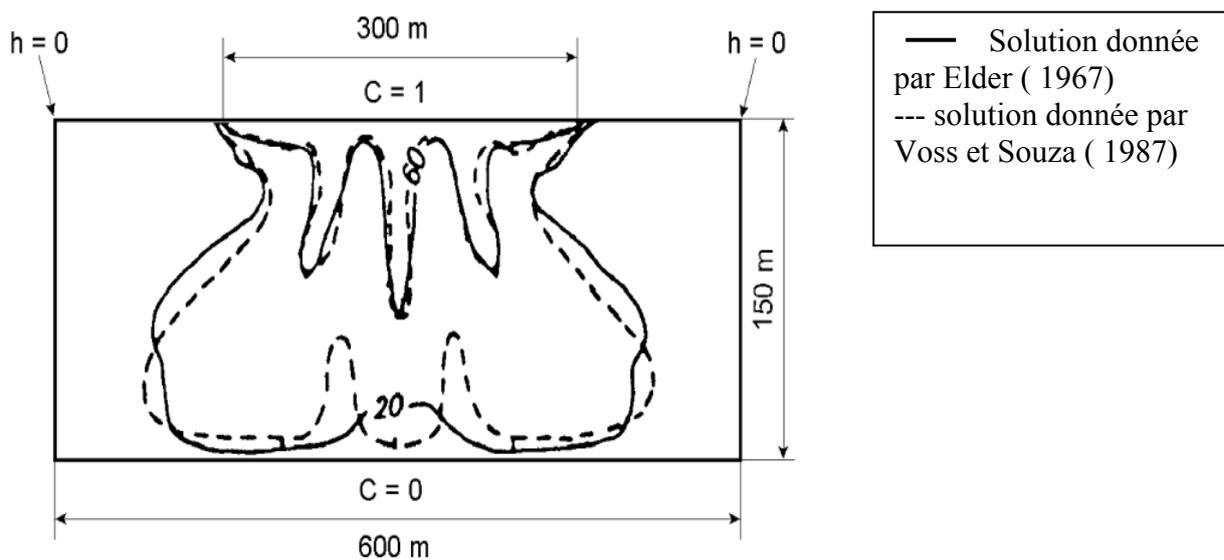


Figure 2.14: solution numérique du problème d'Elder ; les isoconcentrations 20% et 60% pour une simulation de 10 ans. (Voss et al., 1987)

Plusieurs travaux ont été effectués sur ce problème en utilisant plusieurs types de maillages. La majorité de ces travaux ont adopté un maillage plus au moins fin, en effet, les maillages adoptés ont généralement entre 1000 et 2000 nœuds sauf pour quelques travaux spécifiques qui s'intéressent aux sources d'instabilité tel que (Forlokovic, et al., 2001). Le maillage utilisé dans ce travail est de 1681 nœuds et 800 éléments.

4.2.2. Validation

Le principe de simulation est pareil que celui du problème de cellule de Rayleigh. En effet les conditions initiales sont calculées en avance, nous choisissons de calculer un régime pseudo-permanent en calculant à chaque fois un régime transitoire jusqu'à atteindre un niveau d'évolution dans le temps quasi nul.

Les problèmes convectifs tel que celui d'Elder sont très sensibles au maillage. Une étude de sensibilité du problème d'Elder par rapport au raffinement de maillage a été menée par (Forlokovic, et al., 2001). Ils ont trouvé que la direction d'écoulement dans le centre du domaine dépend du raffinement de maillage. En effet, lorsque le maillage est bien raffiné l'écoulement central est vers le haut, par contre si le maillage est plus au moins raffiné, de l'ordre de 3000 nœuds ou moins, l'écoulement central est vers le bas. Le tableau 2.2 résume les différentes études et leurs résultats pour la direction de l'écoulement au centre du domaine.

Tableau 2. 2:direction de l'écoulement centrale en fonction du maillage (Oltean, et al., 2001)

Etudes \ maillage	Moins que 1000 nœuds	Entre 1000 et 2000 nœuds	Entre 3500 et 5000 nœuds
Diersh(1981)	↓	-	-
Voss and Souza (1987)	-	↓	-
Oldenburg and Pruess (1995)	-	↓	↑
Kolditz et al. (1998)	-	↓	↑
Ackerer et al.(1999)	↑	↓	↑

Mazzia et al.(2001)	-		-
Oltean and Buess (2001)			
GEODENS, cette étude.	-		-

Les résultats obtenus par GEODENS correspondent bien à la gamme de solutions existantes. En effet, l'écoulement central est dirigé vers le bas (Figure 2.15). Afin de mieux visualiser le champ de vitesse dans le centre, nous avons fait un zoom sur la partie centrale du domaine de travail (Figure 2.16) . Le zoom confirme bien la direction vers le bas de l'écoulement au centre du domaine.

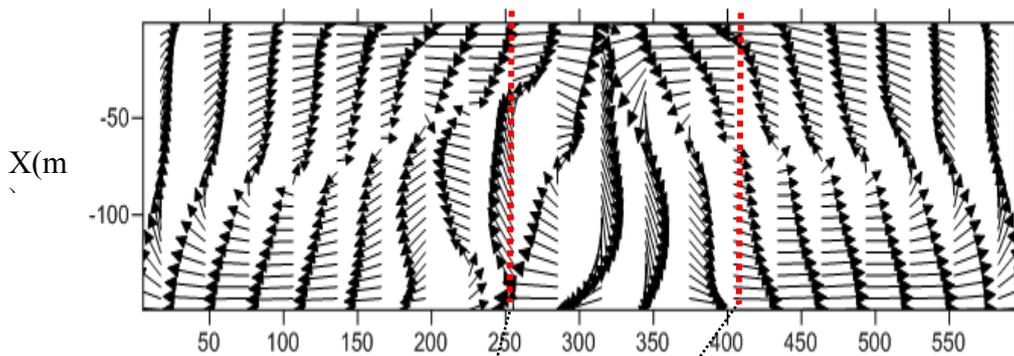


Figure 2 15:répartition du champ de vitesse pour le problème d'Elder .

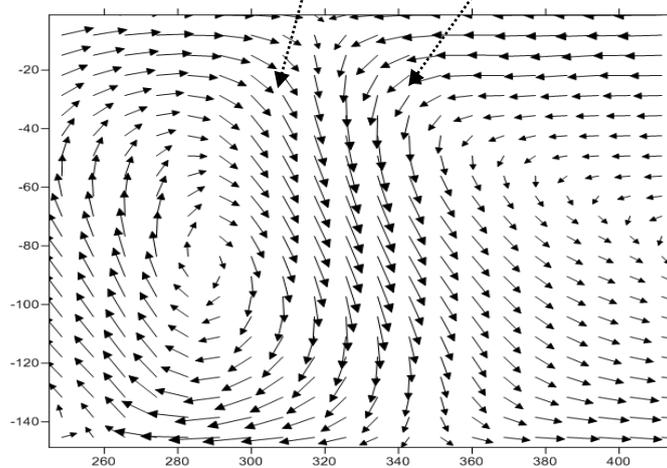


Figure 2 16:répartition du champ de vitesse pour le problème d'Elder. Zoom sur le champ central

Les résultats de champs de vitesse sont très acceptables, ils confirment la fiabilité physique du code. Comme déjà mentionné, le problème d'Elder non seulement il ne possède

pas de solution exacte, mais il se peut qu'il possède plus d'une seule solution, comme le suggèrent (Forlokovic, et al., 2001) . Afin de pouvoir juger ces résultats nous faisons recourt aux solutions de référence existantes telles que celles de (Elder, 1967), (Voss, et al., 1987) et dernièrement celle trouvé par l'équipe Wazy (2009) dans la documentation de FEFLOW où nous confirmons que nos résultats sont corrects. (voir Figure 2.17 et 2.18).

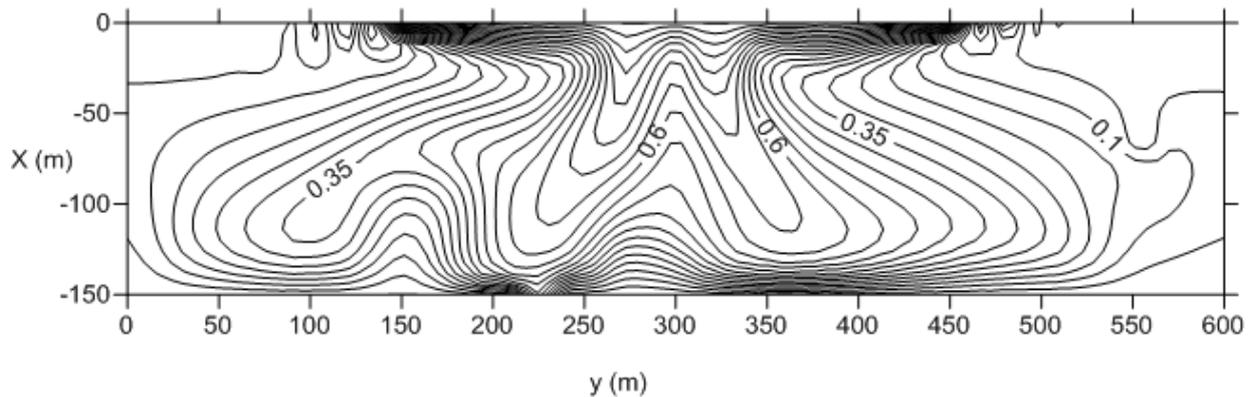


Figure 2 17:solution du problème d'Elder : répartition des iso-concentration. Simulation de 10 ans

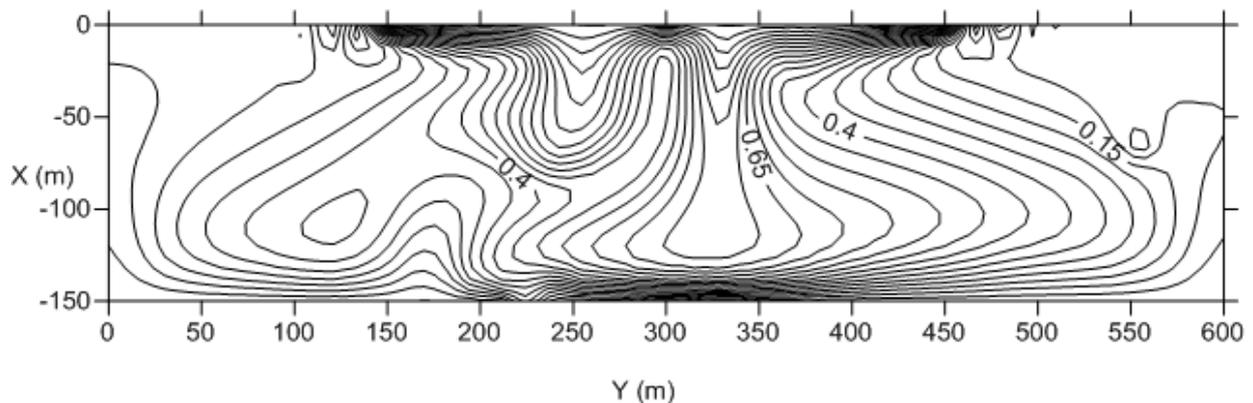


Figure 2 18:solution du problème d'Elder : répartition des iso-concentration. Simulation de 20 ans

#### 4.3. Améliorations numériques

Les améliorations apportées au code offrent plusieurs profits numériques. Les résultats obtenus sont de plusieurs types :

##### 4.3.1. Stabilité

Il faut noter tout d'abord que l'ancienne version de code a manqué de stabilité puisqu'elle ne tourne que sur un seul compilateur Fortran à savoir 'Fortran power station'. Au moment de la compilation, le code montre plusieurs 'warning' variables dus essentiellement à des erreurs dans l'allocation de mémoire.

Le passage au Linux et au fortran 90 sous plusieurs compilateurs nous a permis de garantir la stabilité du code en plus du fait qu'il tourne avec n'importe quel compilateur fortran et sous n'importe quel système d'exploitation. La version actuelle a été testée avec plusieurs compilateurs tels que : IFORT de INTEL, GFORT de GNU, gcc, g95 ... où elle a montré une grande performance et sans aucun problème.

#### 4.3.2. Temps de calcul : CPU

Le temps CPU est le temps pris par le processeur pour exécuter et terminer une application. Il diffère du temps réel puisque les systèmes d'exploitation classiques comme UNIX, LINUX ou Windows utilisent la notion de temps partagé et sont tous multitâches. Un paramètre très important pour l'évaluation des performances numériques d'un code ou une application est le temps CPU.

Le changement de la méthode de stockage ainsi que le solveur et le schéma numérique nous a permis de gagner jusqu'à 12 fois en temps de calcul. En effet, en compilant le code avec un ordinateur portable portant les caractéristiques suivantes :

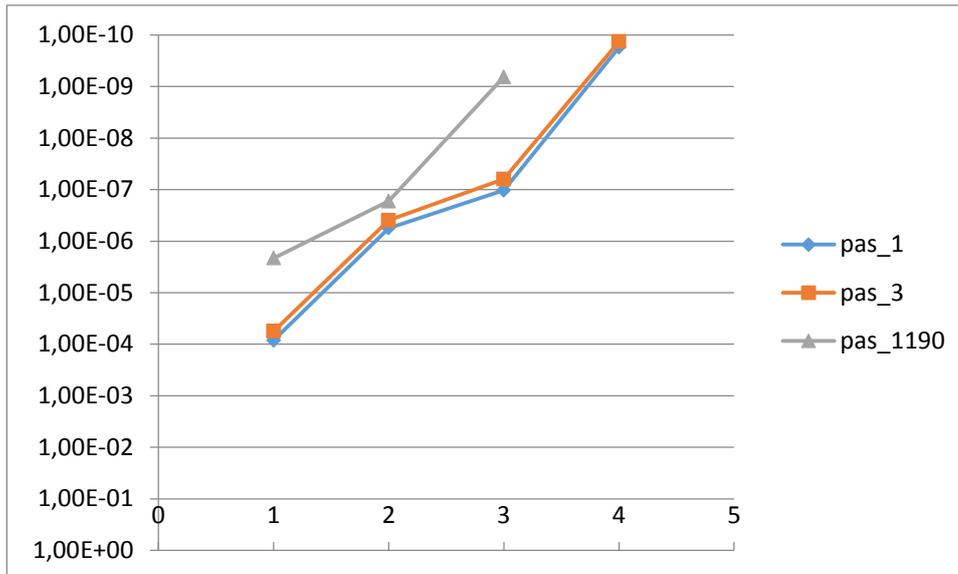
- Processeur : core I5 2.0 GHZ.
- RAM : 4 G

L'ancienne version du code, pour le problème de Rayleigh, prend presque 12 à 13 minutes pour converger et atteindre le régime permanent. Contrairement à la nouvelle version qui prend 1 minute 10 secondes de calcul.

Pour le problème d'ELDER, la simulation de 20 ans de problème prend seulement 1 minute 20 secondes comme temps de calcul pour la même configuration de la machine utilisée précédemment. L'ancienne version du code n'a pas été capable de résoudre ce problème.

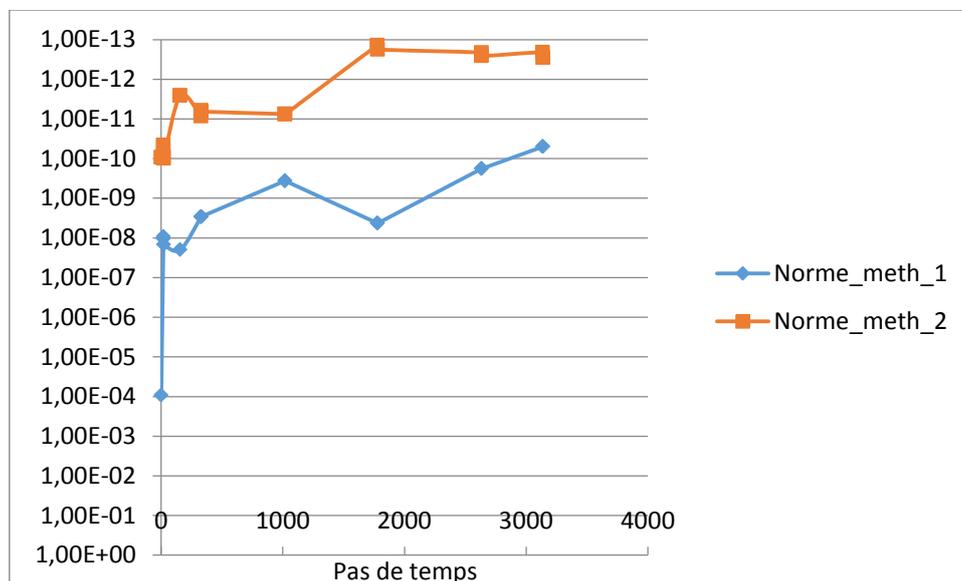
#### 4.3.3. Convergence

Comme il est déjà cité, l'algorithme du code se base sur un calcul itératif qui est une source de perte de temps. UMFPACK est un solveur direct qui garantit une convergence directe de solution c.-à-d. une norme inférieure  $10^{-12}$  dès la première itération (Figure 2.19). L'ancien schéma numérique fait une boucle d'itérations à chaque pas de temps jusqu'à satisfaire le critère de convergence (voir Figure 2.19).



**Figure 2 19:normes de convergence à chaque pas de temps pour l’ancien schéma numérique**

La Figure 2.19 montre l’évolution de la norme à chaque itération pour quelques pas de temps. Comme déjà cité, l’ancien schéma numérique, malgré qu’il utilise un solveur direct, il se base sur un calcul itératif. A chaque pas de temps, il est obligé d’effectuer un certain nombre d’itérations (5 à 6 itérations) pour atteindre le critère de convergence du pas de temps.

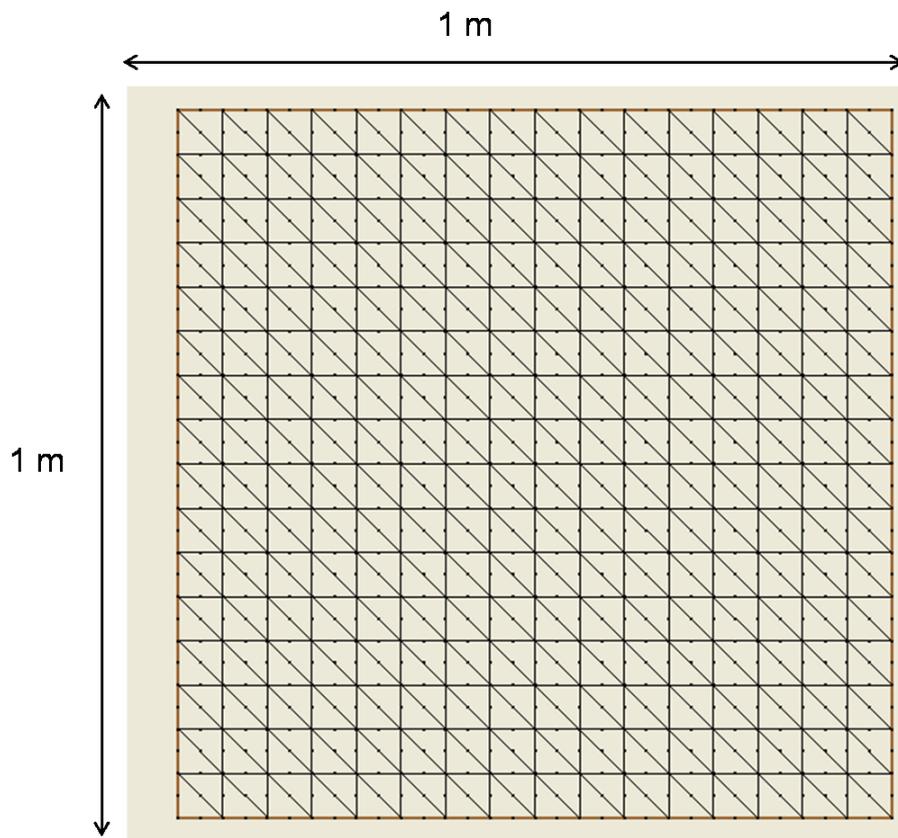


**Figure 2 20:normes de convergence pour l’ancien schéma numérique (Norme\_meth\_1) et le nouveau schéma numérique (norme\_meth\_2)**

La Figure 2.20 montre la fiabilité du nouveau solveur UMFPAK. En effet, il garantit une meilleure convergence avec des normes inférieures à  $10^{-10}$  dès les premiers pas de temps . En plus, il nous a permis d’éliminer le calcul itératif à chaque pas de temps.

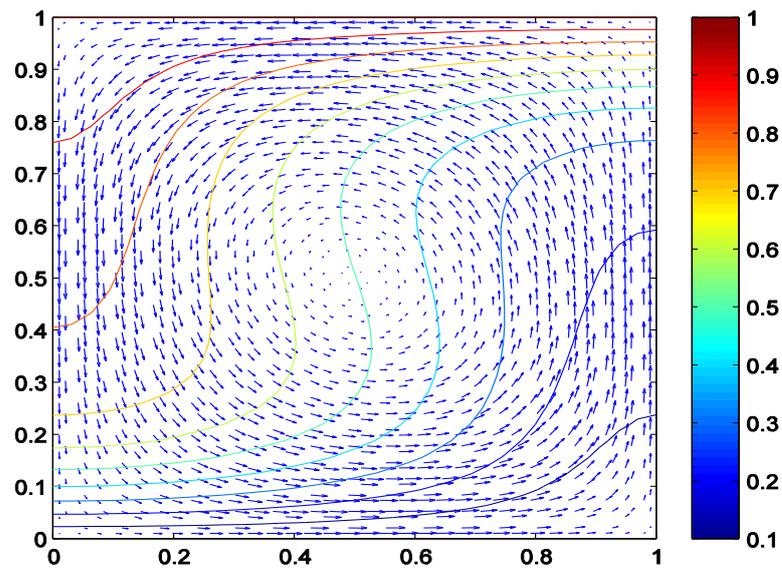
## 4.3.4. Dimensions :

L'ancienne version du code a été limitée du point de vue du nombre d'éléments et nombre des nœuds du domaine étudié. Cette limitation engendre dans certains cas le manque de précision. La nouvelle version du code, après les différentes améliorations déjà citées, permet d'augmenter la taille de maillage du domaine. Pour l'exemple de la cellule de Rayleigh, la taille de maillage utilisée est de 200 éléments c.-à-d. 441 nœuds. Un bon test de fiabilité du code est l'augmentation de la taille de maillage. Un nouveau maillage utilisé pour la cellule de Rayleigh est de 512 éléments c.-à-d. 1089 nœuds (voir, Figure 2.21). Avec ce maillage nous avons raffiné le maillage de 2,5 fois.



**Figure 2 21:maillage de la cellule de Rayleigh (512 éléments /1089 nœuds)**

Le code, en utilisant ce maillage très raffiné pour ce type de problème, a montré une bonne réponse que ce soit de point de vue du temps de calcul ( qui n'a presque pas changé) ou même de point de vue de la précision. Pour l'exemple traité, cellule de Rayleigh, il n'y a pas de problèmes de précision ou de convergence, donc le raffinement du maillage n'offre pas une amélioration pour le résultat physique (voir Figure 2.22). La nouvelle version nous offre la possibilité de travailler avec des maillages de plus en plus raffinés.



**Figure 2 22: Iso-concentrations et champ de vitesses pour le nombre de Rayleigh  $Ra=100$ , avec viscosité constante ( $\mu=\mu_0$ ) pour un maillage de 512 éléments.**

Les résultats obtenus pour les différents problèmes traités dans ce chapitre ont prouvé les performances physiques et numériques de la nouvelle version du code. Un autre avantage offert par le nouveau code est la possibilité de traiter des maillages de plus en plus fins. Le problème d'Elder a représenté un défi pour notre code. En effet, l'ancienne version n'a pas été capable de simuler ce problème avec un maillage de 1681 nœuds. Actuellement, GEODENS non seulement peut résoudre ce problème, en donnant de meilleurs résultats, mais aussi avec un temps de calcul minimal.

## 5. Conclusion

Les changements apportés sur le code sont multiples tels que le changement de la méthode de stockage des matrices, l'utilisation de la bibliothèque de résolution UMFPACK qui comporte un solveur adopté au nouveau format de stockage 'sparse'. Les changements ont aussi touché le schéma numérique où nous avons éliminé l'aspect itératif du schéma en gardant les mêmes normes de convergence.

Tous ces changements ont garanti une amélioration du code en différents points tel que la réduction de temps de calcul CPU, l'augmentation de la capacité de maillage, la stabilité ... tout en gardant la même fiabilité physique des résultats.



## Chapitre.III.

Modélisation des écoulements et des transports  
réactifs dans les milieux poreux : GEODENS (Version  
Multi espèces)

## 1. Introduction

La modélisation des écoulements et des transports réactifs nécessite une résolution numérique caractérisée par un fort couplage entre ces trois phénomènes. La communauté scientifique s'intéresse de plus en plus à des problèmes hydrogéologiques développés, tels que l'évolution des ressources en eau dans le contexte du changement climatique, la quantification des migrations à long terme des polluants dans les sols et les accidents de stockages nucléaires dans les nappes souterraines. Ces problèmes sont caractérisés par la variété des espèces et des réactions chimiques existantes, par de larges échelles temporelles qui peuvent aller à des millions d'années et par des échelles spatiales étendues. Ces exigences d'espace-temps constituent un défi majeur pour la modélisation, avec des temps de calcul très longs et des exigences de mémoire très importantes à prévoir (Bakker, et al., 2011). Afin de répondre à ces exigences, nous devons utiliser des techniques et du matériel numériques de pointe tel que le calcul parallèle. Selon Miller et al. (2013) l'efficacité des ordinateurs en série a approché ses limites, et une plus grande efficacité du matériel sera principalement basée sur le calcul parallèle (Miller, et al., 2013). Un certain nombre d'outils numériques pour la modélisation des transferts d'eau dans les sols sont déjà disponibles [ (Bakker, et al., 2011); (Borsi, et al., 2013) ]. Toutefois, ces outils ne permettent pas (ou n'ont pas été testés) d'utiliser des calculs parallèles. Des efforts ont été déployés pour construire et tester des solveurs parallèles [ (Ababou, et al., 1993) (Tracy, 2006); (Herbst, et al., 2008); (Wang, et al., 2009); (Tang, et al., 2010) ; (Yeh, et al., 2011) ; (Warsta, et al., 2013)] avec différentes techniques et stratégies de calcul.

Afin de résoudre des problèmes multiespèces d'une grande complexité, une approche est de plus en plus répandue c'est le couplage des modèles compartimentaux tout en échangeant des informations entre eux. En effet cette méthode est beaucoup plus utilisée actuellement que celle de couplage global : qui consiste à faire construire un modèle unique, qui englobe tous les processus, et qui requiert une grande expertise. Nous nous intéressons à la première approche dans laquelle chaque modèle garde sa configuration de processus. Dans cette catégorie deux formes de couplage sont distingués (Deliege, 2010) :

- le couplage externe : les codes couplés peuvent échanger de l'information, mais la communication est unidirectionnelle, donc les données de chaque code ne peuvent servir que comme données d'entrée pour les autres codes.
- Le couplage interne (intégré) : les codes couplés sont en interaction directe et ils

peuvent échanger à tout instant de calcul leurs informations dans les deux sens de communication.

Dans ce travail, nous nous intéressons au couplage intégré où il existe plusieurs technologies pour l'optimisation de l'échange de l'information (PVM, MPI, OpenMPI,...). Nous avons choisi la technologie MPI (Dupays, et al., 2014) avec laquelle nous avons adopté une stratégie de couplage de type 'MPI\_allgather' qui nous permet une communication globale et dans toutes les directions de couplage entre les codes existants.

## 2. Conceptualisation des phénomènes et Formulation mathématique

Vu l'existence des plusieurs espèces dans les eaux souterraines, pour des cas plus réels, l'étude des écoulements densitaires et du transport est toujours associée à une étude géochimique. En effet, le transport de certaines espèces, sels minéraux, peut être accompagné par des réactions de précipitations et/ou de dissolutions. D'où la nécessité d'une version multiespèce de GEODENS.

### 2.1. Densité et calcul Chimique

Le calcul de la chimie des problèmes se réalise à travers le code géochimique SELSAUM (Bouhlila, 1999). Ce code simule l'évolution dans le temps des systèmes SELSAUMures. À cet effet, le modèle permet de calculer, au cours du temps, les concentrations des ions en solution, la masse volumique de la saumure, et les quantités, précipitées ou dissoutes de sels éventuellement en contact avec la solution. Ces calculs passent évidemment par ceux des activités de l'eau et des espèces aqueuses présentes en solution. Ce code utilise le modèle de l'interaction ionique spécifique de Pitzer (Monnin, 1989) qui s'adapte le mieux au problème des saumures. De plus, ce modèle est relativement simple à mettre en œuvre. Les espèces aqueuses considérées à ce stade du travail sont au nombre de 6 :  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{++}$ ,  $\text{Mg}^{++}$ ,  $\text{Cl}^-$  et  $\text{SO}_4^{--}$ . Ces éléments représentent, de toute façon, les espèces majeures dans la classe de problèmes traités. Dans la conceptualisation du modèle de Pitzer, ces espèces sont non associées en solution. Il n'y a donc pas de réactions en phase aqueuse à considérer. Les seuls phénomènes à considérer seront la précipitation ou la dissolution de minéraux.

La densité du mélange  $\rho$  est l'élément de couplage entre les différents processus du code. Les problèmes étudiés sont généralement caractérisés par de fortes concentrations avec l'existence, parfois, des précipités des sels. Le calcul de la densité n'est plus une simple relation linéaire comme celle décrite par [ (Bouhlila, 1999) ; (Herbert, et al., 1988)]. La

stratégie de calcul a été développée et validée (tableau 3.1) par Bouhlila (1999) en se basant sur la méthode de (Monnin, 1989).

Tableau 3. 1: Calcul des densités

Saumure	Composition (molalité) en :						Densité en g/cm <sup>3</sup>		
	Na	K	Ca	Mg	Cl	So <sub>4</sub>	Mesuré	Calculé*	Calculé**
Eau de mer	0,48586	0,01058	0,1065	0,05519	0,56571	0,02926	1,023337	1,023313	1,024313
Mer rouge 1	10,4162	0,00567	0,01209	0,00340	0,45131	0,00079	1,015403	1,015408	1,015391
Mer rouge 2	5,43497	0,07415	0,15805	0,04489	5,89363	0,01042	1,094326	1,194129	1,193906
Mer morte 1	1,87239	0,20154	0,4652	1,91949	6,84334	--	1,223329	1,222999	1,223000
Mer morte 2	1,87239	0,20154	0,4652	1,82569	6,65575	--	1,218383	1,217987	1,217988

\* d'après Monnin (1989).

\*\*d'après Bouhlila (1999)

La densité, est calculée de la même manière que celle utilisée précédemment. En effet, le calcul se fait via le code SELSAUM.

## 2.2. La Perméabilité

La relation entre la porosité et la perméabilité est complexe dans les milieux naturels. La variation de la porosité n'est pas automatiquement dans le même sens ni proportionnelle aux volumes de minéraux précipités ou dissous. Nous ne pouvons pas étudier la répartition des espaces poreux qui nécessite des expérimentations, par contre nous nous intéressons à l'influence de la loi de la perméabilité sur l'évolution de la porosité. Nous adoptons dans notre code la loi établie par [ (Sanford, et al., 1985) ; (Sanford, et al., 1989) ; (Bouhlila, 1999)] utilisant une relation logarithmique pour  $k$  en m<sup>2</sup> et  $\Phi$  en valeur vraie :

$$\log(k) = a * \Phi - b \quad (4.1)$$

où  $a$  est une constante de l'ordre de 20 (Sanford, et al., 1989) . La constante  $b$  est déduite à partir des valeurs de  $k$  et de  $\Phi$  initiales, mesurées sur le terrain.

### 2.3. La Porosité

La variation de la porosité peut être caractérisée par une complexité majeure vu qu'une dissolution à la surface des grains accompagnés par des écoulements dans les milieux poreux, peut en engendrer une modification sur la forme ainsi que sur la réorganisation de l'agencement des grains pour diminuer la porosité du milieu par compaction. D'autre part, les petits cristaux nouvellement formés peuvent être piégés dans des zones peu accessibles à l'écoulement et n'affectent pas, de ce fait, ni la porosité utile ni la perméabilité du milieu. Dans ce travail, nous ne rentrons pas dans ces considérations naturalistes complexes qui ne peuvent être étayées que par des expérimentations. Nous pouvons par contre, en première approche, ignorer les aspects de forme et de position des minéraux précipités ou dissous et considérer que la porosité locale est affectée de façon univoque par le volume des sels précipités ou dissous localement. Cette démarche simpliste est fréquemment utilisée en modélisation hydrogéochimique couplée [ (Lichtner, 1992) ; (Gérard, 1996)]. La variation de la porosité est calculée comme suit :

$$d\Phi = \sum_{i=1}^{n_{sel}} dN_i * V_{mi} / V_e \quad (3.2)$$

Où  $n_{sel}$  est le nombre des sels précipités ou dissouts,  $dN_i$  est la différence de nombre de mol précipitée(-) ou dissoutes (+) du sel  $i$ ,  $V_{mi}$  est le volume molaire du sel  $i$  et  $V_e$  est le volume de l'élément de maillage.

### 2.4. Flux géochimique

L'existence des plusieurs espèces en mélange, influence l'équilibre de bilan de masse. Nous avons pris en considération ce déséquilibre et l'équation de transport multi espèce comme suit :

$$L(c_i) + Q c_i + \Phi S_w f_{gi} = \frac{\partial(\rho \Phi S_w c_i)}{\partial t} \quad (3.3)$$

Avec

$$L(C_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \rho \Phi S_w D_{ij} \frac{\partial C_i}{\partial x_j} - \rho \Phi S_w u_i C_i \right\} \quad (3.4)$$

$L$  est un opérateur qui englobe les processus de convection, de dispersion et de diffusion.  $Q$  [ $mt^{-1}l^{-3}$ ] est le flux massique d'eau par unité de volume de milieu poreux, qui

représente les apports extérieurs ou les sources.  $f_{gi}$  [ $\text{m}^{-1} \text{l}^{-3}$ ] est le flux de l'espèce  $i$  dû aux différentes réactions géochimiques qui concernent cette espèce par unité de volume de milieu poreux. Notons que cette écriture du bilan massique induit, en particulier, que les éventuelles réactions géochimiques sont uniformément réparties dans le volume élémentaire représentatif du milieu poreux.

Le calcul de ce flux géochimique  $f_{gi}$  passe par la caractérisation de la solution en chaque point du domaine d'étude et à chaque instant. C'est la somme des contributions de toutes les réactions pouvant avoir lieu localement (Bouhlila, 1999). Si  $N_r$  est le nombre de ces réactions et  $s_i$  est la concentration de l'espèce chimique  $i$  il vient :

$$f_{gi} = \sum_{r=1}^{N_r} \rho \left( \frac{ds_i}{dt} \right)_r \quad (3.5)$$

Ce flux géochimique contient l'ensemble des réactions qui peuvent être engendrées entre les espèces chimiques dans le système étudié.

Il faut noter qu'à cette étape la densité calculée est une densité globale qui prend en considération tous les solutés :  $\rho = \rho(c_1, c_2, \dots, C_i)$

Le calcul de ce terme est effectué avec les valeurs des concentrations au pas de temps précédant, donc selon une procédure explicite. Le flux géochimique de l'espèce  $i$  au nœud  $I$  est alors :

$$\phi F_{gi}^I = \rho \phi \frac{c_i^I(t) - c_i^I(t - \Delta t)}{\Delta t} \quad (3.6)$$

$C_i^I$  est les concentrations correspondantes à l'équilibre

### 3. Méthode adoptée et implémentation numérique

#### 3.1. Couplage entre les Processus (écoulement, transport, chimie)

Le couplage entre les différentes parties de code est décrit dans la figure suivante (figure 3.1). L'écoulement et le transport sont couplés via la densité. Pour chaque pas de temps, le calcul chimique se fait à travers le code chimie, à chaque itération jusqu'à convergence. Ce dernier calcul la densité en tenant compte de l'existence de soluté et/ou de sel solide. Une fois que le code géochimique détecte l'existence d'une précipitation et/ou dissolution d'un ou plusieurs sels, il réactualise les valeurs des concentrations adéquates et il

renvoie les quantités précipitées et/ou dissoutes aux codes GEODENS pour qu'il réactualise les valeurs des paramètres physiques (porosité, perméabilité...). La quantité de sel solide dans les pores varie continument à cause des réactions de dissolution et précipitation. À chaque pas de temps la quantité de sel dissous ou précipité est quantifiée, la porosité est actualisée et la perméabilité est calculée à chaque nœud du maillage.

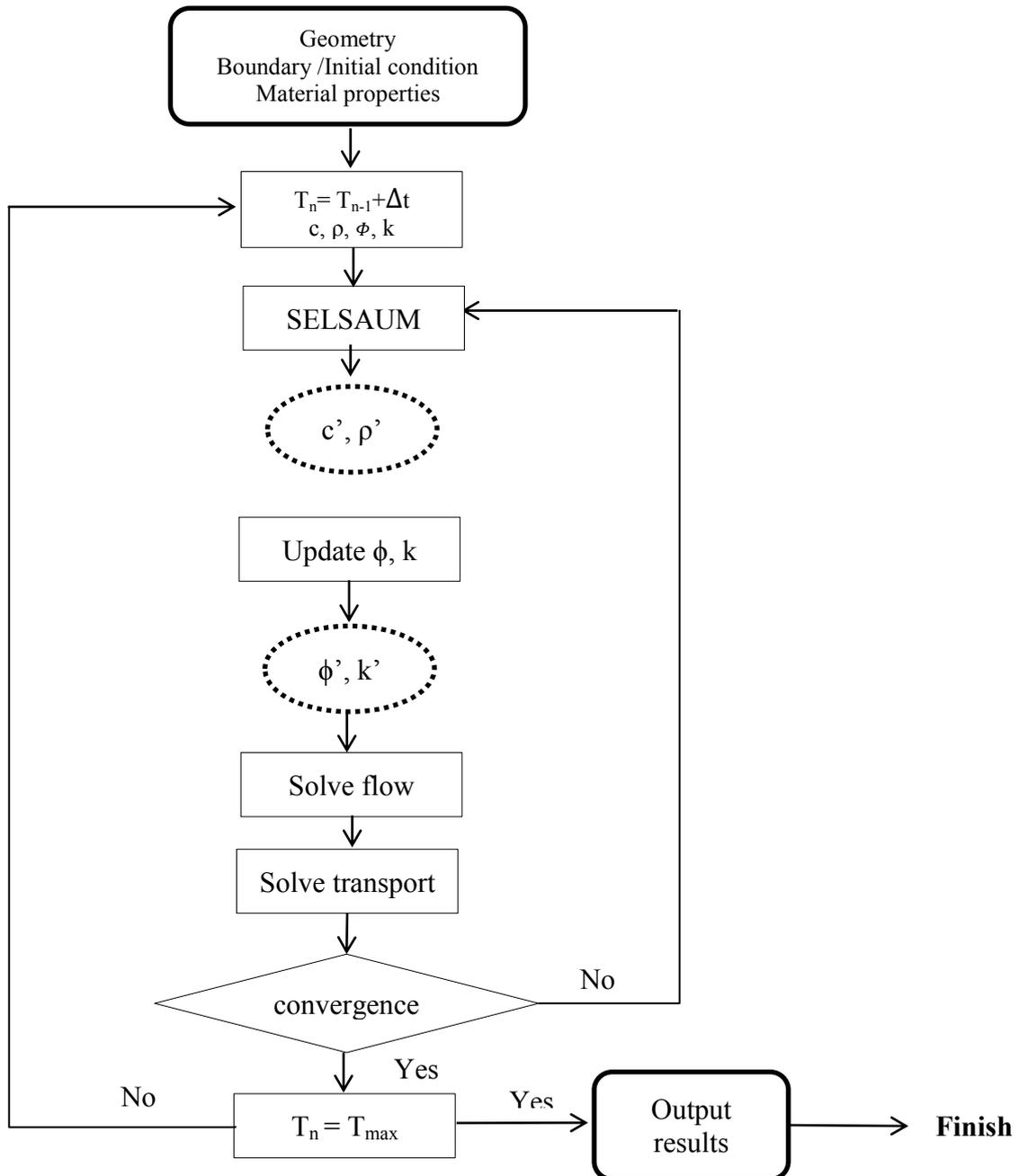


Figure 3. 1:schéma descriptif de la méthode du couplage adoptée

### 3.2. Version Multi espèce

Comme l'un des objectifs principaux de ce travail est le maintien de la flexibilité du code, l'idée était de garder le code GEODENS uni espèce et de l'appliquer à chaque espèce du problème. En effet, à la place d'étendre le code GEODENS pour qu'il traite n espèces en

même temps, nous avons exécuté n fois le même code, mais chacun pour une espèce différente. Les codes exécutés simultanément communiquent à chaque itération pour qu'ils échangent toutes les informations nécessaires. Plus précisément, à chaque itération du calcul les codes envoient et récupèrent les valeurs des champs des concentrations des autres codes. Une fois l'échange effectué, chaque code fait appel au code géochimique. Ce dernier calcule la densité en tenant compte de l'existence de toutes les espèces. Une fois que le code géochimique détecte l'existence d'une précipitation et/ou dissolution d'un ou plusieurs sels, il réactualise les valeurs des concentrations adéquates et il renvoie les quantités précipitées et/ou dissoutes aux codes GEODENS pour qu'ils réactualisent les valeurs des paramètres physiques (porosité, perméabilité...).

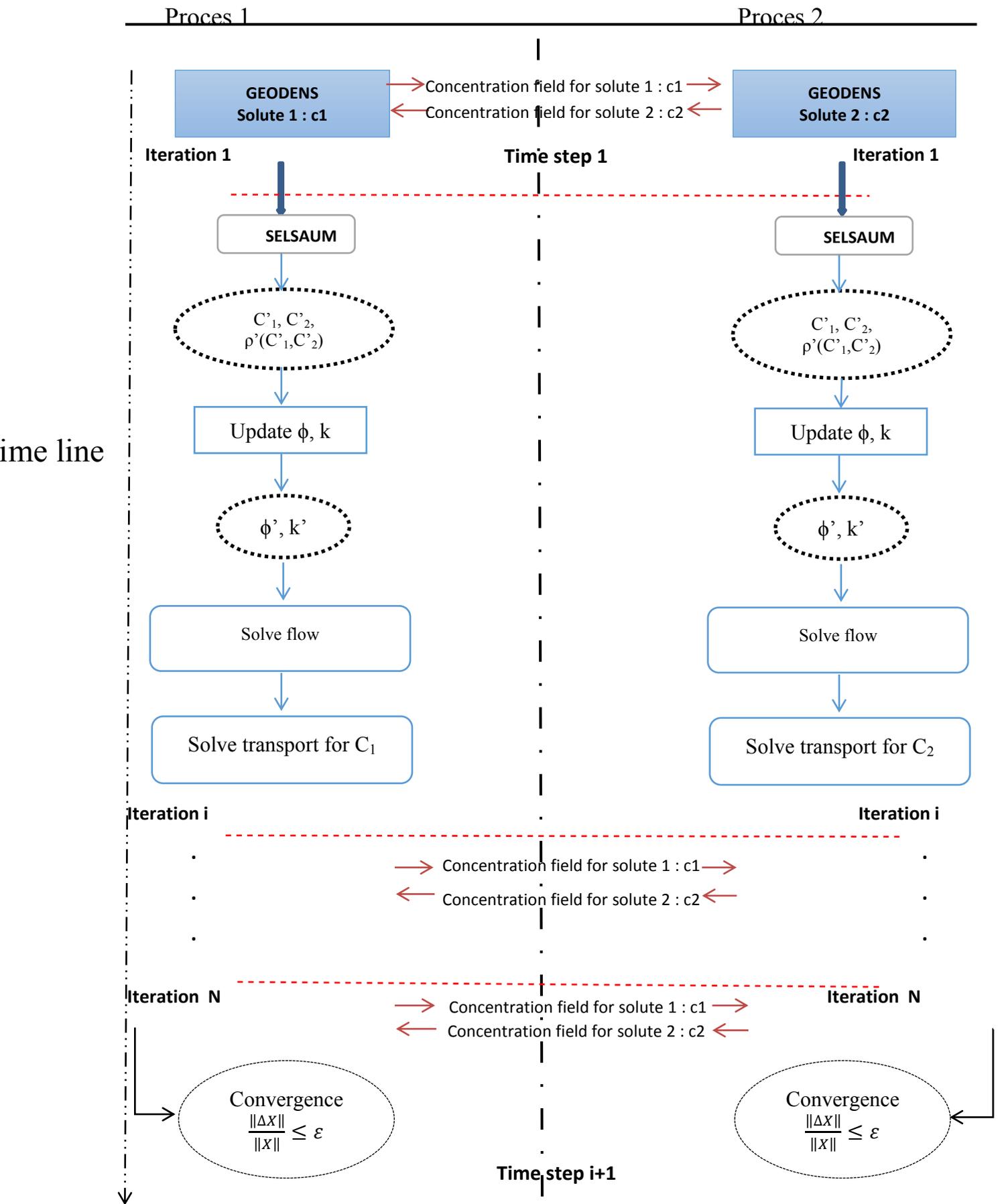


Figure 3. 2: Diagramme descriptif de l'approche de couplage adoptée pour un pas de temps

Le diagramme de la Figure 3.2 illustre la méthode de couplage utilisée. En effet, comme décrit précédemment, chaque code ne traite que son propre soluté, mais au cours des itérations il échange avec les autres les champs des concentrations des autres solutés.

Dans GEODENS le couplage entre l'écoulement et le transport se fait principalement via la densité. Avec cette méthode de couplage, le code géochimique (SELSAUM) calcule à chaque itération la même valeur de densité pour tous les codes. Ce qui diffère entre les codes c'est le calcul de l'équation de transport, évidemment chaque code a ses propres valeurs de concentration, mais le calcul de tous les paramètres physiques prend en considération l'existence des autres solutés. En effet, d'une part dans les équations de l'écoulement et du transport, les termes de densité et de viscosité sont liés aux concentrations locales des différentes espèces chimiques présentes en solution, les ions. D'autre part, le jeu des concentrations locales en ions peut induire une précipitation de sels si les produits de solubilité se trouvent dépassés ou une dissolution, si des sels existants dans la matrice solide sans que la saumure n'en soit saturée. Dans l'une et l'autre de ces deux éventualités, les caractéristiques hydrodynamiques du milieu, sa porosité et sa perméabilité, se trouvent modifiées. Le choix de cette architecture pour le couplage nous garantit que le calcul de l'écoulement est identique pour toutes les espèces et la mise à jour des déplacements se fait via l'actualisation de la densité, la porosité et la perméabilité.

### 3.3. Outils numériques

Le passage à une version multi espèce du code GEODENS, nécessite l'utilisation des couplages entre les codes. Le travail effectué consiste au passage à une version parallèle du code.

#### ◆ Architectures parallèles

Selon la configuration souhaitée, plusieurs architectures de parallélisation existent. Ces architectures peuvent être classées en quatre groupes .

- SISD (*Single Instruction, Single Data*) : exécution d'une seule instruction à chaque cycle d'horloge. C'est le cas des stations de travail traditionnelles.
- SIMD (*Single Instruction, Multiple Data*) : exécution de la même instruction, à chaque cycle d'horloge, pour tous les processeurs, mais elle est appliquée à des données différentes.

- MISD (*Multiple Instruction, Single Data*) : exécution de plusieurs instructions appliquées à la même donnée sur les différents processeurs à chaque cycle d'horloge.
- MIMD (*Multiple Instruction, Multiple Data*): exécution de plusieurs instructions appliquées à des données différentes à chaque cycle d'horloge.

L'architecture la mieux adaptée à notre méthodologie est plutôt la SIMD , puisqu'il s'agit du même code qui s'exécute pour différentes données.

◆ Modèles de programmation

En plus des différentes architectures, il existe aussi différents modèles de programmation parallèle, par exemple :

- le modèle de programmation par threads : exécution simultanée des instructions d'un même code partageant un même espace mémoire.
- le modèle de programmation par messages : Le programme peut être considéré comme un ensemble de processus ayant chacun une mémoire locale et communiquant avec les autres processus par envoi et réception de messages.
- Le modèle de programmation sur des données en parallèle : consiste à découper les données et les distribuer sur les différents processeurs qui appliquent les mêmes instructions.

Nous considérons que l'architecture que nous avons adopté se base sur le lancement de plusieurs exécutables de GEODENS dont leurs données peuvent être en liaisons (ions en commun) ou indépendants. Par exemple, nous pouvons avoir un mélange de  $\text{Na}^+$  ,  $\text{K}^+$   $\text{SO}_4^{--}$  avec de faibles concentrations ( inférieures aux seuils de précipitation ) , nous n'aurons jamais donc des interactions en terme de chimie. Chaque exécutable évoluera dans le temps indépendamment des autres sauf que chacun a besoin de voir la variation de la densité globale du mélange.

MPI et OpenMP permettent tous les deux de paralléliser un code, ce sont deux bibliothèques permettant de coordonner des processus en utilisant le paradigme de l'échange de messages. OpenMP le fait cependant à un niveau plus fin, souvent à l'occasion de boucles que le programmeur choisit de paralléliser. MPI en revanche

place la parallélisation au niveau le plus élevé, et c'est au programmeur de gérer explicitement par messages quelles variables sont échangées.

Un des objectifs de notre amélioration, est de faciliter la gérance de deux codes et de permettre le remplacement de l'un ou l'autre d'une manière assez simple. Il est donc plus facile de les considérer comme des boîtes noires et de les coupler entre elles au plus haut niveau.

Il est donc naturel de choisir MPI comme protocole de parallélisation, ce qui permet de gérer N solutés différents en lançant N versions parallèles de GEODENS (SELSAUM est lancé en interne par chaque processus GEODENS) et de faire communiquer ces codes entre eux.

La parallélisation ne vise pas tellement à accroître les performances de l'ensemble, mais plutôt à étendre la fonctionnalité du code GEODENS.

◆ Le MPI (*Message Passing Interface*)

Le MPI est une bibliothèque permettant de coordonner des processus en utilisant le paradigme de l'échange de messages. Pour un programme écrit dans un langage classique (Fortran, C, C++, etc.), toutes les variables du programme sont privées et résident dans la mémoire locale allouée à chaque processus. Le principe est d'échanger une ou plusieurs données entre deux ou plusieurs processus via un appel dans le programme.

Selon le type de communication entre les processus, il existe deux grandes familles de communication :

- Communication point à point : a lieu entre deux processus, l'un appelé processus émetteur et l'autre processus récepteur
- Communication collective : permet de faire en une seule opération une série de communications point à point.

Nous nous intéressons plutôt à une communication collective qui, selon la méthode d'échange des messages, a plusieurs fonctionnalités existantes. Nous avons choisi d'utiliser la MPI\_ALLGATHER, qui permet de faire, dans un même espace de communication, des communications de tous les processus vers tous les processus (figure 3.3)

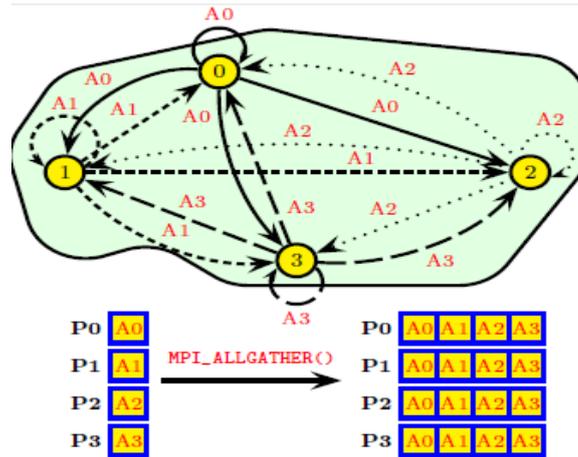


Figure 3. 3:Collecte générale : MPI\_ALLGATHER

En effet, nous remarquons que dans l'espace de communication vert, les processus numérotés de 0 à 3 s'échangent les messages A0, A1, A2, A3 d'une manière qu'à chaque fois, chaque processus dispose de l'information complète qui est formée des quatre messages ensemble. Pour notre cas, les processus seront les exécutions du code GEODENS et les messages seront les champs des concentrations de chaque exécution de code.

◆ Couplage GEODENS-Chimie

Le couplage entre l'écoulement-transport et la chimie est réalisé à l'intérieur du code GEODENS. En effet, à chaque itération, pour chaque élément de maillage et après chaque échange des champs de concentrations, chaque processus GEODENS fait appel au code SELSAUM qui est vu comme une subroutine externe. Donc un simple appel avec les paramètres nécessaires est suffisant. Les paramètres en échange entre GEODENS et SELSAUM sont :

- les concentrations des différents solutés.
- Descriptif chimique de l'élément de maillage en cours de traitement (s'il existe des quantités des sels déjà précipités).
- Le nombre de moles des sels qui viennent d'être précipités ou dissous.
- Les masses molaires des sels qui viennent d'être précipités ou dissous.

#### 4. Validation de code

Le code GEODENS a été largement testé et validé, pour chacun de ces processus (diffusion, transport, loi de porosité...). Nous allons présenter quelques tests effectués.

##### 4.1. Processus de diffusion

Nous adoptons le problème évoqué par (Bouhlila, 1999), le problème initial était un test thermique. Nous admettons le même problème pour la concentration. En effet, c'est un problème 1D de dimension  $2*L$ . Initialement le domaine est à une concentration égale à zéro. Nous appliquons une concentration constante  $C_0$  sur les deux bords  $x=\pm L$ . La solution analytique de ce problème est donnée par

$$\frac{c}{C_0} = 1 - \frac{4}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{2n+1} e^{-\frac{(2n+1)^2 \pi^2 T}{4}} \cos\left(\frac{(2n+1)\pi \xi}{2}\right) \quad (3.7)$$

Avec  $T$  et  $\xi$  sont des paramètres adimensionnels.

$$T = \frac{Dt}{L^2} ; \xi = \frac{x}{L} \quad (3.8)$$

$D$  est le coefficient de diffusion et  $t$  est le temps.

Pour chaque Valeur de  $T$  et  $\xi$  correspond une solution  $c$ . Le problème représente une symétrie par rapport à la ligne  $x=0$ . Nous avons mené donc ce premier test en utilisant un domaine de  $1m \times 1m$  ( $L=1$ ). La solution du problème est identique pour chaque valeur de 'y', notre problème est donc similaire au cas test de 1D de longueur  $1m$ . pour un  $T$  fixé égale à  $0.1 (D=10^{-7})$  nous avons obtenu les résultats suivants ( figure 3.4) :

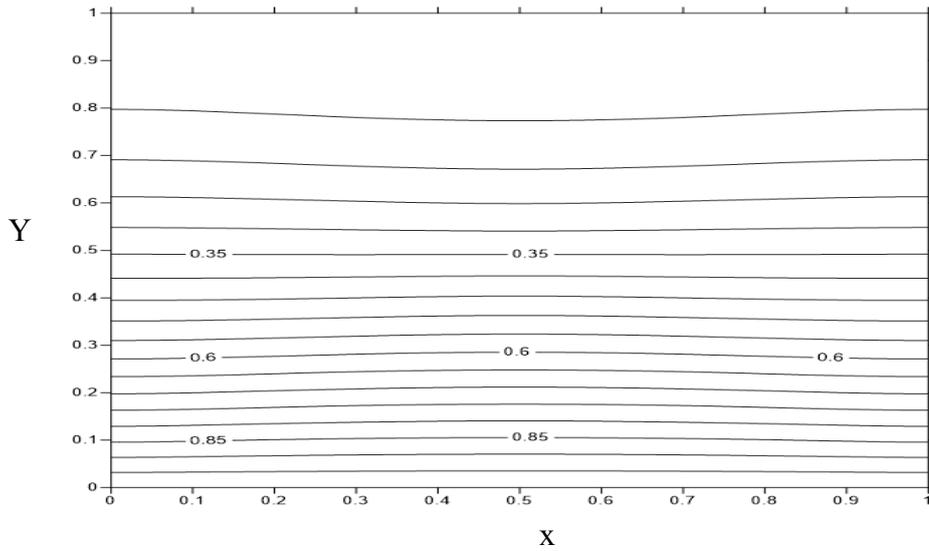


Figure 3. 4:champs de concentration pour T= 0.1

Une comparaison entre le modèle analytique et celui numérique montre que ce dernier reproduit correctement le premier. L'erreur entre les deux résultats est minimale et elle tend vers 0. (Voir figure 3.5 , figure 3.6).

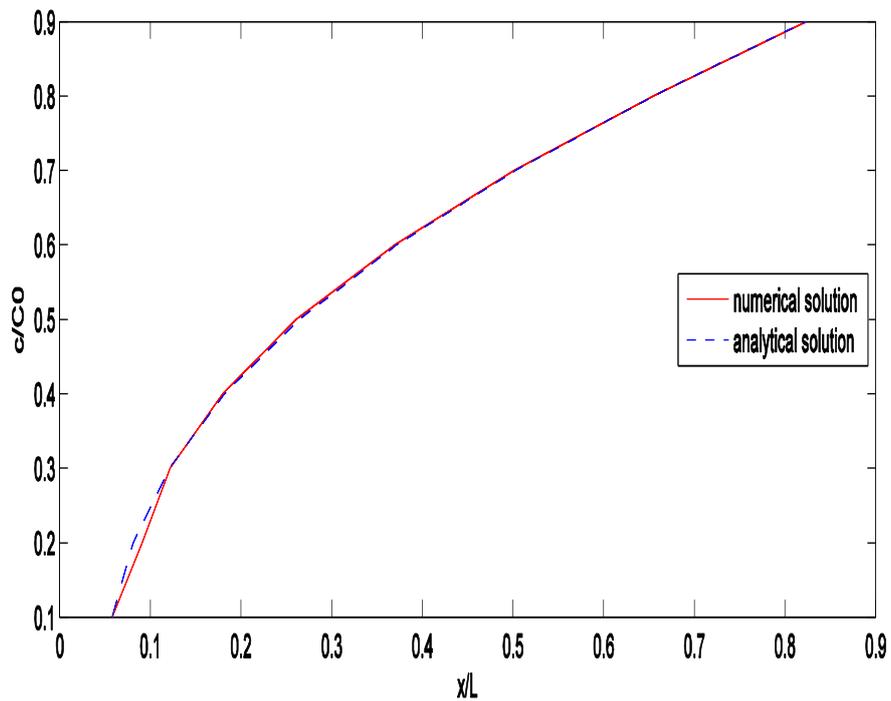


Figure 3. 5:comparaison de la solution numérique et analytique pour T= 0.1

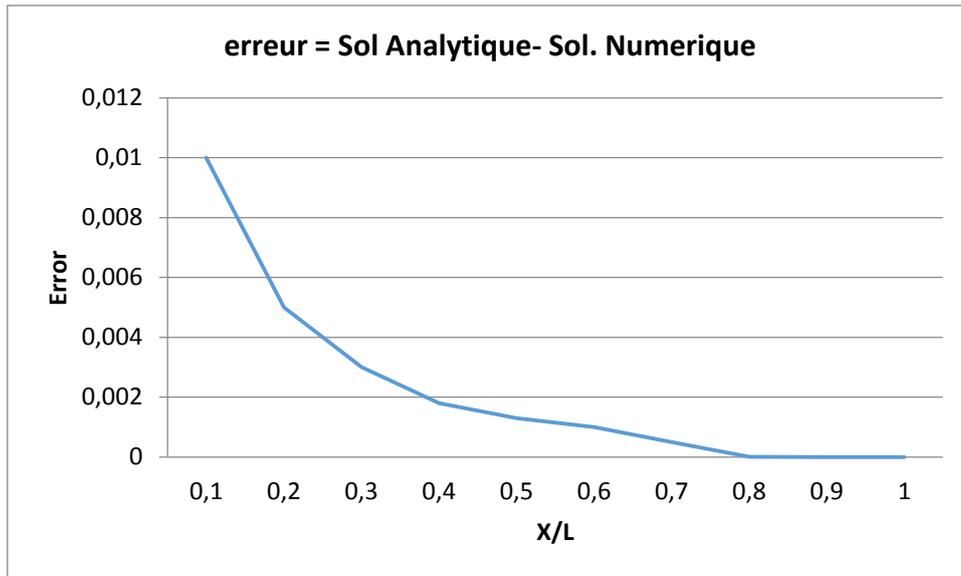


Figure 3. 6: Erreur = différence entre les solutions numérique et analytique pour T= 0.1

4.2. Processus de transport :

Ce test correspond au transport unidirectionnel d’un contaminant à l’état de trace dans un milieu semi-infini et avec une vitesse d’écoulement constante u. L’équation de transport est donc de la forme suivante :

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t} \tag{3.9}$$

Avec D est le coefficient de diffusion-dispersion longitudinal suivant x donné par  $D = \alpha u + d_0$ , avec  $\alpha$  est la dispersion et  $d_0$  est la diffusion moléculaire (Bouhlila, 1999).

Les conditions aux limites de ce problème sont :

$$\begin{aligned} C(x,0) &= 0 \\ C(0,t) &= C_0 ; t \geq 0 \\ \frac{\partial C}{\partial x}(\infty, t) &= 0 \end{aligned} \tag{3.10}$$

La solution analytique de ce problème est donnée par :

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erfc}\left(\frac{x - ut}{2\sqrt{Dt}}\right) + \exp\left(\frac{ux}{D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x + ut}{2\sqrt{Dt}}\right) \right] \tag{3.11}$$

erfc est la fonction erreur complémentaire.

Numériquement, nous avons adopté le problème test réalisé par (Bouhlila, 1999) , (Jaiswal, et

al., 2011). Le test consiste à une colonne de sol de 400m de longueur de perméabilité  $10^{-11}m^2$  et une porosité de 0.25. Nous affectons une vitesse constante d'écoulement de  $4.10^{-4}m/s$  et nous y suivent la propagation de la concentration introduite dès  $t=0$  à l'extrémité  $x=0$ .

La résolution numérique est menée pour différent nombre de Pecklet  $\frac{u \Delta x}{D}$  de 1 et 0.5. Les figures (3.7) montrent les profils de concentration pour la solution numérique et analytique correspondante au temps  $t_1= 25$  jours et  $t_2= 50$  jours. Le modèle numérique reproduit correctement le modèle analytique .

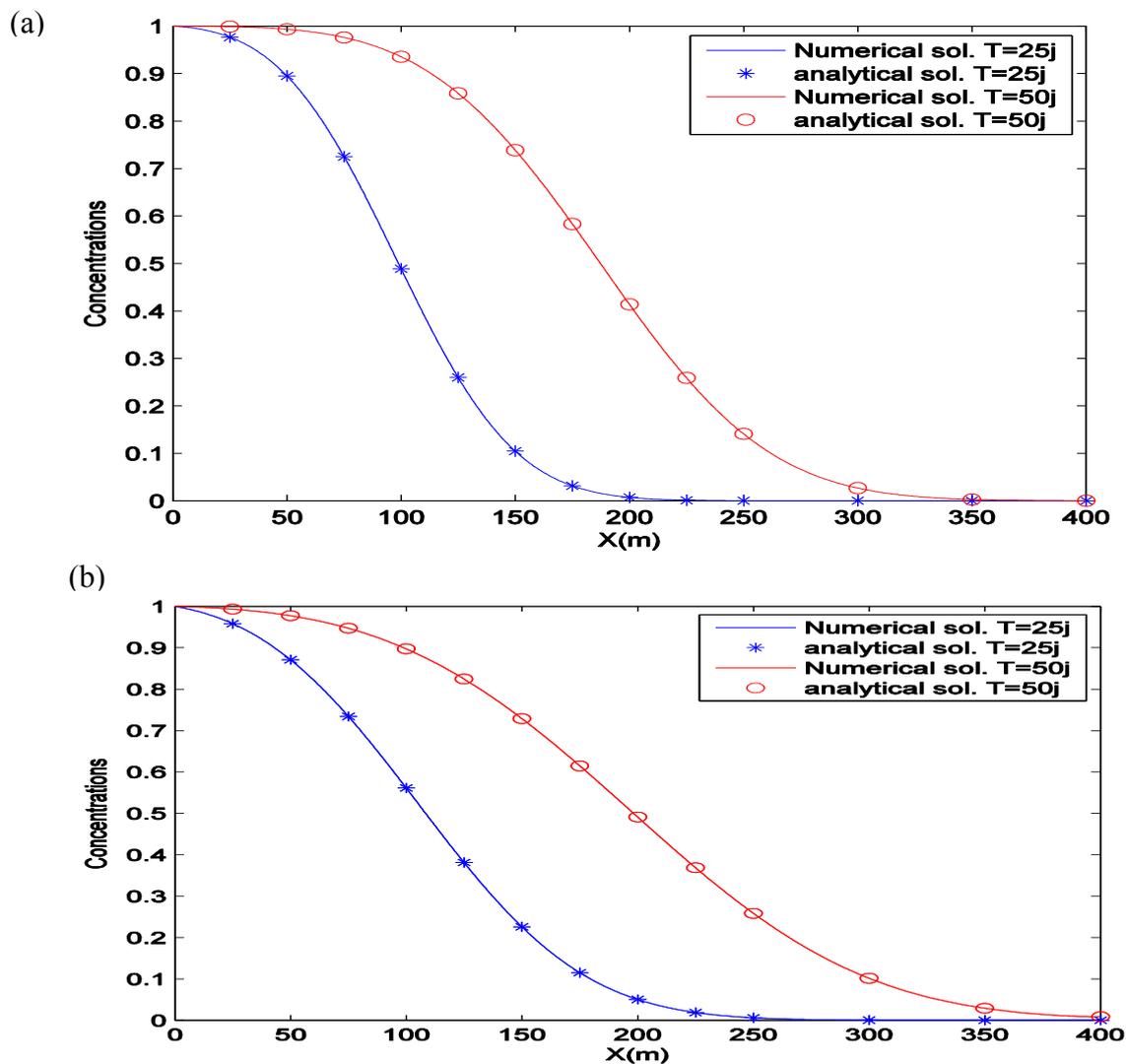


Figure 3. 7: Comparaison de la solution numérique avec la solution analytique à  $T= 25$  jours et  $T=50$  jours pour  $Pe=1$  (a),  $Pe=0.5$  (b)

4.3. Variation de la porosité

Ce test consiste à un domaine fermé imperméable sans aucun écoulement ni aucune concentration imposée sur les bords. Sur une tranche de ce domaine, nous remplissons à 90 % les pores par des précipités solides de NaCl (figure 3.8). L'objectif est d'étudier la variation de la porosité et bien sûr la répartition des concentrations au cours du temps.

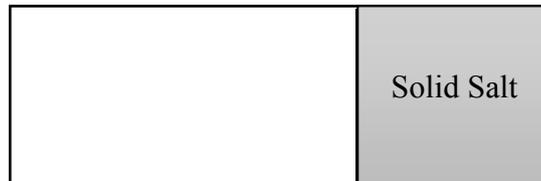


Figure 3. 8:problème test pour la validation de processus de variation de la porosité:

La solution (figures 3.9, 3.10) montre que seules les cellules de l'interface de contact entre les deux domaines voient leur porosité changer. Une comparaison des bilans de masse de soluté (dissoute et diffusée) montre que le bilan de masse est toujours vérifié au cours du temps de simulation. En effet, la quantité de concentration perdue (dissoute) de sel solide est presque égale à celle dissoute dans le reste du domaine (figure 3.11), une différence de l'ordre de  $10^{-7}$  existe entre les deux quantités. Cette erreur, de l'ordre de 0.1 %, est due aux approximations que nous avons utilisées lors du calcul de ce bilan. La loi de variation de porosité que nous avons adoptée est jugée comme fiable.

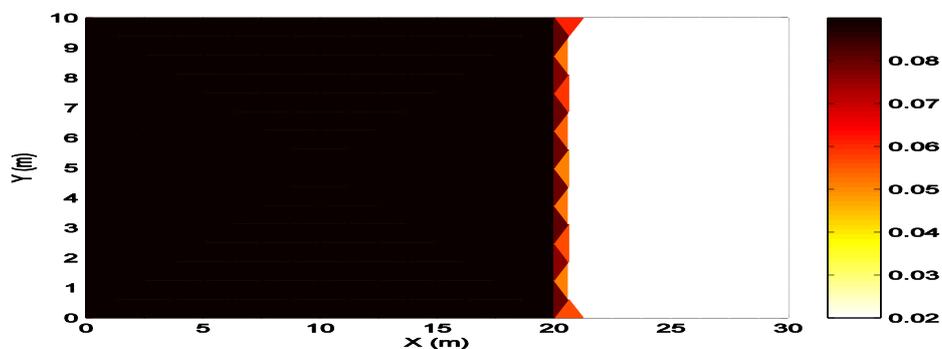


Figure 3. 9:champs de porosité pour une simulation de 160 ans

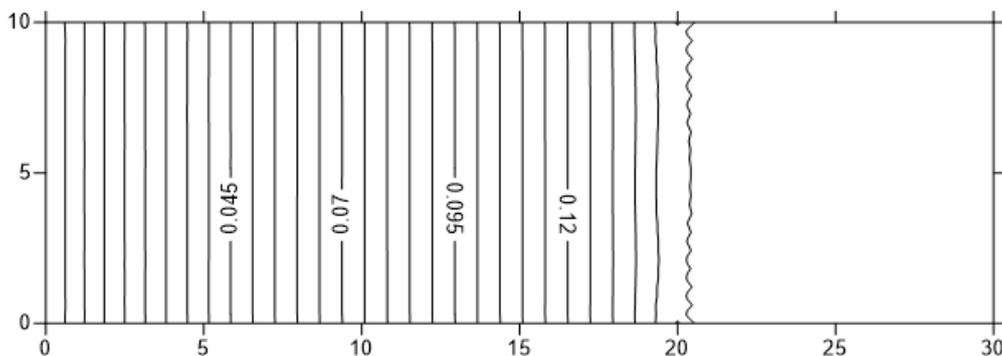


Figure 3. 10:champs de concentration

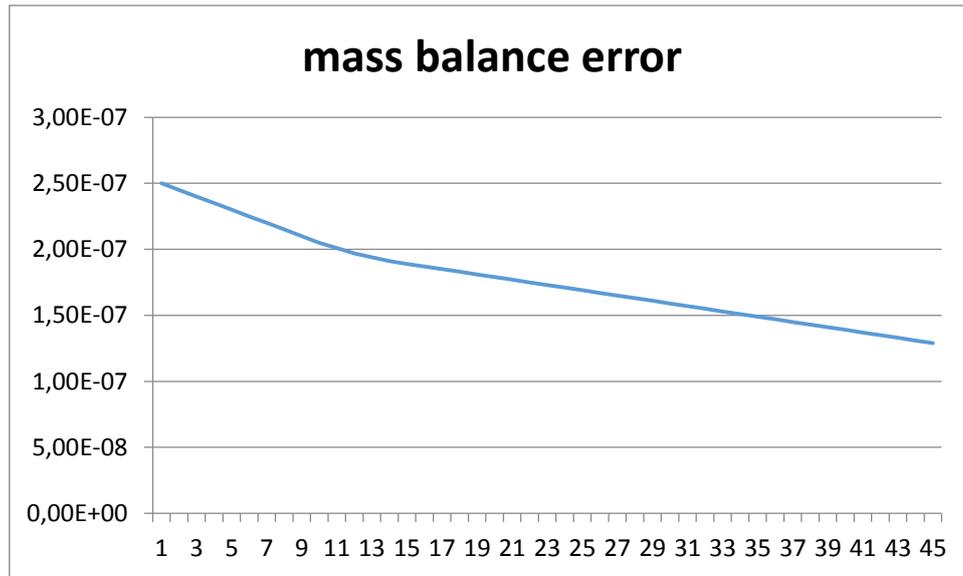


Figure 3. 11:erreur du bilan de masse en fonction de temps de simulation (pas des temps)

#### 4.4. Validation du couplage

##### 4.4.1. Aspect qualitatif

Le module chimique a été largement testé et validé (Bouhlila, 1999) en se basant sur des solutions analytiques [ (Gueddari, 1984); (Pueyo, 1971)]. Il n'y a donc pas lieu de s'attarder outre mesure sur la vérification du modèle chimique. Néanmoins, et afin de tester la démarche de modélisation couplée adoptée et de tester les pouvoirs et les performances numériques du code, nous allons tester son comportement avec une application physique/ chimique. Le problème étudié est un problème imaginaire, mais qui peut exister réellement et qui peut jouer un rôle très important dans les nappes et les aquifères réels.

Le problème est un domaine rectangulaire, caractérisé par un flux nul sur tous les côtés. Une concentration  $C_1$ , pour le premier soluté, est fixée sur le bord gauche. Une autre concentration  $C_2$ , pour le deuxième soluté, est fixée sur le bord droit (figure 3.12). Les différents paramètres physiques sont définis dans le tableau 3.2. Il faut noter que cette application a un aspect qualitatif et non quantitatif. Ce qui revient à dire que nous nous intéressons à la validation du couplage entre les différents processus.

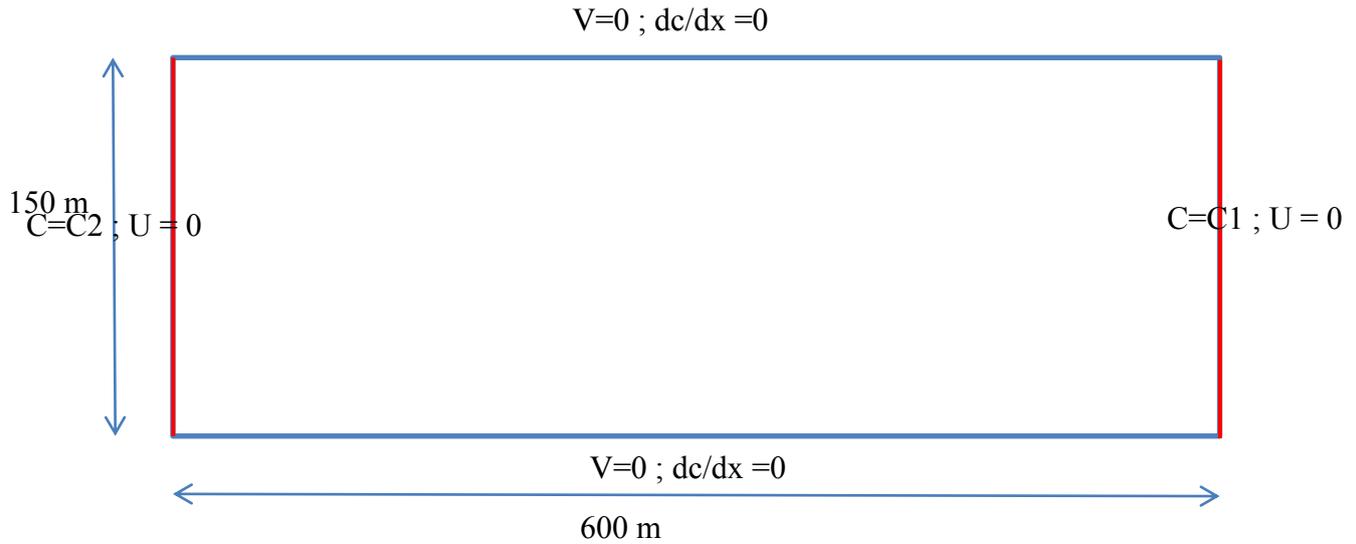


Figure 3. 12:domaine physique et conditions aux limites

Tableau 3. 2:paramètres physiques

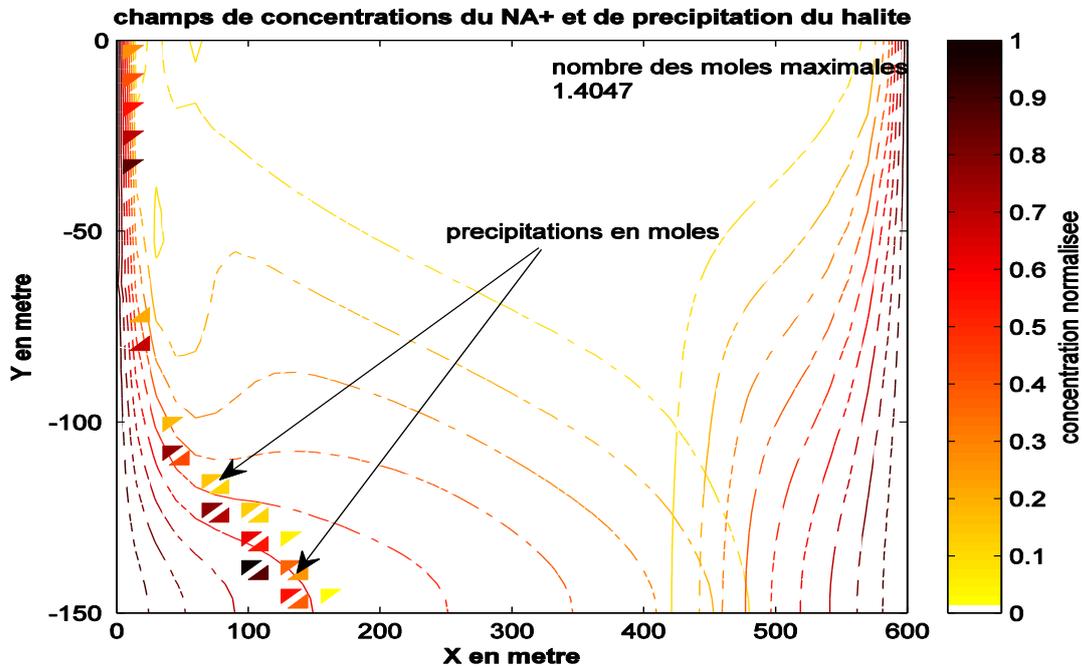
Symbole	Quantité	Valeur	unité
<b>g</b>	Accélération de pesanteur	9,81	$\text{ms}^{-2}$
<b>k</b>	Perméabilité	$4,845 \cdot 10^{-13}$	$\text{m}^2$
<b><math>\Phi</math></b>	porosité	0,1	-
<b>d</b>	Diffusion moléculaire	$3,565 \cdot 10^{-6}$	
<b><math>\alpha_l / \alpha_t</math></b>	Dispersion longitudinale et transversale	0,00/0,00	M
<b><math>\rho_0</math></b>	Densité de l'eau pure	$10^3$	$\text{Kg m}^{-3}$

Nous avons effectué plusieurs simulations en variant les concentrations des solutés en premier lieu, les solutés en deuxième lieu. En effet, nous avons la possibilité de choisir entre six solutés différents ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ), ce sont les espèces traitées dans SELSAUM. Les simulations ont été réalisées en utilisant un maillage de 1681 nœuds.

**Résultats :**

Plusieurs configurations ont été adoptées. Les applications réalisées gardent les mêmes paramètres physiques. La différence est au niveau de la configuration chimique. En effet, pour le premier cas nous avons adopté : (les concentrations sont en fraction massique).

- Cas test 1 :
  - Sur le bord gauche : 30% de  $\text{Na}^+$ , 20% de  $\text{K}^+$
  - Sur le bord droit : 3% de  $\text{Mg}^{++}$



**Figure 3. 13:champs de concentration du  $\text{Na}^+$ et  $\text{Mg}^{++}$  et de précipitation de Halite**

Pour cette première configuration, nous remarquons que les concentrations avancent de deux côtés. Les iso concentrations du soluté de plus forte concentration ( $\text{Na}^+$ ) avance plus dans le domaine. Cette configuration est en concordance avec la logique des écoulements densitaires. La configuration adoptée favorise la précipitation de l'halite ( $\text{NaCl}$ ) en premier lieu. En deuxième étape, nous remarquons la formation de sylvite ( $\text{KCl}$ ).

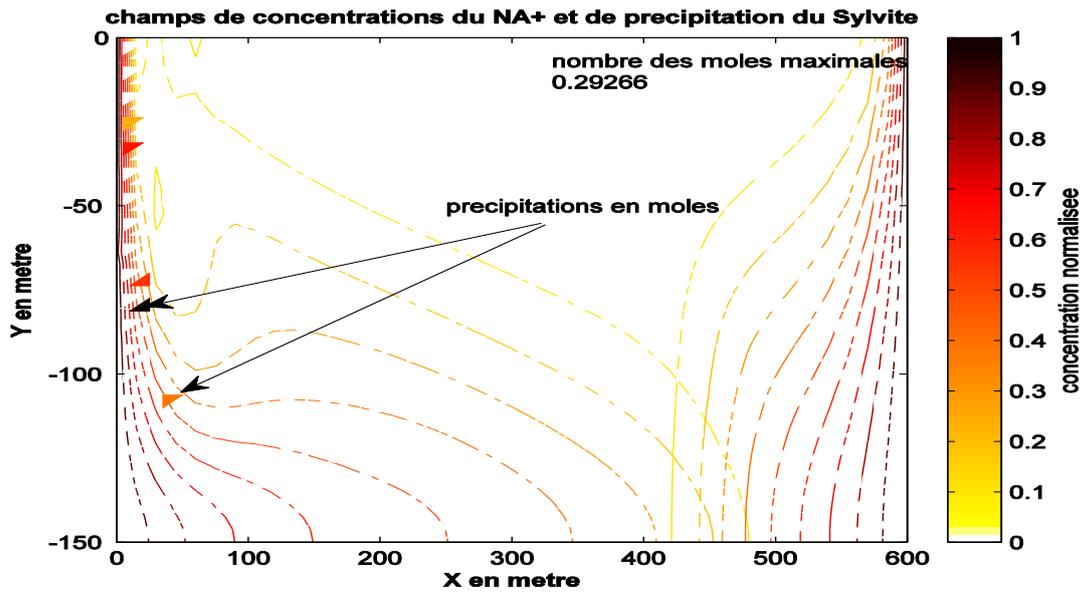


Figure 3. 14:champs de concentration du Na+ et Mg++ et de précipitation du Sylvite

- Cas test 2 :

Une deuxième configuration est simulée :

Sur le bord gauche : 30% de Na<sup>+</sup>, 30% de K<sup>+</sup>

Sur le bord droit : 30% de Mg<sup>++</sup>, 30% SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>

Cette configuration favorise la formation du Gypse (Figure 3 .15) du côté droit vu l'existence des fortes concentrations de Mg<sup>++</sup> et de SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>.

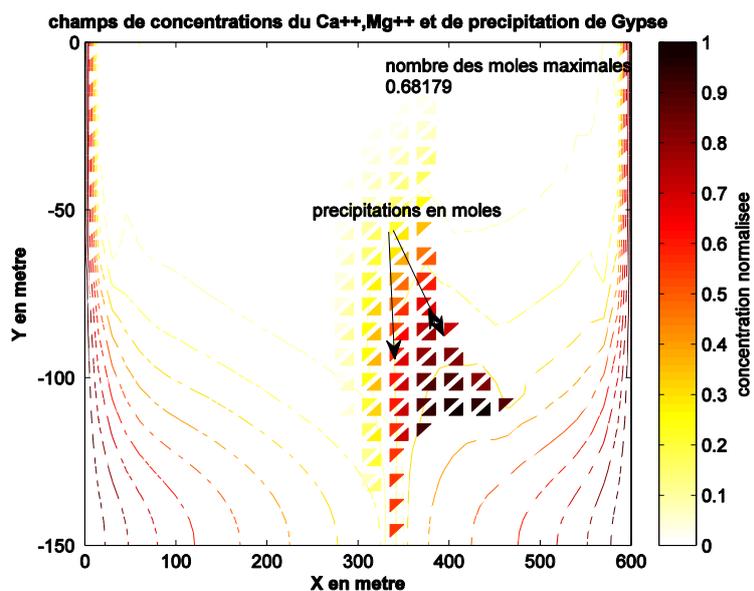


Figure 3. 15:champs de concentration du Ca++ et Mg++ et de précipitation du Gypse

## 4.4.2. Aspect quantitatif : La solution analytique de Coudrain-Ribstein (1988)

Afin de tester quantitativement la démarche de modélisation couplée adoptée, nous procédons à la comparaison des résultats numériques du modèle avec ceux d'une solution analytique relative à une configuration simple d'écoulement et de transport avec une réaction unique de dissolution ou de précipitation d'un minéral. Nous adoptons la solution analytique développée par (Coudrain-Ribstein, 1988). Cette solution ressemble au cas simple du traceur sans modifications de la porosité ni de la perméabilité. En effet, elle est relative à une configuration unidimensionnelle d'écoulement et de transport réactif avec une seule phase minérale et les effets de couplage sont négligés. L'écoulement est considéré uniforme avec une vitesse moyenne de pore constante  $V$ . Seule, la convection est considérée, les phénomènes de diffusion-dispersion sont négligés. Pour la géochimie, une seule réaction entre une espèce aqueuse  $A$  et un minéral  $A_s$  est envisagée :  $A_s = A$ . Nous nous limitons au cas simplifié d'une solubilité constante. Soit  $C^*$ , la concentration correspondant à la limite de solubilité.

*Les conditions initiales* : La colonne est considérée initialement entièrement à l'équilibre avec la phase minérale. La concentration  $y$  est donc partout égale à  $C^*$ , soit :  $C(z,0) = C^*$ .

*Les conditions aux limites* : A l'origine, et à partir de l'instant initial, nous imposons une concentration  $C(0,t)$  qui s'écarte de celle de l'équilibre  $C^*$  d'une valeur  $C_0$  :

$C(0,t) = C^* + C_0$ . Le problème consiste donc à la résolution de l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -V \frac{\partial C}{\partial Z} + F_c \quad (3.12)$$

Nous nous intéressons donc à calculer le profil de concentrations à chaque instant :  $C(z,t)$  et, d'autre part, les quantités dissoutes ou précipitées depuis l'instant initial et jusqu'au temps  $t$  en chaque position :  $C_s(Z,t)$  :

$$C_s(Z, t) = \int_0^t r(C^* - c(Z, t)) dt \quad (3.13)$$

Avec  $r$  est un coefficient de cinétique constant. Les expressions de  $C(z,t)$  et de  $C_s(z,t)$  sont reportées ci-après.

Nous y distinguons pour chaque instant deux portions d'espace correspondant à la position du front de convection :

- $Z < vt$  :

$$C(z,t) = C^* + C_0 \exp(-rz/v)$$

$$C_s(z,t) = r C_0 t \exp(-rz/v)$$

- $Z > vt$

$$C(z,t) = C^*$$

$$C_s(z,t) = 0$$

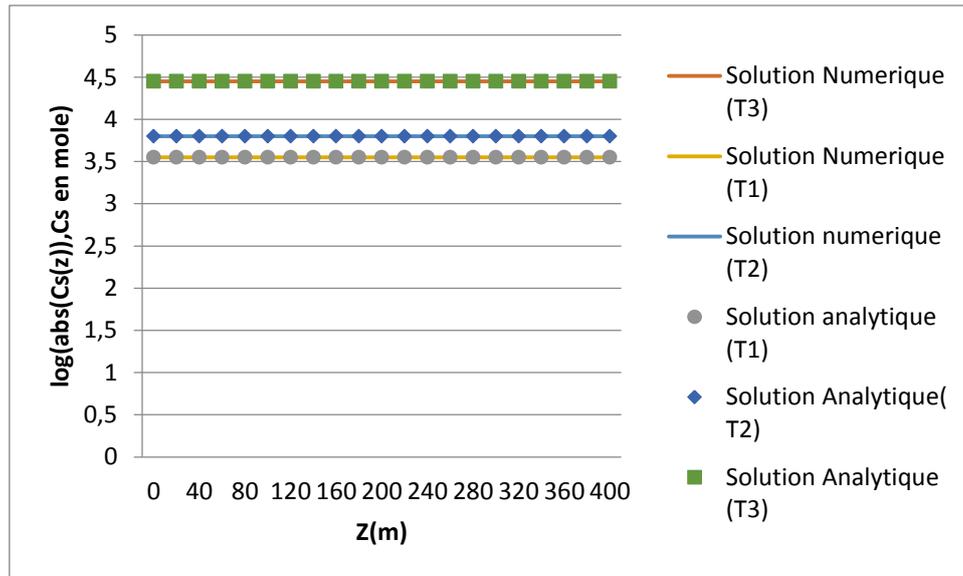
### *Application :*

Numériquement nous représentons ce problème comme il a été présenté par (Bouhlila, 1999). En effet, le problème consiste à une colonne homogène et horizontale de 400 m de long dont la matrice solide est partiellement constituée d'halite (NaCl). Les caractéristiques physiques sont comme suit :

- La porosité  $\Phi = 0,25$ .
- La vitesse de l'écoulement permanent  $V = 3 \cdot 10^{-5}$  m/s soit une vitesse de Darcy  $q = 0,75 \cdot 10^{-5}$  m/s.
- La concentration initiale du fluide en ions  $\text{Na}^+$  et  $\text{Cl}^-$  est de  $C^* = 5,4054$  mol/l.
- La concentration d'injection à  $z=0$  est  $C(0,t) = 4,6181$  mol/l. Soit un écart à l'équilibre de  $C_0$ ,  $C_0 = -0,7873$  mol/l.

Dans le but de reproduire la solution analytique, nous avons modifié les conditions de dissolution précipitation. Elles correspondent dans ce cas à la comparaison de  $C(z,t)$  avec  $C^*$  : si  $C(z,t) < C^*$  il y a alors dissolution. Le coefficient de cinétique  $k_c$  est pris égal à  $1 \cdot 10^{-11}$  mole/s, ce qui correspond à un coefficient  $r_c$  de  $1,85 \cdot 10^{-12} \text{ s}^{-1}$ .

Les calculs numériques et analytiques ont été menés jusqu'à un temps final  $T_2 = 1040$  jours. Nous représentons les profils de quantités cumulées en moles de sel dissoutes, calculés aux instants  $T_1$ ,  $T_2$  et  $T_3$  par le modèle numérique et la méthode analytique.



**Figure 3. 16:Comparaison entre la solution analytique de Coudrain-Ribstein (1988) avec la solution numérique du modèle développé**

Selon la figure précédente, la concordance entre les résultats de deux modèles est clairement bonne.

## 5. Conclusion

La version multi espèce du code GEODENS se base sur une stratégie de parallélisation qui nous a permis d'une part de garder les performances physiques et numériques de la version uni espèce ( développé dans le chapitre précédent) et d'autre part de bénéficier des performances chimique du code de calcul SELSAUM. Cette nouvelle version a été bien testée et validée et elle est bien adaptée pour les problèmes d'écoulement et de transport réactif.

L'architecture numérique adoptée, nous offre plusieurs avantages tels que la possibilité de changements des codes utilisés (chimique ou même physique). Elle garantit un temps de calcul minimal, en effet le temps de calcul dépend essentiellement des performances et nombre de processeurs de la machine. Elle nous permet de fixer le nombre de processeurs que nous souhaitons simuler avec.

Finalement, les performances de parallélisation obtenus, illustrent l'avantage de développer un outil plus complet pour la modélisation des transferts couplés dans les milieux poreux.



Chapitre.IV.

Application hydrologique : Dissolution d'un Dôme  
de sel

## 1. Introduction

La poche de sel est considérée comme l'un des meilleurs réservoirs pour les déchets nucléaires. Plusieurs pays ont proposé les roches des sels comme solution pour conserver leurs déchets nucléaires. La configuration la plus adéquate est celle de dôme de sel. Les caractéristiques physiques et chimiques de ces roches, faibles porosité et perméabilité, sont favorables pour ce type d'usage. Malgré sa minéralogie assez simple, le processus de formation du dôme ainsi que son âge géologique qui peut dépasser les 600 millions d'années (Fries, 1987), a généré une structure interne du dôme assez compliquée. Les risques d'échappement des particules nucléaires dans les dômes ne sont pas nuls et ils dépendent de plusieurs facteurs et paramètres (Massal, 1988). Dans le but de quantifier ces risques et de mieux comprendre les processus d'écoulement et de transport assez compliqués, vu la grande non-linéarité qui caractérise leurs systèmes d'équations, le problème de dôme de sel a été l'objet de plusieurs travaux et études. En effet, nous citons l'étude des dômes du golfe du Mexique (Ranghathan, et al., 1988) qui ont étudié les caractéristiques chimiques et thermiques de ce problème et leurs influences. Shelkes et al. (Shelkes, et al., 1999) ont étudié les risques d'échappement des déchets nucléaires en réponse à des fractures dans les roches. Plusieurs études et travaux ont été effectués sous le projet HYDROCOIN qui a commencé en 1984, et auquel ont participé plus de 20 organismes en testant 25 codes de calcul. Les résultats de ces codes ont été très différents d'une manière à être parfois contradictoires (Diersch, et al., 1998). Le problème de référence pour tous ces travaux est celui décrit par Herbert et al. (1988) qui considère la roche de sel comme imperméable et il ne s'intéresse qu'à la zone en dessus du dôme de sel pour étudier la répartition des champs de vitesse et de concentration et leurs évolutions possibles dans le temps. En se basant sur cette configuration plusieurs études de sensibilité ont été réalisées telle que celle de (Younes, et al., 1998) qui ont étudié l'influence des champs de dispersion et de la diffusion moléculaire sur l'apparition de régions de recirculation. D'autres travaux se sont intéressés à la performance des méthodes de couplages (écoulement-transport) et des méthodes de discrétisation spatio-temporelle utilisées. Nous citons à titre d'exemple les modèles : SWIFT (Reeves, et al., 1986) basé sur une méthode de différences finies, NAMMU (Atkinson, et al., 1985) basé sur la méthode des éléments finis, FEFLOW (Diersch, et al., 1998) code en éléments finis et TVDV (Ackerer, et al., 1998) basé sur les éléments hybrides mixtes.

Dans la réalité les roches qui forment le dôme de sels ne sont pas imperméables à 100 %, dans le cas idéal le dôme est complètement formé par le sel gemme (forme cristalline

de NaCl). Cette roche est caractérisée par une perméabilité qui varie de  $10^{-15}$  à  $10^{-21}$   $m^2$  [ (Peach, 1991) ; (Stormont, et al., 1991)]. Même si une perméabilité de  $10^{-21}m^2$  est considérée par les hydrogéologues comme imperméable, cette valeur, sur une durée de temps qui peut varier de quelques centaines d'années à des milliers d'années (selon la pression appliquée), permet aux liquides de traverser les pores de roche (Ghoryechi, et al., 2003). À notre connaissance, jusqu'à présent il n'existe pas des mesures précises pour l'évolution de la perméabilité au sein des configurations minières de sel. Des mesures in situ effectuées sur des forages de sel montrent que la perméabilité de la paroi est de 5 à 6 ordres de grandeur supérieure à celle du massif intact situé loin de la paroi (Stormont, et al., 1991). L'existence du phénomène de dissolution aux alentours du dôme a été prouvée, via des mesures in situ, par plusieurs chercheurs ( (Jackson, et al., 1983) sauf que l'explication de cette dissolution n'a pas tenu compte de la perméabilité du dôme.

Dans le travail actuel, nous avons utilisé le code GEODENS (Bouhlila, 1999) sur lequel nous avons effectué plusieurs améliorations sur les méthodes numériques et sur la méthode de couplage (chimie-écoulement-transport) (voir chapitres II et III). Dans la suite de ce chapitre, nous présentons une description de notre stratégie de calcul.

Le problème que nous présentons consiste à prendre en considération les faibles perméabilités d'un dôme de sel. Le domaine est élargi, par rapport à celui décrit par (Herbert, et al., 1988) pour prendre en considération une partie du dôme. Cette configuration nous permettra d'étudier les variations et l'évolution de la porosité et de la perméabilité de la roche sur une échelle de temps de dizaines de milliers d'années. Ces modifications nous permettront donc d'affirmer ou non l'existence du phénomène de dissolution du dôme et de quantifier le sel dissous.

Le présent chapitre est composé d'un inventaire sur l'historique de formation ainsi que l'évolution des travaux qui ont abordé le sujet du dôme de sel. Nous présentons une description de la méthode de couplage utilisée dans le code GEODENS. Nous traitons, ensuite, le problème du dôme de sel en le comparant aux résultats existants et en menant une étude de sensibilité de la nouvelle configuration du dôme. Nous étudions l'évolution de la porosité des roches des sels dans le temps pour pouvoir estimer une vitesse de disparition du dôme de sel. En dernier lieu, comme le risque d'un accident de stockage nucléaire est confirmé, nous simulons le scénario d'un accident d'échappement d'une molécule nucléaire et nous étudions son évolution au sein du dôme.

## 2. Historique de formation du Dôme de sel

L'origine et les mécanismes de formation du dôme de sel ont été l'objet de recherche pour toute une communauté scientifique. En visitant la région de Five Islands au sud de la Louisiane (États-Unis), (Thomassy, 1860) a évoqué la découverte de ce phénomène. POSEPNY en 1871 fut le premier à entrevoir la nature intrusive des dômes de sel en Roumanie (Fries, 1987). Depuis ces premières découvertes, les études n'ont pas cessé d'apparaître dans le but de comprendre l'origine de formation du dôme de sel ( (Degolyer, 1926) ; (Barton, 1933) ; (Stille, 1926) ; (Nettleton, 1934),...). Sans vouloir les détailler, il est important de rappeler les divers concepts qui ont été popularisés dans leurs temps :

Depuis 1860 jusqu'à la découverte de Spindletop dôme (1901) il n'y avait pas une idée claire sur la source de formation des dômes : l'érosion, les failles dans les couches géologiques... C'était l'ère des idées farfelues [ (Lockett, 1871) ; (Hopkins, 1870) ; (Clendenin, 1896) et (Harris, et al., 1899)].

De 1901 à 1916, après la découverte des champs pétroliers associés aux dômes de sel, le concept majeur adopté était la formation par précipitation à partir des saumures "formation by solution era" [ (Harris, 1907) ; (Campbell, 1911)].

À partir de 1916-1924 : l'explication de la formation des dômes est le fluage de sel [ (Barton, 1933); (Nettleton, 1934) ; (Balk, 1949) ; (Huehlergerger, 1960) ; (Kupfer, 1974)].

Malgré l'évolution des méthodes numériques et de la géologie moderne, il n'existe pas une théorie qui rassemble l'unanimité des chercheurs sur la question de l'origine de formation du dôme de sel. Un travail mené par Fries en 1987 propose un point sur ce vaste sujet et regroupe les différentes idées sur deux modèles fondamentaux :

Un premier modèle basé sur la mécanique des fluides (Lomax, et al., 2001) qui montre que la densité du sel varie modérément avec l'enfouissement (2,1 à 2,2 g/cm<sup>3</sup>). Contrairement à celle de la plupart des autres sédiments, qui subissent une perte progressive de porosité et une augmentation corrélative de la densité avec la profondeur. Il suggère donc une formation du dôme à partir d'un sel profondément enfui et que la gravité et la chaleur sont les moteurs principaux du déclenchement du processus de formation en augmentant la plasticité de sel stocké profondément (Parker, et al., 1955).

Le deuxième modèle se base sur la théorie du "down building" de (Barton, 1933), argumentée expérimentalement par (Parker, et al., 1955). Ce modèle suggère que la formation

prend lieu après un dépôt des sédiments d'épaisseur entre 7 à 900 m au-dessus de sel. Ce dépôt engendre une inversion de rapport de densité qui s'ajoute aux effets de charge (pente, gravité). Ces deux facteurs suffisent à débiter des montées locales de sel qui se transformeront ultérieurement en "coussin" puis en "dôme" ( (Trusheim, 1960) ; (Jackson, et al., 1983). En se basant sur ce modèle, le dôme peut se former donc à des profondeurs minimales (quelque mètre).

### 3. Mise en question de la dissolution du dôme de sel

La minéralogie du dôme de sel est assez simple, sauf que son processus de formation ainsi que leur âge géologique qui peut dépasser les 600 millions d'années (Fries, 1987), a généré une structure interne du dôme assez compliquée. Généralement, la roche du dôme est composée de 90 % de l'Halite (NaCl) en plus de quelque quantité d'anhydrite (CaSO<sub>4</sub>), de silice et des carbonates (Hart, et al., 1981).

La coexistence de sel gemme (NaCl solide) et des circulations hydrologiques des eaux souterraines remettent en question la naissance du phénomène de dissolution. La mise en évidence de l'existence de la dissolution a été l'objet des plusieurs investigations telles que celle du dôme de Hainesville (États-Unis) où (Jackson, et al., 1983) ont prouvé l'existence d'une perte de sel de l'ordre de 160 km<sup>3</sup>. Une autre quantité de sel dissous a été détectée sur le site du dôme de Palestine au Texas par 'U.S. Nuclear regulatory Commission' en 1981. Le phénomène de dissolution de dôme est déclaré donc comme un problème existant. Malgré cette certitude, ce phénomène, jusqu'à présent, est caractérisé par une énorme complexité. En effet les dômes qui ont été investigués ainsi que les autres sont toujours existants et ne changent pas ni de forme ni de dimension. Les recherches menées ont abouti donc à deux hypothèses afin d'expliquer cette contradiction : La première, est que le phénomène de dissolution a eu lieu au passé et puis il s'est arrêté. la deuxième est l'existence d'une barrière qui protège le dôme qui est l'imperméabilité de ce dernier (Hart, et al., 1981).

La première hypothèse est tout de suite rejetée puisque la quantité du sel dissous continue a augmenté (Larsson, 1992). La deuxième hypothèse a été retenue par une grande majorité de la communauté scientifique. Le dôme est considéré comme imperméable et la porosité de cette roche est donc nulle. En se basant sur ces deux approches, le processus de transport et de l'écoulement n'ont pas d'influence sur la roche de sel qui garde ces propriétés fixes au cours du temps.

Dans le cas idéal, le dôme est complètement formé par le sel gemme, cette roche est caractérisée par une perméabilité qui varie de  $10^{-15}$  ( $m^2$ ) à  $10^{-21}$  [ (Peach, 1991) ; (Stormont, et al., 1991)]. Les valeurs de perméabilité mesurée in situ des dômes de E.U sont comprises entre  $9.8 \cdot 10^{-20}$  et  $1.10^{-17}$  ( $m^2$ ) (Kelsall, et al., 1985). Au laboratoire ces valeurs, pour les mêmes échantillons, peuvent atteindre  $10^{-12}$  ( $m^2$ ) (Kelsall, et al., 1985). Des mesures de porosité ont été réalisées sur 4 sites différents repartis entre U.S.A. et Canada ont donné des valeurs comprises entre 0.62 % et 7.17 % (Aufrecht, 1961).

Ces mesures montrent que la porosité du dôme n'est pas nulle et que la perméabilité, pour le cas le plus faible, est aux alentours de  $10^{-19} m^2$ . Ces valeurs, même si elles sont assez faibles, permettent la circulation des eaux dans les roches (Ghoryechi, et al., 2003). Les dômes de sel ne peuvent pas être considérés comme imperméable et les petites circulations d'eau peuvent changer les caractéristiques physiques (porosité et perméabilité) ainsi que la forme générale du dôme de sel.

#### 4. Modélisation du Dôme de sel

##### 4.1. Dôme de sel classique (Projet HYDROCOIN)

Les dimensions des dômes des sels sont très variées. Ils sont caractérisés par des sections généralement circulaires ou bien elliptiques, variant de quelques centaines de mètres de rayon à 2-3 km. La hauteur des dômes varie dans une fourchette assez large : elle atteint 3 000 m en Allemagne du Nord, elle dépasse 6 000 m au Golfe de Mexico tandis qu'en Alsace ou en Angola, elle atteint à peine quelques centaines de mètres. Ces structures sont réparties sur pratiquement tous les continents. Les dômes américains (Golf de Mexique) et allemands (nord de l'Allemagne) sont les plus exploités en termes de données.

Le Problème étudié dans ce travail est la configuration géologique réelle du Nord de l'Allemagne. Le dôme en question a fait l'objet du test du projet HYDROCOIN (Hydrology Code Intercomparison) qui a commencé en 1984 et dont l'objectif est d'améliorer la connaissance des différentes stratégies de modélisation des écoulements souterrains, en liaison avec les problèmes de sûreté des stockages de déchets radioactifs (Beljin, et al., 1989).

Le domaine consiste en une section verticale de 300 m de hauteur et de 900 m de largeur (Figure 4.1). Les conditions aux limites sont telles que présentée par (Herbert, et al., 1988). Sur la face supérieure du domaine nous imposons, pour le transport, une concentration nulle ( $c=0$ ) sur le tronçon ( $0 \leq x \leq 200$ ), le reste de la surface est caractérisé par une condition

de Newman où  $(\partial c / \partial z = 0)$ . Pour l'écoulement, une condition de pression qui diminue linéairement de  $10^5$  à 0 Pa est imposée. Sur la face inférieure, une concentration maximale  $C_0$  est imposée sur le tronçon  $(300 \leq x \leq 600)$ . Les paramètres physiques sont décrits dans le tableau (4.1).

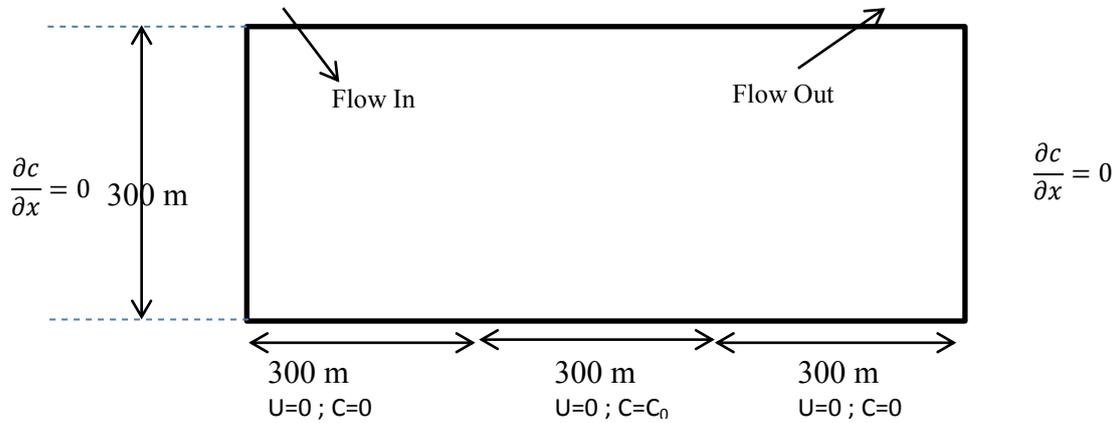


Figure 4. 1: Géométrie et conditions aux limites du problème de Dôme de sel

Tableau 4. 1: Paramètres physiques du Dôme de sel

Perméabilité	$K = 1.10^{-12} \text{ m}^2$
Porosité	$\Phi = 0,2$
Dispersivité longitudinal	$\alpha_L = 20 \text{ m}$
Dispersivité transversale	$\alpha_T = 2 \text{ m}$
Diffusion	$D = 2,78 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$
Masse Volumique de la saumure	$\rho_S = 1200 \text{ Kg}/\text{m}^3$
Masse volumique de l'eau douce	$\rho_0 = 1000 \text{ Kg}/\text{m}^3$

#### 4.2. Nouvelle approche : dissolution du dôme de sel

Le dôme de sel est un problème hydrogéologique qui se caractérise par une durée de vie qui peut dépasser les millions d'années. Les travaux antérieurs, qui adoptent une perméabilité nulle du dôme, se limitent à des temps de simulation de l'ordre de 1000 ans. En effet le régime permanent est établi en une durée semblable (Younes, et al., 1998). Dans le but d'étudier le phénomène de dissolution du dôme de sel, nous nous fixons des temps de simulations beaucoup plus longs. Nous nous intéressons à la mise en évidence de ce problème en étudiant les variations de la porosité et de la perméabilité au sein du dôme. Pour ce faire nous proposons une nouvelle configuration du problème HYDRCOIN. L'idée consiste à agrandir vers le bas le domaine de travail pour contenir une partie de dôme. Nous avons agrandi le domaine de travail de 50 mètres. Les dimensions du problème sont (350 m x 900m) (Figure 4.2). Les paramètres physiques sont les mêmes utilisés pour le problème original. Nous supposons que la roche du dôme est composée d'une matrice solide de porosité égale à 0.2 et que les pores de cette roche sont remplis à 90 % de sel (NaCl) sous forme solide et 10 % de matrice solide. La porosité totale de la roche est donc égale à 0.02. La perméabilité de cette roche est de l'ordre de  $10^{-17} \text{ m}^2$ .

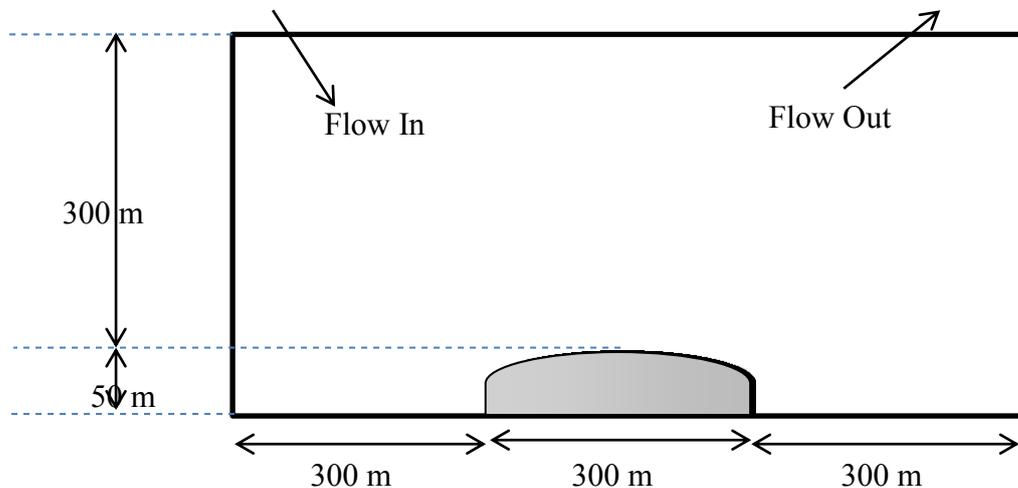


Figure 4. 2: géométrie adoptée du dôme de sel

#### 4.3. Modèle physique

C'est celui de l'écoulement en milieu poreux couplé au transport de solutés qu'utilise GEODENS :

- Equation de conservation de la masse de fluide :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (q_i) = \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \quad \text{avec} \quad (4.1)$$

$$q_i = u_i\phi = -\frac{k_{ij}}{\mu} \left( \frac{\partial p}{\partial x_j} - \rho g_i \right) \quad (4.2)$$

Où  $k_{ij}$  est le tenseur de perméabilité géométrique [ $L^2$ ], caractéristique intrinsèque du milieu poreux, indépendant du fluide qui y circule,  $p$  [ $kg.m^{-1}.s^{-2}$ ] la pression locale du fluide,  $\mu$  [ $kg.m^{-1}.s^{-1}$ ] sa viscosité  $\rho$  [ $kg.m^{-3}$ ] sa densité,  $g_i$  [ $m.s^{-2}$ ] l'accélération de pesanteur dans la direction  $i$ ,  $\Phi$  [-] la porosité (entre 0 et 1),  $u_i$  [ $m.s^{-1}$ ] la vitesse effective (vitesse de l'eau dans les pores) et  $q$  [ $m.s^{-1}$ ] est la vitesse de Darcy.

- Équation de conservation de la masse du soluté

L'équation de conservation de soluté déterminé par sa fraction massique  $C$  vient :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho\phi D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho\phi C u_i) = \frac{\partial(\rho\phi C)}{\partial t} \quad (4.3)$$

$D_{ij}$  est le coefficient de dispersion donner par :

$$D_{ij} = (d + \alpha_L u) \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{u_i - u_j}{u} \quad (4.4)$$

Avec  $d$  est le coefficient de diffusion moléculaire,  $\alpha_L$  et  $\alpha_T$  sont respectivement la dispersion longitudinale et transversale,  $\delta_{ij}$  est le symbole de Kronecker,  $i$  et  $j$  les axes de l'espace.

#### 4.4. Paramétrisation et lois adoptées

La roche dôme de sel est composée, en majorité, de chlorure de sodium qui est caractérisé par une masse molaire de 58,44 g/mol et la solubilité dans l'eau d'environ 359 g/L.

##### 4.4.1. Viscosité

La viscosité adoptée est celle de l'eau à différentes concentrations en sels. La viscosité des solutions de NaCl à des fractions massiques variant de 0 à 26 % est donnée dans le Handbook of Chemistry and Physics (1972- 1973) (Figure 4.3). L'ajustement d'une loi à ces valeurs fournit un polynôme de degré 3, en fonction de la fraction massique normalisée par la fraction massique maximale de 0.26 ( $C$  varie donc de 0 à 1) (Herbert, et al., 1988).

$$\mu(c) = \mu_0(1 + 0.4819 C - 0.2774 C^2 + 0.7814 C^3) \quad (4.5)$$

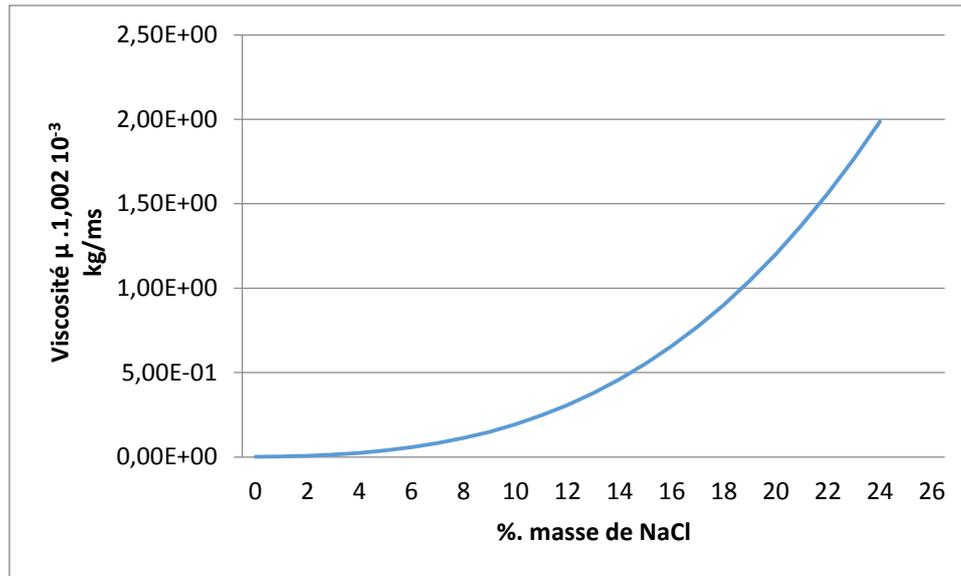


Figure 4. 3:Viscosité dynamique ( $\mu$ ) des solutions de NaCl

4.4.2. Densité

La densité du mélange  $\rho$  est l'élément de couplage entre les différents processus du code. Les problèmes étudiés sont généralement caractérisés par de fortes concentrations avec l'existence, parfois, des précipités des sels. Le calcul de la densité n'est plus une simple relation linéaire comme celle décrite par [ (Bouhlila, 1999) ; (Herbert, et al., 1988)]. La stratégie de calcul a été développée et validée (tableau 4.2) par Bouhlila, 1999 en se basant sur la méthode de (Monnin, 1989).

Tableau 4. 2:Calcul des densités

Saumure	Composition (molalité) en :						Densité en g/cm <sup>3</sup>		
	Na	K	Ca	Mg	Cl	So <sub>4</sub>	Mesuré	Calculé*	Calculé**
Eau de mer	0,48586	0,01058	0,1065	0,05519	0,56571	0,02926	1,023337	1,023313	1,024313
Mer rouge 1	10,4162	0,00567	0,01209	0,00340	0,45131	0,00079	1,015403	1,015408	1,015391
Mer rouge 2	5,43497	0,07415	0,15805	0,04489	5,89363	0,01042	1,094326	1,194129	1,193906
Mer morte 1	1,87239	0,20154	0,4652	1,91949	6,84334	--	1,223329	1,222999	1,223000
Mer morte 2	1,87239	0,20154	0,4652	1,82569	6,65575	--	1,218383	1,217987	1,217988

\* d'après Monnin (1980).

\*\*d'après Bouhlila (1999)

4.4.3. Porosité

$\Phi$  est la porosité qui suit une loi de variation selon l'existence ou pas des réactions de précipitation/dissolution. La loi de variation de la porosité  $\Phi$  entre le temps (t) et (t+ $\Delta t$ ) pour chaque élément 'e' du maillage est :

$$\Phi(t + \Delta t) = \Phi(t) + d\Phi \quad \text{avec} \quad d\Phi = dN * V_m/V_e \quad (4.6)$$

Où dN est la différence de nombre de mole précipité (-) ou dissoute (+) du sel,  $V_m$  est le volume molaire du sel et  $V_e$  est le volume de l'élément de maillage.

4.4.4. Perméabilité

La relation entre la porosité et la perméabilité est complexe dans les milieux naturels. La variation de la porosité n'est pas automatiquement dans le même sens ni proportionnelle aux volumes de minéraux précipités ou dissouts. Nous ne pouvons pas étudier la répartition des espaces poreux qui nécessite des expérimentations, par contre nous nous intéressons à l'influence de la loi de la perméabilité sur l'évolution de la porosité. Des modèles capillaires ou de fissures planes permettent d'établir des relations univoques entre la porosité et la perméabilité. Nous étudions particulièrement le modèle capillaire de :

- Koseny-Carman qui exprime la perméabilité intrinsèque k [ $L^2$ ] en fonction de la porosité  $\Phi$  :

$$\frac{k}{k_0} = \left(\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^3 \left(\frac{1 - \Phi_0}{1 - \Phi}\right)^2 \quad (4.7)$$

Avec  $\Phi_0$  : la porosité initiale

$K_0$  : la perméabilité initiale.

- Verma-Pruess model : (Verma, et al., 1988): Verma et Pruess ont élaboré une relation perméabilité-porosité à partir d'un corps poreux dans lequel la perméabilité peut être réduite à zéro avec une porosité critique restante.

$$\frac{k}{k_0} = \left(\frac{\Phi - \Phi_c}{\Phi_0 - \Phi_c}\right)^2 \quad (4.8)$$

Avec  $\Phi_c = 0.9 * \Phi_0$  est une porosité critique sous laquelle la perméabilité atteint zéro.

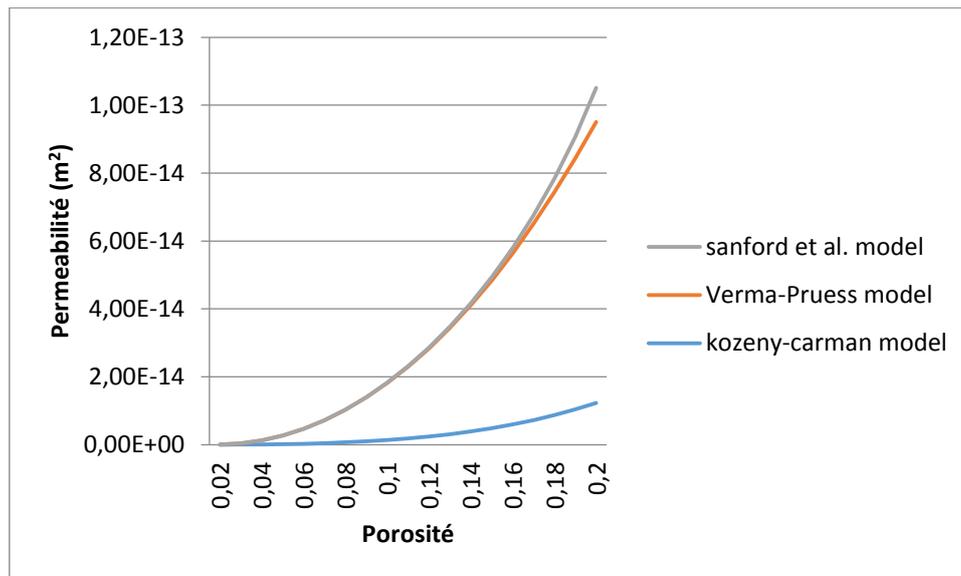
Nous comparons ces deux lois avec celle que nous utilisons dans notre code et qui est établie par (Stanford, et al., 1989), utilisant une relation logarithmique pour k en  $m^2$  et  $\Phi$  en valeur vraie :

$$\log(k) = a * \Phi - b \quad (4.9)$$

où  $a$  est une constante de l'ordre de 20 (Sanford et al., 1989). La constante  $b$  est déduite à partir des valeurs de  $k$  et de  $\phi$  initiales, mesurées sur le terrain. Soit pour le sel gemme :

$$\log(k) = 20 * \Phi - 19 \quad (4.10)$$

L'évolution de la porosité par rapport à ces trois lois de perméabilité est donnée dans la (Figure 4.4)



**Figure 4. 4:Evolution de la perméabilité en fonction de la porosité**

L'évolution de la porosité suit la même allure pour les modèles de Verma-Pruess et celui de Sanford et al. Cette évolution est moins importante pour la loi de Kozeny Carman. La relation perméabilité-porosité peut engendrer des conséquences sur la variation de la concentration des différents problèmes étudiés.

Afin d'étudier l'influence de la loi de la perméabilité sur la concentration du problème du dôme de sel nous avons comparé la concentration (en terme de pourcentage par rapport à la concentration initiale) à l'exutoire du domaine aux coordonnées (00.00 ; 850.00) (Figure 4.5).

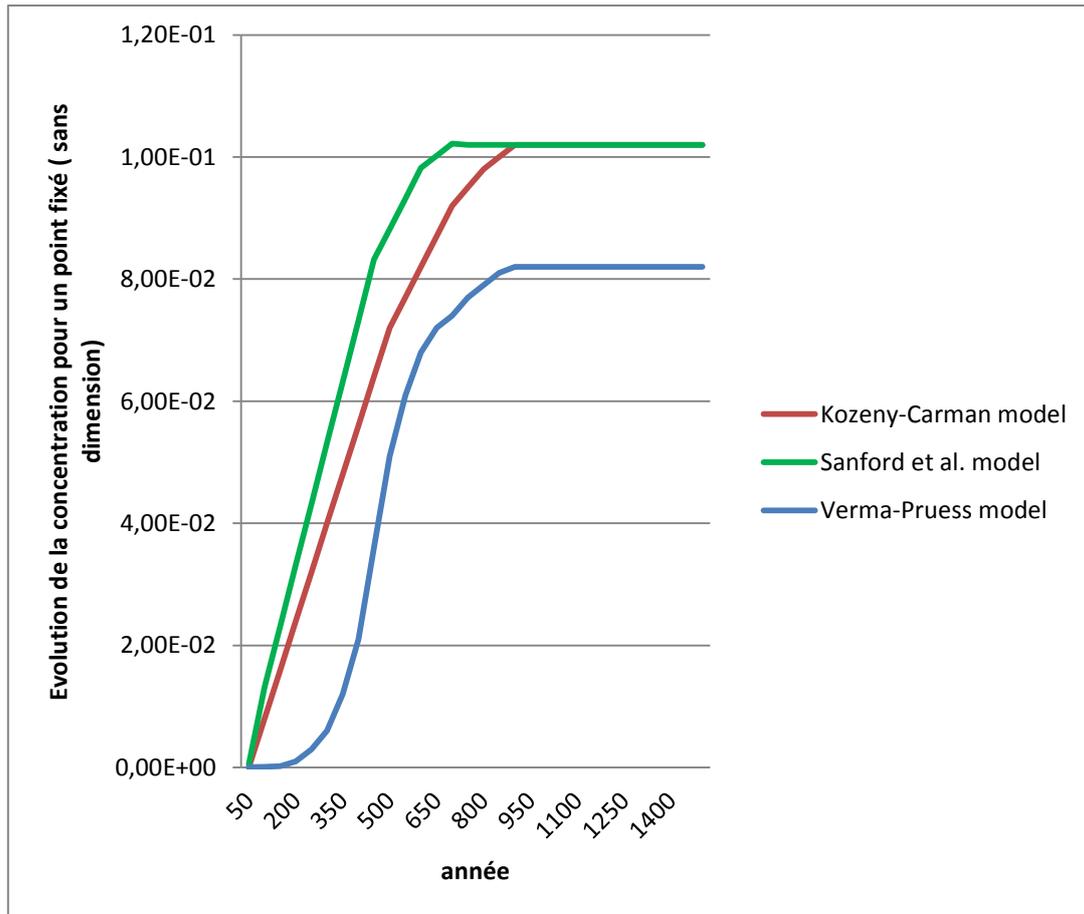


Figure 4. 5:Evolution de la concentration en fonction de la loi de perméabilité

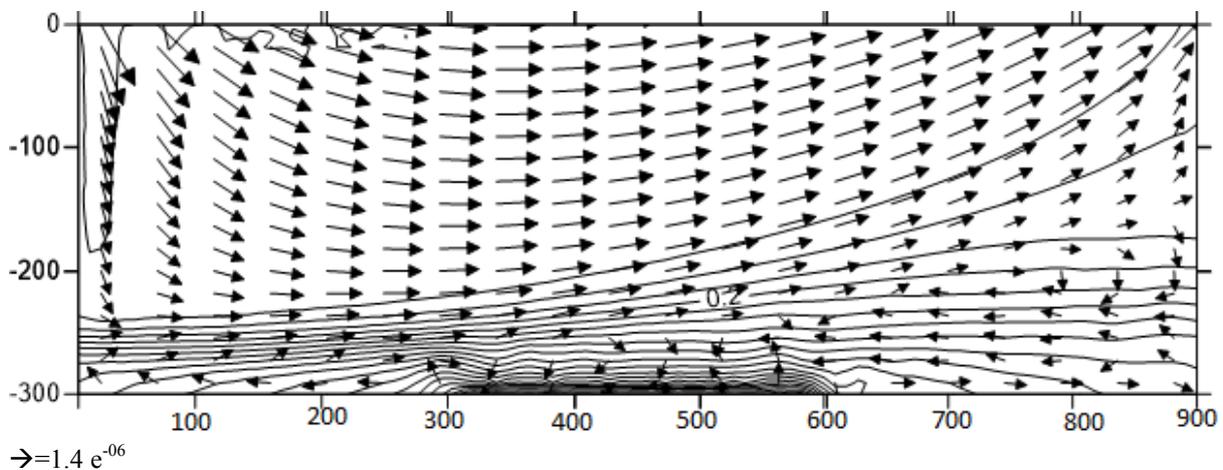
La concentration atteint la même valeur finale pour les deux lois de Kozeny-carman et Sanford et al. (0,1 Soit 10 %). l'évolution de la concentration pour la troisième loi est moins intense, en effet elle atteint une valeur maximale de 8 % de la concentration initiale. L'évolution de la concentration atteint le régime permanent plus rapidement avec la loi de Sanford et al (650 ans) par rapport à celles de Kozeny Carman et Verma-Pruess (800 ans). Afin d'étudier la dissolution du dôme, nous avons intérêt à choisir la loi qui représente le scénario le plus défavorable en terme de risque naturel. C'est la loi qui favorise l'évolution de la porosité et de la perméabilité dans le dôme. Nous choisissons donc la loi de Sanford et al :

$$\text{Log}(k)=20. \Phi - 19 \tag{4.11}$$

## 5. Résultats et Simulations

### 5.1. Dôme de sel classique (Projet HYDROCOIN) :

Les simulations ont été réalisées en utilisant un maillage initial de 1681 nœuds. Le régime permanent est considéré atteint lorsque la norme de convergence est atteinte c.à.d. quand l'évolution du vecteur solution  $\frac{\|X\|}{\|\Delta X\|}$  à  $t_{n+1}$  est inférieure à  $10^{-9}$ . Dans la mesure de se mettre sur le même ordre de grandeur, avec les travaux antérieurs, nous menons un calcul sur 1000 ans. Le régime permanent est considéré comme atteint pour ce temps (Younes, et al., 1998).



**Figure 4. 6: Iso-concentrations et champ de vitesses au-dessus du dôme de sels (T=1000 ans)**

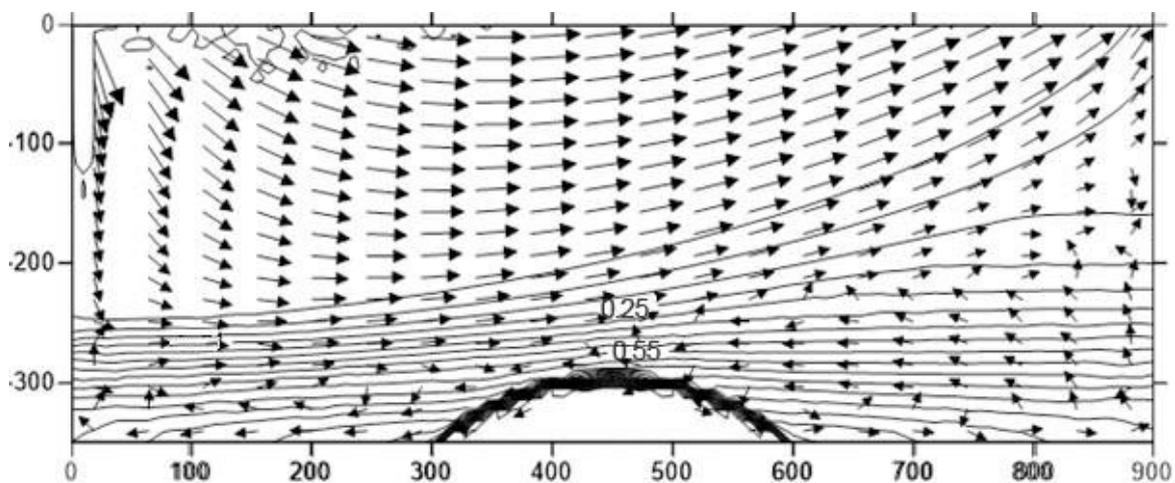
Les résultats trouvés (Figure 4.6) sont en parfaite concordance avec les travaux de Herbert et al. (1988) ainsi que celles des autres travaux antérieurs tels que celles présentées dans le rapport final de (OECD, 1988) (OECD (Organisation for Economic Cooperation and De, 1988)). En effet, tous ces résultats prouvent l'existence d'une large zone de recirculation au bas de domaine, par contre nous remarquons l'existence de quelques différences pour la distribution finale des lignes de concentration. La différence de la configuration des lignes de concentration est expliquée par la multitude des méthodes numériques utilisées dans les différents codes qui ont traité ce problème (Konikow, et al., 1997).

### 5.2. Dôme avec dissolution

Dans le but de décrire la meilleure configuration physique, une multitude des études de sensibilité ont été réalisées sur le problème de dôme du projet HYDROCOIN. Ces études ont mis l'accent sur l'influence de la diffusion, de la dispersion, de la loi de la densité... [ (Herbert, et al., 1988) ; (Younes, et al., 1998)].

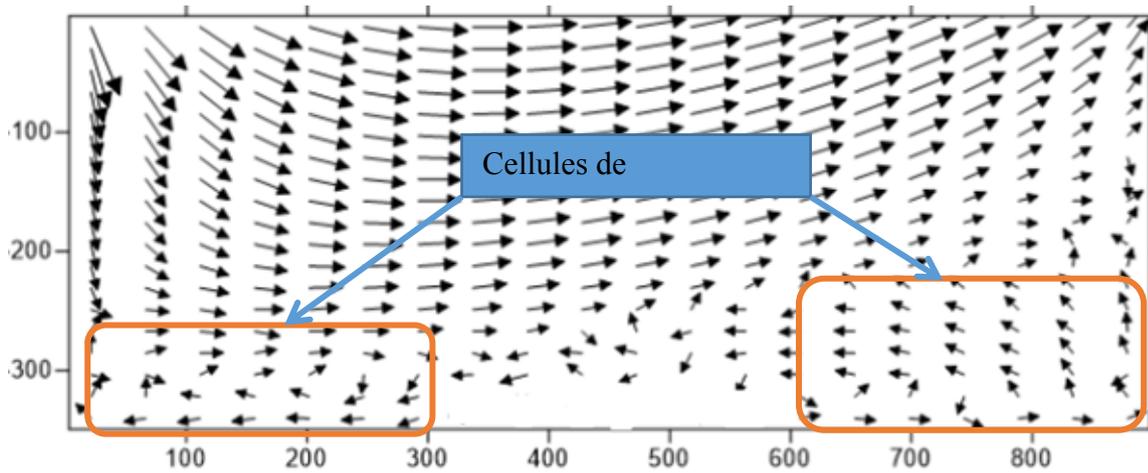
Ce travail est loin d'être une répétition de ces études de sensibilité. Comme décrit précédemment, nous adoptons le problème tel qu'il est décrit par Hertbet, 1988 et nous l'adaptant pour tester, en premier lieu, l'influence d'un tel élargissement sur le champ de vitesse, les cellules de recirculation, les lignes d'iso concentration.

Le maillage adopté est constitué de 2136 éléments, soit 4391 nœuds. Les paramètres physiques sont les mêmes utilisés pour le problème original. Dans le but de comparer les résultats de ce problème avec ceux du problème original, nous avons mené les simulations sur une période de 1000 ans (Figure 4.7). Pour une meilleure comparaison, les concentrations représentées sont normalisées par rapport à la concentration maximale ( $0 \leq C/C_{\max} \leq 1$ ).



**Figure 4. 7:Champs des vitesses et des concentrations pour une simulation de 1000 ans**

Le champ de vitesse est identique à celui du problème original en termes de norme. Nous remarquons des vitesses de très faible intensité à la couche supérieure du dôme ( $1.10^{-10}$ ). Des cellules de recirculation existent de part et d'autre du dôme de sel. Ces cellules sont au nombre de deux, comme déjà cité dans les travaux antérieurs (Bouhlila, 1999). Ces cellules sont plus larges que celles trouvées avec le problème original (Figure 4.8). En effet les résultats antérieurs de dôme de sel sont vus comme une représentation d'une coupe horizontale suivant la cote  $y = -300$  m.



$\rightarrow = 1.4 \times 10^{-6}$

Figure 4. 8:Champs des vitesses et cellules de recirculation

Dans un deuxième lieu, nous comparons les champs de concentration du problème adapté avec celles du problème original. Pour ce faire, nous comparons l'évolution des concentrations au cours des simulations pour les points suivants :

Point 1 :  $x= 0.00$  ;  $y= 850$

Point 2 :  $x= 450$  ;  $y= -250$

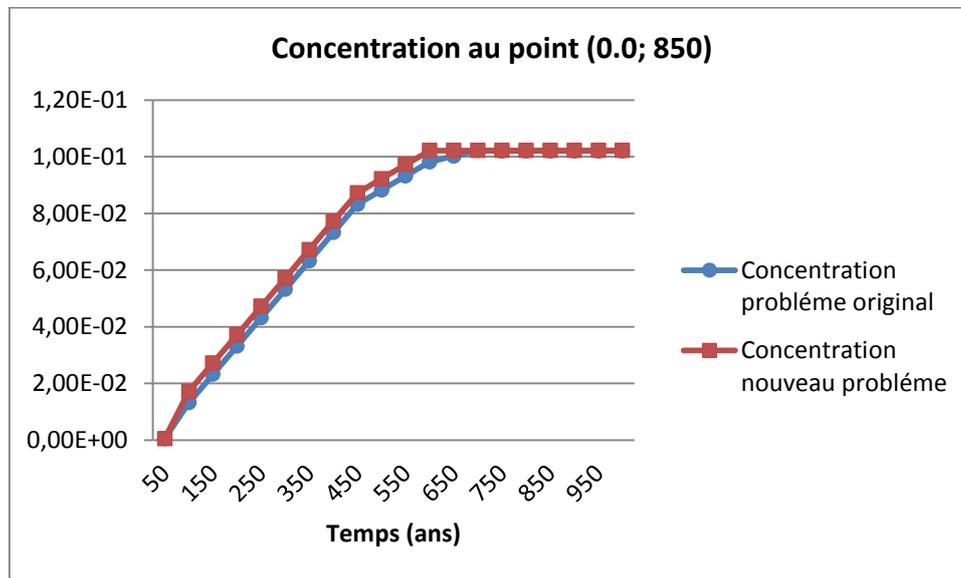


Figure 4. 9:Evolution de la concentration au point 1 :  $x= 0.00$  ;  $y= 850$

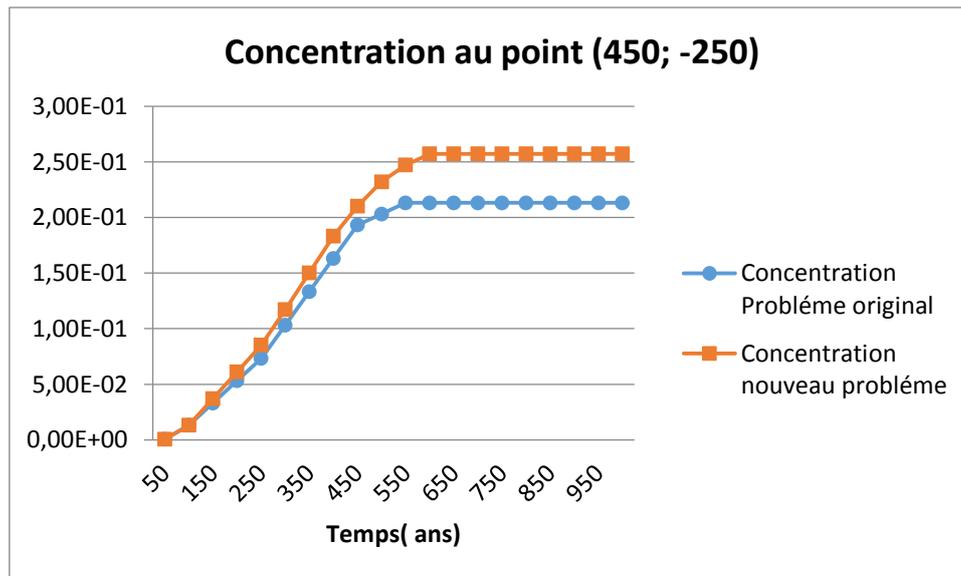


Figure 4. 10:Evolution de la concentration au point 2 :  $x= 450$  ;  $y= -250$

La concentration à l'exutoire du domaine (point1) suit la même allure pour les deux configurations et elle atteint la même valeur maximale qui est égale à 0,1 (10 %) de la concentration maximale (Figure 4.9). Ce résultat est en parfaite concordance avec les résultats mentionnés au rapport final du projet HYDROCOIN où la communauté scientifique a affirmé que la concentration finale, à l'état stationnaire et l'exutoire, est égale 10 % de la concentration initiale.

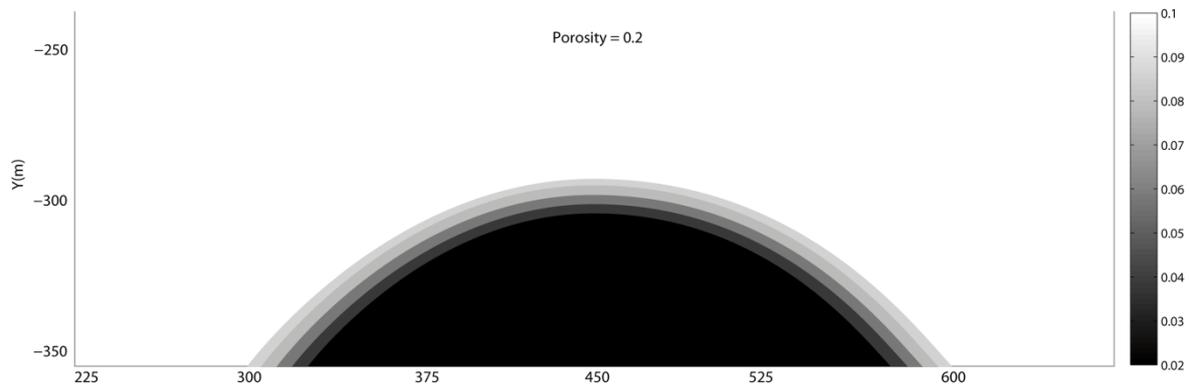
La concentration au deuxième point (50 mètres au-dessus du sommet du dôme) est plus élevée pour le nouveau problème (Figure 4.10). En effet, elle est passée à 0.25 après une durée de 600 ans contre 0.21 pour celle au problème original. Cette augmentation est expliquée par l'influence de l'existence du dôme, une grande quantité de sel, surtout que nous utilisons un code chimique pour le calcul de la concentration et de la densité, contrairement aux travaux antérieurs qui utilisent une loi linéaire pour le calcul de la densité.

### 5.3. Porosité et bilan de masse

La roche de dôme est très peu perméable, l'eau douce dissout les sels en surface du dôme. Le champ de porosité présente une variation sur les éléments du bord de la roche. La porosité, des éléments de surface de dôme, est passée de 0,02 à 0,04 pour une simulation de 1000 ans. La quantité de sel dissous est de l'ordre de  $1,2 \cdot 10^5$  kg dont 400 kg circulent dans le domaine de travail et le reste est sorti.

L'objectif de ce travail est de quantifier les variations de la porosité de dôme de sel. Pour cela, nous avons étendu nos simulations sur un temps beaucoup plus long (20 000 ans). Nous présentons les résultats pour des simulations de 10 000 ans, le processus de dissolutions

ainsi que l'évolution de la porosité se stabilisent à partir de cette période. À la fin de cette période, la porosité de la couche supérieure de la roche est passée à 0,09 (Figure 4.11). La porosité a augmenté d'un ordre de 4.5 fois la valeur initiale. La quantité de sel dissous (perdu) est de l'ordre de  $3 \cdot 10^5$  kg. Cette quantité représente 50 % de la quantité de sel existante, initialement, sur la couche supérieure de dôme.



**Figure 4. 11:Champs de porosité pour une simulation de 10 000 ans**

Le dôme de sel voit la porosité de sa couche supérieure s'accroître. En effet, l'eau douce ou non saturée (en la comparant au sel) dissout la couche supérieure du sel gemme. Les pores de cette première couche se libèrent progressivement de sel existant et la perméabilité, par conséquent, augmente. Ces deux facteurs favorisent la circulation à l'intérieur du dôme et l'eau a tendance à pénétrer de plus en plus dans les pores inférieurs. La quantité de sel perdu n'est pas constante au cours du temps (Figure 4.12).

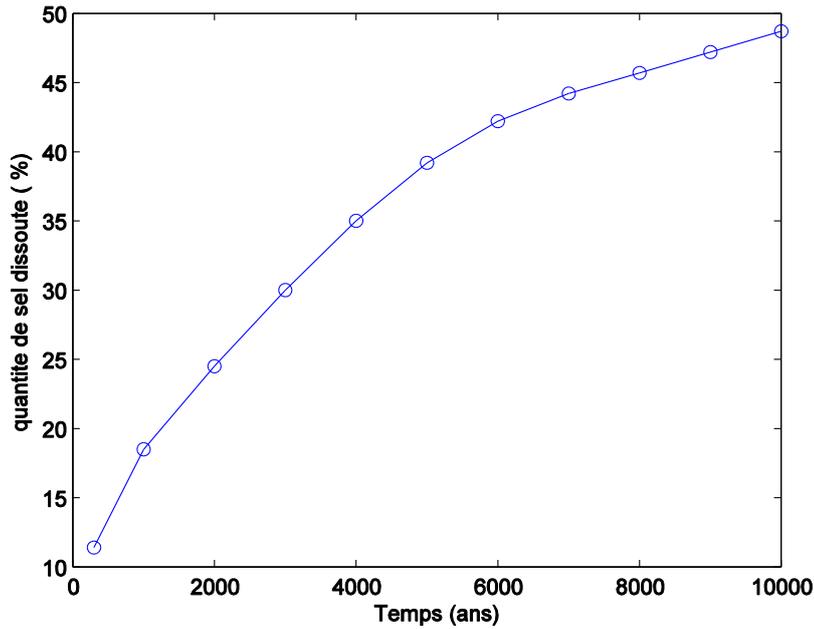


Figure 4. 12: Evolution de la quantité de sel dissous de la roche de dôme en % par rapport à la quantité initiale

Le processus de dissolution est beaucoup plus rapide pour les premiers 1000 ans (Figure 4.13). Après l'établissement de régime permanent, l'eau circulant dans le domaine est plus concentrée et le processus de dissolution devient plus lent. le processus de dissolution se stabilise après 8000 ans et garde un taux de dissolution de 9,4 Kg/ans .

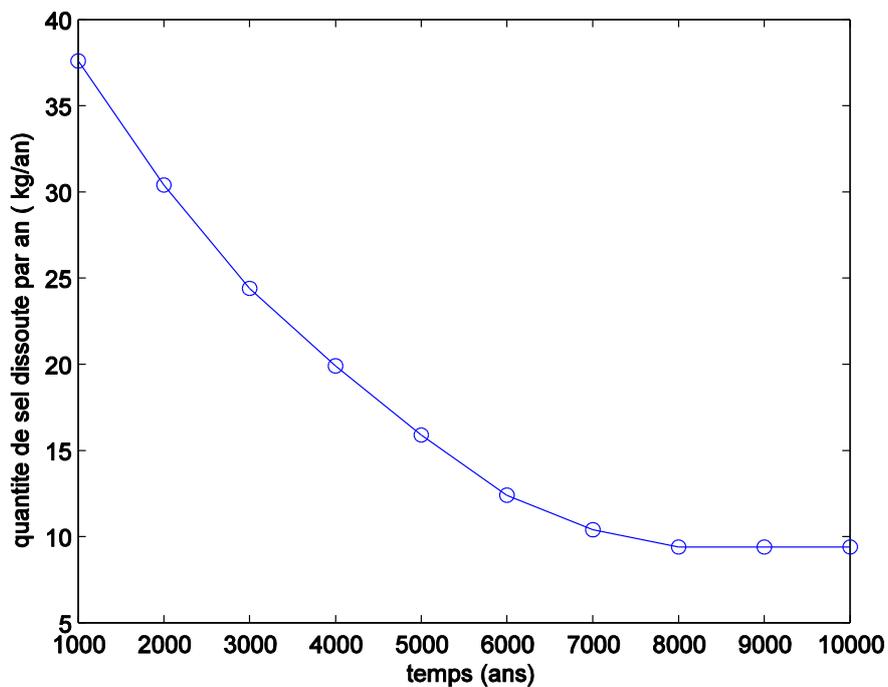


Figure 4. 13: Evolution de la quantité de sel dissous par an

La stabilité du problème du dôme est très influencée par le maillage adopté (Konikow, et al., 1997). Une étude de sensibilité sur l'influence de maillage sur le processus de dissolution s'avère donc inévitable. Nous présentons le pourcentage de la quantité de sel dissoute de la colonne de surface de dôme pour deux maillages différents (Figure 4.14) :

Le premier 'scale 1', est le même maillage utilisé précédemment dans ce travail (2136 éléments) : une bande de surface de largeur 8 m (deux rangées des éléments superposés), voire 50 % de la quantité initiale de sel dissous au bout de 10 000 ans.

Le deuxième scale 2' deux fois plus fin que le premier soit 4272 éléments : une bande de surface de 4 m de largeur (deux rangées des éléments superposés) voire 50 % de la quantité de sel existante initialement dans cette bande part au bout de 5000 ans.

En comparant donc le bilan total de sel dissous, le processus de dissolution a le même comportement et la même vitesse. La quantité de sel dissous reste pareille par mètre de largeur, quel que soit le maillage adopté.

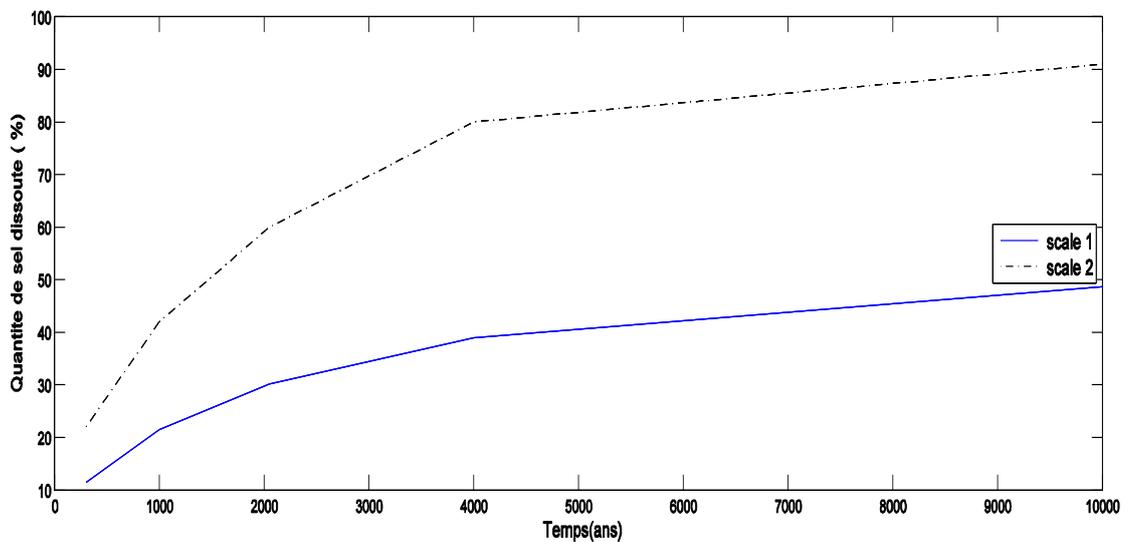


Figure 4. 14: pourcentage de la quantité de sel dissoute dans la colonne supérieure de dôme de sel pour deux maillages différents

En tenant compte de l'évolution de la porosité ainsi que du processus de dissolution et en nous basant sur une vitesse de dissolution de 9.4 kg/ans nous estimons que le temps nécessaire pour la disparition de la couche supérieure du dôme peut être estimé comme suit :

$$\text{Quantité de sel restante} / \text{le taux de dissolution par an} = \quad (4.12)$$

$$3 \cdot 10^5 / 9,4 = 31\,915 \text{ ans}$$

Nous estimons donc une disparition totale de la couche supérieure du dôme après  $32\ 000+10\ 000=42\ 000$  ans. Cette couche peut être vue comme une bande de 8 m de largeur.

La disparition des quantités du sel à partir de dôme s'étale sur des périodes de dizaines de milliers d'années. Le processus de dissolution ne peut pas être donc visualisé en se basant sur des études in situ ou bien par le moyen des simulations de court terme (1000 ans). Le problème de dôme de sel ne se stabilise pas au bout de quelques centaines d'années, car le processus de dissolution n'atteint son régime permanent qu'après 8000 ans.

#### 5.4. Cas d'un accident de stockage radioactif.

Le dôme de sel est considéré comme l'une des formations hôtes les plus retenues pour le stockage radioactif, grâce aux propriétés uniques de ce matériau (Djahanguiri, et al., 1985), qui contribuent à sa capacité de confinement. Le sel gemme possède plusieurs avantages qui favorisent le stockage des déchets radioactifs tel que sa faible perméabilité, faible porosité, structure géologique relativement simple... (Massal, 1988).

Malgré les avantages des roches de sel pour ce type de stockage, la chance d'échappement des molécules radioactive n'est pas nulle. C'est pour cela que ce sujet a marqué le centre des différents travaux de recherche pour ces deux dernières décennies (Bouc, et al., 2007). Nous nous intéressons dans cette partie à un scénario d'accident d'échappement d'une molécule hautement radioactive placée au fond du dôme (Figure 4.15).

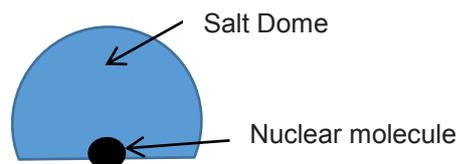


Figure 4. 15:scénario Proposé

Le problème à traiter consiste à suivre l'évolution de la molécule radioactive au sein du dôme. Les molécules en question sont de très haute activité, donc de durée de vie de l'ordre des milliers à des millions d'années. Afin de visualiser le cas le plus défavorable, nous ne prenons pas en considération la dégradation de l'activité de la molécule en question. Pour ce faire, nous considérons la molécule nucléaire comme un traceur. Le processus responsable du déplacement du traceur est la diffusion moléculaire. Les paramètres physiques adoptés sont regroupés dans le tableau 4.3 :

Tableau 4. 3: Paramètres physiques du dôme de sel

Perméabilité	$K = 1.10^{-17} \text{ m}^2$
Porosité	$\Phi = 0,02$
Dispersivité longitudinal	$\alpha_L = 0 \text{ m}$
Dispersivité transversale	$\alpha_T = 0 \text{ m}$
Diffusion	$D = 2,78 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$

Le traceur se diffuse d'une manière régulière au sein du dôme. Sous l'effet de la diffusion pure, la molécule atteindra la surface du dôme et après elle quittera le domaine (Figure 4.16). Nous nous sommes intéressés au temps nécessaire pour que le traceur puisse atteindre la surface du dôme. Pour une diffusion de  $2.78 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$  le temps calculé est de l'ordre de 2100 ans. Cette valeur a été confirmée par un calcul analytique en résolvant l'équation de diffusion pure.

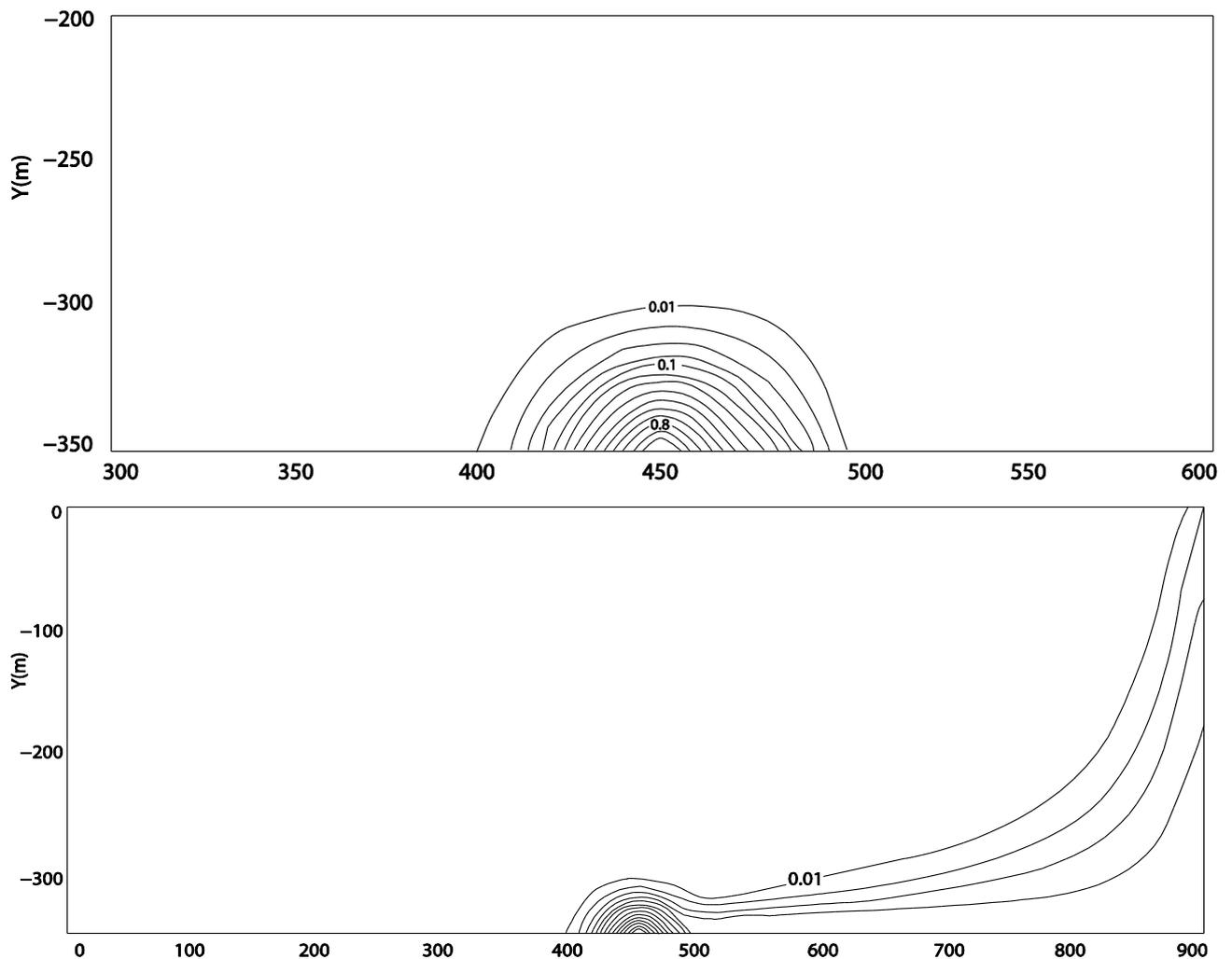


Figure 4. 16: Diffusion du traceur dans le dôme

La faible perméabilité et porosité du dôme de sel, la différence de dimension entre le diamètre du dôme et la molécule sont des arguments qui peuvent justifier le choix de la solution analytique de la diffusion pure, coefficient de diffusion constant, dans un domaine semi-infini. La solution pour un domaine semi-infini, sous la condition initiale  $C=C_i$  dans tout le domaine et la condition aux limites  $C=C_0$  à l'extrémité du domaine est :

$$\frac{C_0 - C}{C_0 - C_i} = \text{erf}\left(\frac{|x|}{2\sqrt{Dt}}\right) \tag{4.13}$$

Avec

X est la longueur du domaine (Rayon du dôme)

D coefficient de diffusion moléculaire

Le temps calculé analytiquement est égal à 2200 ans. Ce temps dépend essentiellement du coefficient de diffusion. Les molécules radioactives sont des molécules lourdes, pour cela nous avons effectué des estimations du temps pour différentes valeurs de diffusion (tableau4.4)

**Tableau 4. 4:Temps de migration du traceur dans le dôme**

<b>Diffusion D (m<sup>2</sup>/s)</b>	2,78 10 <sup>-9</sup>	1,39 10 <sup>-9</sup>	1 10 <sup>-10</sup>	1 10 <sup>-11</sup>
<b>Temps calculé numériquement (année)</b>	2106	4212	58 110	581 100
<b>Temps calculé analytiquement (année)</b>	2200	4400.6	61 168.5	611 685.8

## 6. Conclusion :

Le Problème de dôme de sel est l'une des applications hydrogéologiques les plus intéressantes, vu son utilisation pour le confinement des déchets nucléaires. Ce phénomène est caractérisé par une grande complexité non seulement à cause de son processus de formation complexe, mais aussi de la forte non-linéarité des équations qui gouvernent ce problème. La roche qui forme le dôme ne peut pas être considérée comme imperméable. Les résultats obtenus avec le code GEODENS sont en parfait accord avec les travaux antérieurs effectués sur ce problème. La porosité du dôme se multiplie par 4.5 fois pour une simulation de 10 000 ans. Pour cette même durée, la couche supérieure de dôme perd 50 % de la quantité de sel emmagasiné dans ses pores. Le processus de dissolution est assez lent, mais nous avons prouvé qu'il ne peut pas être négligé. Le scénario de l'accident de stockage proposé estime

que la molécule nucléaire peut s'échapper du dôme dans une durée de 2200 ans. Cette estimation est basée uniquement sur le processus de diffusion et ne prend pas en considération l'existence des circulations des eaux dues à l'augmentation de la perméabilité à cause du processus de dissolution.

## Chapitre.V.

### Evaporation d'une Lagune du domaine marin

## 1. Introduction

Les régions arides et semi-arides sont caractérisées par de faibles dépressions topographiques appelées sebkha, chott, lagune, etc., en fonction de la typologie précise et de la langue pratiquée dans la région (Perthuisot, 1975; Yechieli, et al., 2002). Ces dépressions sont des indicateurs du climat local et contiennent des données sédimentologiques et géochimiques de la région (Eugster, 1980). Leur genèse et leur existence sont liées à une situation climatique où l'évapotranspiration potentielle dépasse largement les précipitations. De ce fait, les lagunes constituent un outil utile pour déterminer l'histoire des paléoclimats (Rosen, 1994). Elles sont aussi à l'origine de ressources minérales importantes (Yechieli, et al., 2002), comme la croûte de gypse (Watson, 1985), l'halite (Pakzad, et al., 2004), le natron (Dotsika, et al., 2009), le lithium (Schmidt, 2010) et le mirabilite (Last, 1989; Nasri, et al., 2015).

La Tunisie est un pays caractérisé par un climat aride qui favorise la formation de ces environnements salins. Les plus importants sont Chott El Jerid, Sebkha El Adhibète, Sebkha Oum El Khilate et Sebkha El Melah. En effet, ils ne représentent pas seulement les plus grands réservoirs de sels et de saumures en Tunisie (M'nif, et al., 2004), mais ils étaient aussi l'objet de plusieurs études dont certaines se concentrent sur la sédimentologie et les isotopes (Perthuisot, 1974), y compris la géochimie et l'utilisation de données de télédétection (Bryant, 1993), la recherche paléoclimatique (Rosen, 1989; Smykatz, et al., 2010), les ressources minérales économiques (Wood, et al., 1990), les indicateurs paléohydrologiques (Teller, et al., 1990), le stockage des déchets nucléaires (Bouhlila, 1999) ainsi que leur durée de vie microbienne comme marqueurs morphologiques (Lakhdar, et al., 2006; Stivaletta, et al., 2009).

Les processus physiques, géochimiques et biochimiques qui gouvernent ces dépressions salines sont très complexes et différent entre les sebkhas continentales, qui ne communiquent pas avec la mer et qui concentrent les sels des eaux continentales et celles liées au domaine marin. Ces dernières sont souvent, d'anciennes lagunes, comblées par des sédiments déposés par la mer puis les sels apparaissent par évaporation. Parmi les plus importantes des sebkhas liées au domaine marin, nous comptons Sebkhat El Malah de Zarzis. Cette sebkha a fait l'objet de plusieurs travaux miniers et de recherche, on en cite le plus important en 1967 mené par l'Office National des Mines de Tunisie qui a effectué une reconnaissance complète consignée dans le rapport de Floridia (1971). Cette campagne a permis d'avancer un modèle de genèse de cette sebkha suite aux dépôts des sels par évaporation de l'eau de mer

(Perthuisot, 1975) et a été aussi la référence pour le développement d'outils numériques afin de prédire l'hydrodynamique, le transport et la géochimie de ce bassin (Bouhlila, 1999).

Dans ce chapitre, nous nous servons de la configuration de sebkha El Maleh comme modèle physique afin de reprendre de façon quantitative le schéma de genèse des Sebkhias d'origine marine. Nous nous proposons de reproduire à l'aide du modèle numérique développé dans ce travail, un schéma simplifié et représentatif d'une sebkha.

## 2. Sebkhias El Maleh

Le mot «sebkha» est par définition un fond plat et salé d'une dépression fermée, généralement inondable et sans végétation (Perthuisot, 1975). C'est le cas de la Sebkhia El Melah qui est située à 60 km de la frontière Libyenne et à 150 km de Gabès, caractérisée par une surface parfaitement plane de superficie  $150 \text{ km}^2$  et qui se situe légèrement au-dessous du niveau de la mer (figure 5.1). Elle est alimentée par l'eau de mer par un chenal asséché de 6 km de long et 1 km de large.

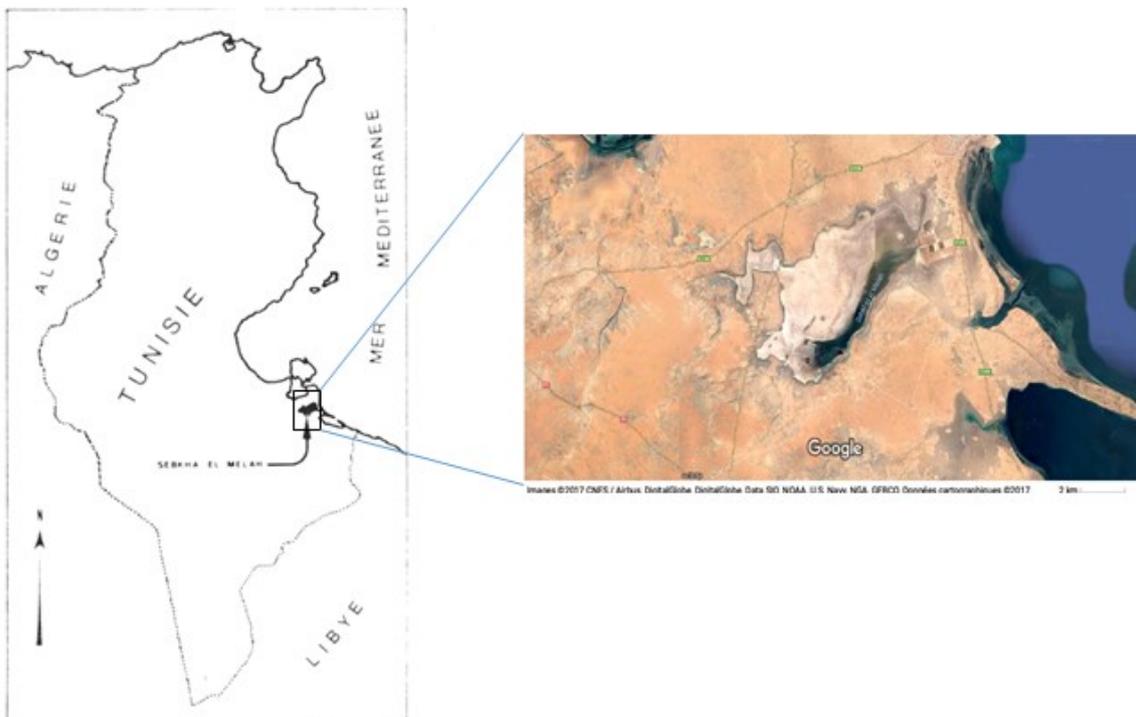


Figure 5.1 : Localisation de sebkha EL Maleh

### 2.1. Progression des recherches, morphologie générale et historique de formation

L'étude scientifique de la sebkha El Maleh fit son apparition avec la Première Guerre mondiale et avait pour objectif la production de brome et de potasse utilisés comme engrais (Perthuisot, 1981). C'est en 1931 qu'est apparu le premier travail de synthèse dans le but de comprendre l'origine, marine ou continentale, du potassium et d'établir les connexions de la Sebkha avec son environnement marin, continental et géologique. En 1950, Milokhoff et Aubry émettent une hypothèse sur l'existence d'un dôme de sel au-dessous de cette Sebkha. Les résultats de leurs travaux apparaissent divergents et même contradictoires sur l'origine de la formation des sels de la sebkha.

Dans le but de statuer définitivement sur le potentiel minier et économique de sebkha el Maleh, l'Office National des Mines de Tunisie et la Société de Mise en valeur du Sud décident de reprendre le problème et d'entreprendre des études exhaustives. Il a été réalisé plus de 428 m de sondages géotechniques, 426 m de sondages lithologiques, 450 m de sondages hydrogéologiques et de piézomètres, complétés par des études et des analyses chimiques des saumures et des carottes. Les résultats de ces essais ont abouti à une reconstitution de l'histoire géologique et géochimique de la Sebkha, la description des processus de précipitation des sels, la précision de l'origine des saumures et leurs possibilités de renouvellement ( (Perthuisot, 1974; Perthuisot, 1975) .

D'après ces travaux la morphologie générale de la Sebkha a été établie en confirmant que c'est une dépression à fond plat de 20 km sur 8 km, d'axe Nord Est- Sud Ouest. Elle est caractérisée par une très légère baisse vers son centre jusqu'à une cote de -1 m. Un chenal asséché de 6 km de longueur et de 1 km de largeur la relie au bras de mer de Bahar Alouane avec une pente totale de 1m. Un talus entaillant les argiles gypseuses rouges du substratum marque les limites topographiques et géologiques de la Sebkha. Une formation calcaire, au-dessus des argiles, ferme le bassin du côté mer sur toute sa profondeur et sa largeur.

La Sebkha correspond au remplissage par une succession des séries, Flandrienne marine, lagunaire puis évaporitique, d'une cuvette creusée sur près de 40 m de profondeur dans les terrains argileux gypseux du miopliocène. Au-dessus du substratum il existe une formation détritique à galets, graviers et sables grossiers de 2 à 7 m d'épaisseur. Elle est surplombée par une série carbonatée détritique qui n'a que quelques mètres de puissance dans la Sebkha et plusieurs mètres en dehors, du côté mer. Cette formation calcaire se présente sur plus de 8 km de large du côté nord-est de la Sebkha (Bouhlila, 1999). Le chenal est comblé

par la série carbonatée et détritique, argileux dans sa partie inférieure et sableux dans sa partie supérieure.

La genèse de cette sebkha a connu plusieurs étapes, elle a commencé pendant la plus grande partie du Quaternaire au gré des changements climatiques et des mouvements du niveau de la mer. Le creusement fluvial du bassin a été effectué au début de la période würmienne. Vers 40.000 B.P., une première transgression l'envahit et un seuil s'édifie au milieu de l'actuel chenal. Les arrivées d'eaux douces engendrent un fort dessalement, d'où la formation d'une lagune. L'eau de mer influence principalement la région du chenal (Fontes, et al., 1971). Après, la mer se retire et le bassin évolue temporairement en lac. L'édification du seuil topographique de Bahar Alouane, l'aridification du climat et la transgression flandrienne qui a envahi à nouveau le bassin vers 8000 ans B.P. provoquent l'évolution du lac temporaire en un bassin évaporitique. La lagune, topographiquement isolée de la mer, est alimentée par celle-ci en sous-écoulements à travers la série carbonatée du côté mer, y compris le chenal de Bahar Alouane. Des séquences salines, d'abord gypseuses puis hyalines, prennent lieu. En effet, ces deux séquences sont schématiquement emboîtées l'une dans l'autre et affleurent sous forme d'auréoles concentriques sur la surface de la Sebkha (figure 5.2).

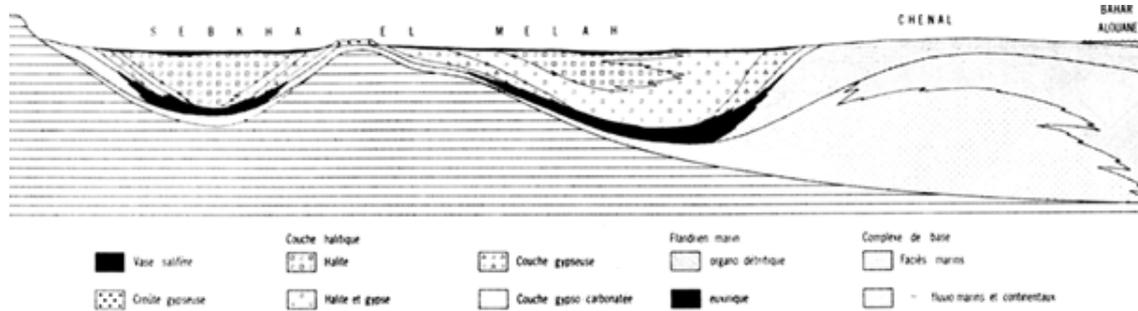


Figure 5.2 : Coupe schématique de la Sebkha El Maleh (Fontes, et al., 1971).

En se basant sur les résultats de la campagne géotechnique, Folridia (1971) et Perthuisot (1975) affirment qu'après la phase de cristallisation des carbonates, qui tapissent le fond de la lagune, les sels (gypse puis halite) commencent à se déposer. En effet, la précipitation du gypse intervient une fois que la salinité dépasse le double de celle de l'eau de mer. La précipitation de l'halite n'a lieu que lorsque les concentrations varient entre 12 fois et 63 fois celle de l'eau de mer. L'existence des faibles quantités de sels de potassium, de magnésium et de polyhalite prouve que la salinité a localement dépassé 70 fois celle de l'eau de mer et que la masse volumique de la saumure atteint, par endroit, les 1400 kg/m<sup>3</sup> ..

## 2.2. Description du remplissage de la sebkha

Les séquences des sels existants dans la sebkha sont au nombre de deux : la première c'est le gypse et la deuxième est l'halite. En regardant le schéma de remplissage de la sebkha (figure 5.2 ; 5.3), nous remarquons que le gypse disparaît au centre et qu'il est moins présent dans la partie éloignée de la mer. Cette disparition a été expliquée par l'existence d'une forte activité bactérienne réductrice vers le centre, à la base de la sebkha, et par la dissymétrie des séquences loin de la source d'alimentation en eau de mer. Floridia (1971) et Perthuisot (1975) montrent que le substratum miopliocène n'a pas été détecté au-delà de 35 m de profondeur, c'est-à-dire au-delà de la profondeur de l'ancienne lagune (Bouhlila, 1999). Une rectification de la profondeur de la couche organo-détritique au niveau du chenal qui relie la sebkha à la mer nous est apparue donc essentielle.

La morphologie interne des couches évaporitiques est caractérisée par une forte homogénéité de la couche d'halite. Cette configuration ne peut avoir lieu qu'avec une alimentation continue de l'eau de mer, sans apport d'eaux continentales ni apports sporadiques par submersion d'eau marine. Cette hypothèse est aussi prouvée par l'affleurement des couches salines à une cote négative par rapport au niveau de la mer. À cet effet et en tenant compte de la configuration géologique du bassin, comportant à la base une couche détritique continue de la mer jusque dans tout le bassin à travers le chenal, il est confirmé que le bassin est alimenté en continu par un écoulement de la mer à travers les sédiments du chenal et les formations littorales calcaires. Cette alimentation est motivée par la demande évaporatoire dans ce système.

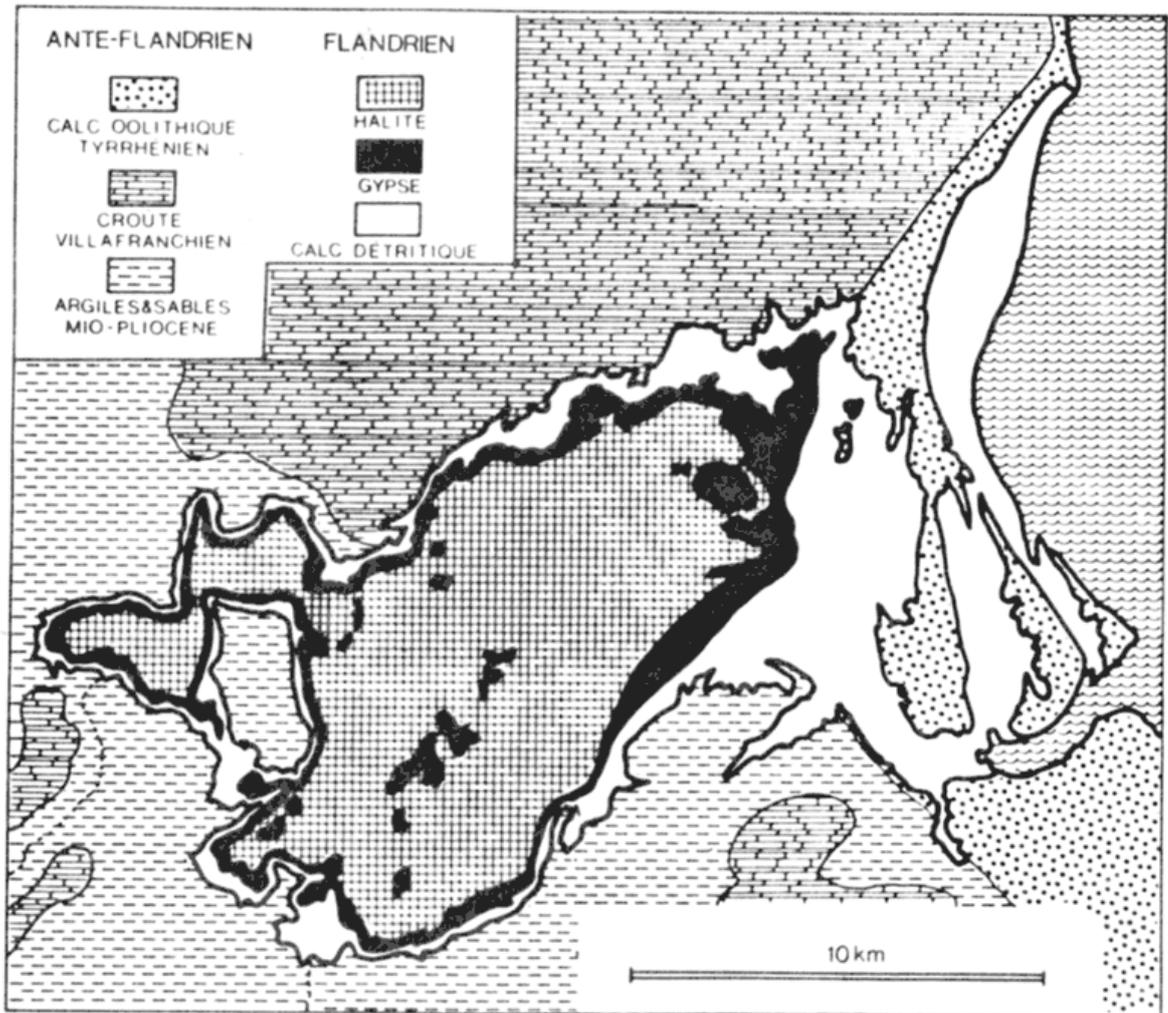


Figure 5.3 : Coupe de remplissage de Sebkhât EL Maleh (Perthuisot, 1975)

### 3. Formation des sels et des saumures

#### 3.1. Les sels

La couche d'halite, homogène sur plus de 10 m de puissance moyenne, est étalée sur deux entités distinctes le long de l'axe longitudinal, Nord Est - Sud-Ouest de la Sebkhâ. Le sel gemme existant est composé à 85 à 90% en masse de NaCl et à 10 à 15% de gypse en plus de quelques fractions de sels de potassium, de magnésium, de la polyhalite et de la Sylvite. Il est caractérisé par une porosité moyenne de 0.39 et une perméabilité intrinsèque de  $10^{-11} \text{ m}^2$ . La deuxième couche de sel est celle de gypse, cette couche est caractérisée par une épaisseur de 3 à 4 m sur l'ensemble de la sebkhâ. Elle disparaît vers la partie centrale où elle est remplacée par un vase gypsifère et carbonatée. Le gypse est peu présent dans les parties les plus éloignées par rapport à la mer. Il ne s'agit pas donc d'une configuration homogène, mais d'un niveau constitué de gypse, de carbonates, mélangés généralement avec les argiles, le sable et

les galets du fond de la lagune. Cette composition a engendré une perméabilité très variable de  $10^{-12}$  à  $10^{-15} \text{ m}^2$  et une porosité moyenne de 0.38.

**3.2. Les saumures**

En se basant sur les résultats de nombreuses analyses chimiques, en différents points et à différents niveaux établis par Floridia (1971), Bouhlila (1999) a établi, en utilisant son code géochimique, les compositions moyennes ainsi que la masse volumique dans chacun des deux aquifères principaux du système (gypseux et halitique). Les résultats sont reportés sur les tableaux (5.1, 5.2, 5.3, 5.4 et 5.5). Il est constaté que, pour les deux niveaux, les saumures sont sursaturées en gypse et en anhydrite. Mais l'indice de saturation de l'halite est très faible dans la couche gypseuse, alors qu'il est proche de la saturation, dans le niveau d'halite.

**Tableau 5.1 : Concentrations moyennes en ions majeurs et masse volumique des eaux des nappes gypseuse et halitique, d'après Floridia (1971) (Bouhlila, 1999)**

	Na <sup>+</sup> (g/l)	K <sup>+</sup> (g/l)	Mg <sup>++</sup> (g/l)	Ca <sup>++</sup> (g/l)	Cl <sup>-</sup> (g/l)	SO <sub>4</sub> <sup>-</sup> (g/l)	Masse vol. kg/m <sup>3</sup>
<b>Nappe gypseuse</b>	57,5	3,4	19,0	1,4	137,1	14,8	1155,2
<b>Nappe halitique</b>	45,3	7,7	49,9	0,43	201,6	28,2	1225,8

**Tableau 5.2 : Le coefficient d'activité  $\gamma$  et la molalité des ions majeurs de la nappe dans la couche gypseuse**

Espèce	$\gamma$	molalité	C (g/Kg)
Na <sup>+</sup>	0,698	2,713	49,773
K <sup>+</sup>	0,394	0,094	2,943
Mg <sup>++</sup>	0,551	0,848	16,447
Ca <sup>++</sup>	0,322	0,038	1,212
Cl <sup>-</sup>	1,189	4,194	118,677
SO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	0,030	0,167	12,811

**Tableau 5.3 : Les indices de saturation des sels dans l'eau de la nappe de la couche gypseuse**

Sels	Indice de saturation
Gypse	1,733
Anhydrite	1,425
Glaubérite	0,229
Halite	0,254

**Tableau 5.4 : Le coefficient d'activité  $\gamma$  et la molalité des ions majeurs de la nappe dans la couche haline**

Espèce	$\gamma$	molalité	C (g/Kg)
<b>Na<sup>+</sup></b>	0,817	2,207	36,954
<b>K<sup>+</sup></b>	0,284	0,221	6,281
<b>Mg<sup>++</sup></b>	1,476	2,299	40,707
<b>Ca<sup>++</sup></b>	0,558	0,012	0,351
<b>Cl<sup>-</sup></b>	2,883	6,370	164,458
<b>SO4<sup>-</sup></b>	0,042	0,329	23,005

**Tableau 5.5 : Les indices de saturation des sels dans l'eau de la nappe de la couche haline**

Sels	Indice de saturation
Gypse	2,143
Anhydrite	1,810
Halite	0,885
Glaubérite	0,859
Halite	0,593

#### 4. Les échelles d'espace et de temps

La quantité d'halite existante dans la sebkha est de  $1200 \cdot 10^6$  tonnes. Elle est âgée d'environ 6000 ans (Perthuisot, 1975). La configuration actuelle de la Sebkha est estimée en phase d'équilibre ou de fossilisation. Sauf que nous ne disposons pas d'indice sur la durée ou le début de cette phase. Nous sommes donc devant une absence de la durée des processus de précipitation des sels dans la Sebkha. Sachant qu'un litre d'eau de mer de la Méditerranée qui s'évapore jusqu'à un facteur de concentration de 62 en conditions normales de pression et de température dépose 27g d'halite environ, dans le but d'estimer une durée du processus de l'évaporation et en tenant compte du volume de la sebkha, nous pouvons déduire que la Sebkha s'est remplie de sels suite à l'évaporation de  $4.44 \cdot 10^{10}$  m<sup>3</sup> d'eau de mer. Ce volume correspond à 300 m de hauteur d'eau évaporée ce qui revient à l'équivalent de 0.05 m<sup>3</sup>/m<sup>2</sup> /an ou m/an pour une durée de processus de précipitation de 6000 ans. Soit un débit de la mer vers la lagune de 0.24 m<sup>3</sup>/s. C'est un débit d'évaporation très faible ou même non réaliste vu les caractéristiques climatiques de la région à cette époque. En considérant que la phase d'équilibre est de l'ordre de 600 ans, nous aboutissons à un flux évaporé moyen de 0.5 m/an soit un débit de la mer vers la lagune de 2.4 m<sup>3</sup>/s. Cette valeur s'avère plus réaliste compte tenu du niveau d'eau dans la lagune et dans la nappe de la Sebkha qui se constitue progressivement. Bouhlila (1999), à travers des simulations de l'évaporation de l'eau de mer à des facteurs de concentration de 60 à 70 et par analogie à la configuration actuelle de la Sebkha, a pu estimer que l'évaporation annuelle s'élève à 1.2 m/an pour 600 ans.

#### 5. Modèle adopté

Comme déjà démontré, notre problème consiste, initialement, en une lagune pleine d'eau de mer et saturée en saumures. Le dépôt de sel provient de l'évaporation qui induit une augmentation de la concentration des saumures. Cette évaporation peut être schématisée comme un flux d'eau pure sortant par la surface libre et qui laisse les solutés sur cette même surface. La circulation de l'eau dans la lagune est une conséquence directe de l'appel d'eau créé par l'évaporation qui engendre une entrée d'eau soit par le côté mer comme l'envisage Perthuisot (1975), soit par toute la base comme le décrit Bouhlila (1999) ou par le fond de la lagune.

Le vent est un facteur très important dans ce type de problèmes où le plan d'eau est peu profond, à cause de la création des phénomènes de turbulences et des vagues. Cela se traduit par un brassage de la saumure conduisant à des dispersions horizontales et verticales des

solutés qui peuvent être très importantes (Moussa, 1986). Dans ce travail nous souhaitons comprendre la circulation générale au sein de la lagune. La modélisation de ces phénomènes n'est pas notre objectif. La configuration retenue pour ce travail consiste en un milieu poreux à porosité maximale de 100% perturbé par une évaporation avec un débit relativement faible. Actuellement la Sebkhah est caractérisée par une porosité qui varie de 0.3 à 0.4 et par une différence moyenne de masse volumique entre la nappe gypseuse et la nappe halitique de  $70 \text{ kg/m}^3$ . Cette différence peut atteindre les  $300 \text{ kg/m}^3$  localement pour une hauteur totale de 10 m (Bouhlila, 1999). L'état actuel de la sebkha, en équilibre, est caractérisé par des densités vers le haut de la structure plus importante que celle du bas. La stabilité de cette configuration est expliquée par un faible nombre de Rayleigh qui se situe entre 17.5 et 75, malgré l'existence des phénomènes de concentration et de précipitation des sels qui peuvent engendrer une augmentation de ce paramètre. Ces valeurs correspondent à un coefficient de diffusion-dispersion de  $10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$  et une perméabilité représentative de tout le système de  $10^{-12} \text{ m}^2$ .

Les processus en jeux dans notre problème sont très complexes. En effet, la concentration des eaux suite à un flux évaporatoire important d'une part, la recirculation densitaire et la précipitation dissolution des sels évaporitiques d'autre part sont fortement couplées et non linéaires. Dans le but de comprendre la circulation générale et l'interaction de ces différents processus, la simulation de la lagune, avec ses dimensions réelles et sur toute la période de sa genèse n'est pas dans notre intérêt immédiat. Nous nous intéressons plutôt à des configurations simples et réduites à deux dimensions d'espace, la verticale et l'horizontale qui représente la distance au côté mer. Cette configuration reflète une coupe verticale le long de l'axe, très schématique, du bassin dans son état initial.

Les conditions initiales consistent en un état d'équilibre hydrostatique. L'évaporation est schématisée par un débit sortant d'eau pure sur toute la surface libre et un flux de soluté entrant correspondant aux sels laissés en place par l'eau évaporée. À ce flux d'eau sortant correspond un flux d'eau de mer entrant dans la lagune. Deux cas ont été retenus : soit que la lagune reçoit l'eau de mer d'un seul côté vertical, soit qu'elle la reçoit par sa base. Pour les deux cas, nous adoptons des flux imposés d'eau ou de solutés et aucune frontière n'est à concentrations imposées.

## 6. Cas d'un bassin parfaitement mélangé

### 6.1. Modèle conservatif Analytique

Les domaines évaporitiques sont caractérisés par de multiples échanges avec les milieux dont ils sont en contact direct. Nous présentons d'abord un modèle idéalement mixte similaire à celui présenté par Sanford et Wood (1991), nous formulons un bilan hydrique à l'état d'équilibre pour l'ensemble de l'aquifère comme suit :

$$Q_p - Q_e + Q_{in} - Q_{out} = 0 \quad (5.1)$$

Où  $Q_p$  est l'infiltration moyenne dans l'aquifère (pluviométrie moyenne moins le ruissellement de surface),  $Q_e$  est l'évaporation réelle,  $Q_{in}$  est l'eau souterraine s'écoulant dans l'aquifère et  $Q_{out}$  l'eau souterraine s'écoulant de l'aquifère. En adoptant un volume de l'eau dans l'aquifère  $V = Sb\phi$  ( $S$  est la surface de l'aquifère,  $b$  est l'épaisseur et  $\phi$  est la porosité) et en supposant que l'eau évaporée est pure avec des concentrations de solutés nulles, le bilan de masse transitoire de soluté s'écrit comme suit :

$$V \frac{dC}{dt} = Q_p C_p + Q_{in} C_{in} - Q_{out} C \quad (5.2)$$

Avec  $C$  est la concentration de l'eau dans l'aquifère,  $C_p$  et  $C_{in}$  sont, respectivement, la concentration d'eau infiltrée et entrante de l'aquifère. La solution de l'équation précédente peut être écrite sous la forme suivante :

$$C = C_{\infty} \left( 1 - \exp\left(-\frac{t}{t_{c_0}}\right) \right) + C_0 \exp\left(-\frac{t}{t_{c_0}}\right) \quad (5.3)$$

Où  $C_0$  est la concentration initiale et  $C_{\infty}$  est la concentration au régime permanent donné par :

$$C_{\infty} = \frac{Q_p C_p + Q_{in} C_{in}}{Q_{out}} \quad (5.4)$$

$t_{c_0}$  est un temps caractéristique défini comme suit :

$$t_{c_0} = \frac{V}{Q_{out}}$$

L'intérêt de ce modèle est qu'il peut décrire le Système évaporitique en utilisant seulement trois paramètres,  $C_0$ ,  $C_{in}$  et  $t_{c_0}$ . En négligeant la concentration de l'eau infiltrée  $C_p$  nous déduisons que le rapport entre les deux concentrations (initiale et celle du régime

permanent) est égal au rapport entre les deux flux entrant et sortant de l'aquifère ( $C_{\infty}/C_{in} = Q_{in}/Q_{out}$ ). En se référant à la partie précédente le débit infiltré pour notre zone d'étude est de l'ordre de 2,4 m<sup>3</sup>/s, sauf que le modèle analytique développé dépend essentiellement du rapport entre les deux flux entrant et sortant. Ce modèle, valable pour des faibles concentrations, est dit conservatif puisque la quantité d'eau infiltrée est toujours évacuée par évaporation et par un flux sortant, la configuration finale de concentration dépend essentiellement de ces deux flux infiltré et sortant (Sanford, et al., 1991). Le régime permanent est donc toujours atteint et ce rapport des flux est celui qui définit la vitesse du processus et le temps critique. La figure 5.4 représente les résultats de notre modèle pour plusieurs rapport entre le flux infiltré et celui sortant. Il est à noter que notre domaine est de 2 m<sup>2</sup> de surface avec une épaisseur de 1m et une porosité initiale égale à 1.

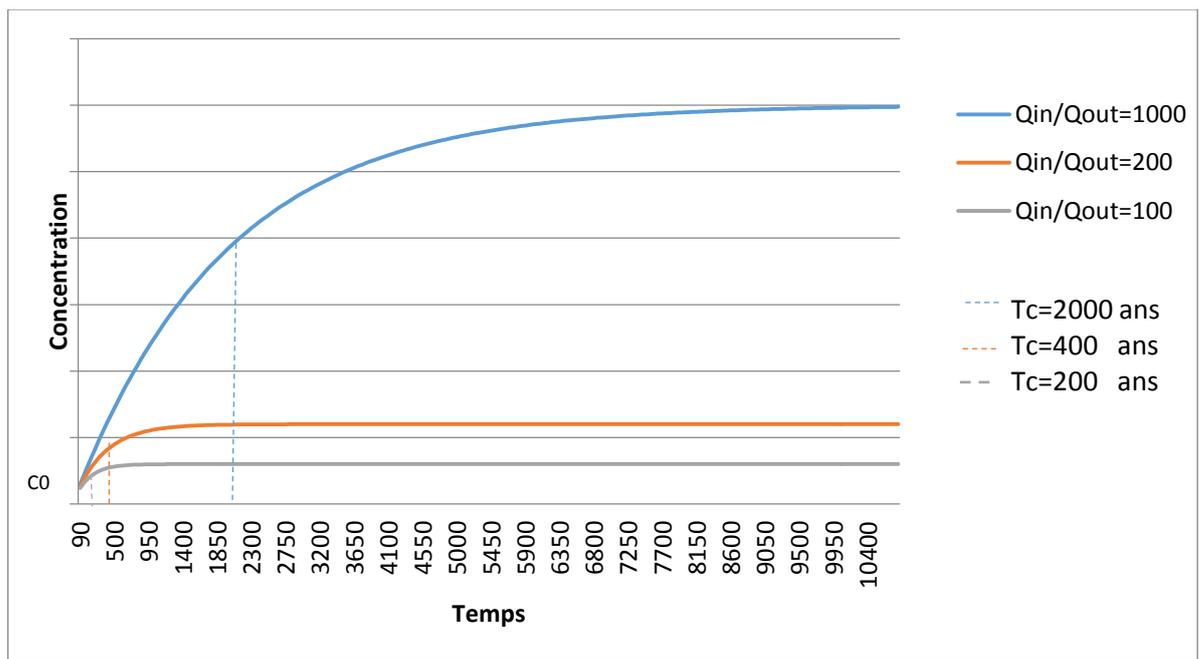


Figure 5.4 : solutions du modèle analytique pour plusieurs rapports entre les flux infiltrés et les flux sortants

Le temps critique varie de 200 ans pour un rapport de débit de 100 à 2000 ans pour un rapport de débit égal à 1000.

Dans le cas du problème réel, en l'absence d'un flux sortant, les complications sont d'un ordre différent. En effet, pour notre modèle de lagune, l'eau infiltrée ne sort que par

évaporation. Cette configuration influe directement sur la stabilité du problème puisque le régime permanent ne sera jamais atteint. Selon le modèle de Sanford and Wood (1991) notre problème n'est pas considéré comme conservatif et le temps critique  $t_{c_0}$  ne sera jamais atteint. Ce temps critique représente, numériquement, le début du régime permanent. Nous travaillons donc en continu dans un régime transitoire. En effet, pour rester dans le cadre du modèle de Sanford et Wood nous avons adopté un flux sortant négligeable devant celui infiltré.

## 6.2. Évaporation simulée d'une lagune du domaine marin

Dans le but de comprendre les phénomènes des précipitations et de formation des sels dans la lagune, nous avons repris le cas test, réalisé par Bouhlila (1999), qui consiste en un bassin homogène en l'absence du processus de convection saline. Pour y arriver, nous avons adopté un coefficient de diffusion-dispersion très important, de  $10^{-2} \text{ m}^2/\text{s}$ . Cette valeur garantit que les eaux se mélangent par rapport à la valeur du pas de temps, donc le côté d'entrée de l'eau de mer dans le bassin n'a aucune importance. Dans le but de garder le même ordre des dimensions que nous allons adopter, les dimensions adoptées de ce bassin sont fixées à 2m pour la largeur et 1m pour la profondeur avec un flux d'évaporation de 1 m/an. L'équilibre des réactions de dissolution ou précipitation est considéré atteint à chaque pas de temps puisque nous le prenons relativement long ( entre 10 et 100 jours).

Les séquences temporelles de sels déposées lors de la simulation de l'évaporation de cette saumure sont reportées sur la figure (5.6). Nous remarquons une apparition du gypse entre 6 et 11 ans de simulation (figure 5.5) avant de donner place ensuite à l'halite. En plus de ce sel qui précipite continuellement et en grandes quantités et dont une partie se transforme en polyhalite, la saumure produit successivement de l'anhydrite, de la Sylvite et de la carnallite. Les configurations données sont arrêtées à 72 ans, jusqu'à la solidification du domaine à une porosité de 0,4. Nous y notons que la masse d'halite précipitée à 72 ans pour 1m/ an d'évaporation est de  $988 \text{ kg/m}^3$ . Dans l'objectif de vérifier ces résultats et de valider nos hypothèses de modélisation, nous nous référons aux résultats établis par Bouhlila en 1999 pour le même flux d'évaporation (voir tableau 5.6).

Tableau 5.6 : Composition de la saumure et de la matrice solide à différents instants, pour un flux évaporé de 1m/an (Bouhlila, 1999)

T ( an)	Na <sup>+</sup>	K <sup>+</sup>	Mg <sup>++</sup>	Ca <sup>++</sup>	Cl <sup>-</sup>	SO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	ρ	φ	Anh	Gyp	Poly	Halit	Sylv	Carn
8	81,81	15,81	1,88	0,48	146,9	14,24	1198,7		0	8,372	0	0	0	0
16	101,5	29,42	3,51	0,101	205,1	11,02	1282,3	0,960	0	0	0	67,76	0	0
32	84,75	36,02	8,25	0,088	220,0	16,05	1309,9	0,810	0	0	4,132	333,2	33,40	0
72	59,47	21,23	10,92	0,407	318,7	4,16	1444,1	0,388	24,41	0	141,8	988,4	104,4	52,8

Les résultats trouvés sont en parfaite concordance avec ceux trouvés par Bouhlila (1999), en effet, à 72 ans la saumure est composée en premier lieu par de l’halite, Poly halite, Sylvite, Carnalite et en faible quantité par de l’Anhydrite, En regardant l’évolution au cours du temps, nous remarquons que le gypse apparaît vers 8 ans de simulation avec une quantité de 8 kg/m<sup>3</sup> puis il disparaît, Nous pouvons affirmer donc que les approximations que nous avons adoptées sont justifiées,

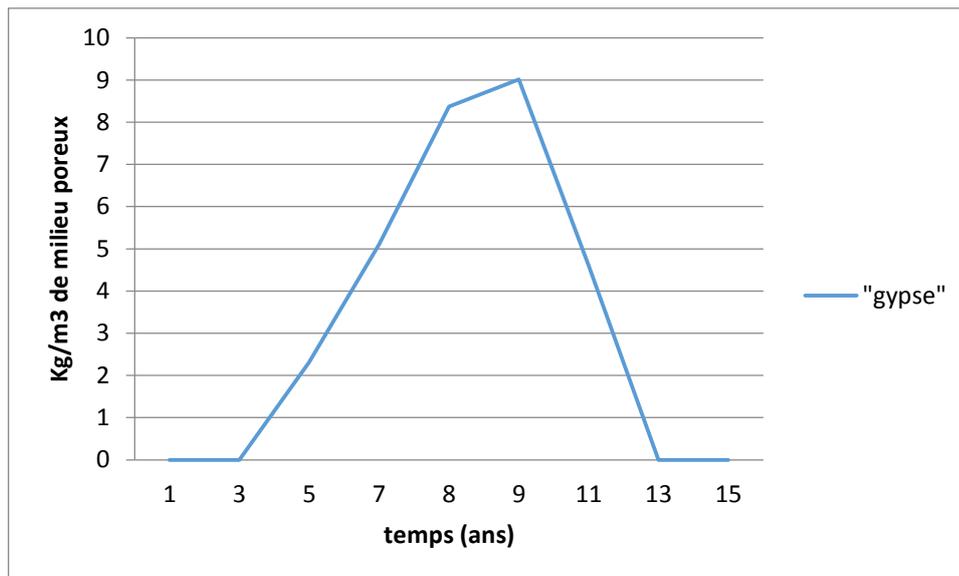


Figure 5,5 : Séquences temporelles de la précipitation du gypse lors de l'évaporation simulée d'une lagune du domaine marin soumise à un flux d'évaporation de 1 m/an

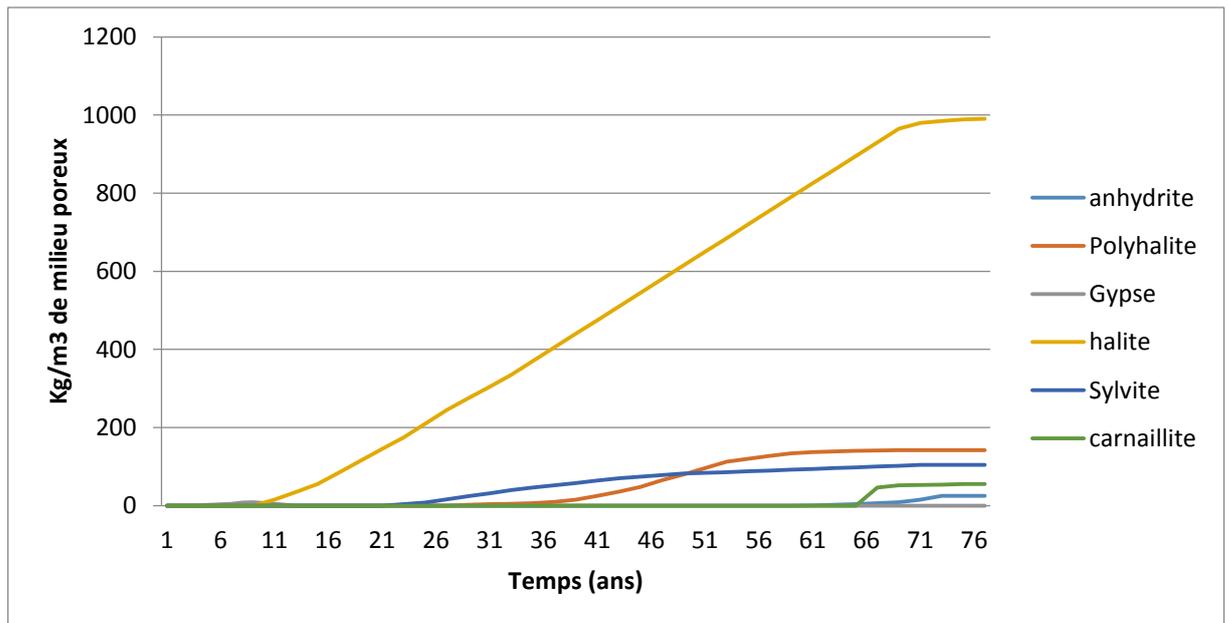


Figure 5,6 : Séquences temporelles de sels précipités lors de l'évaporation simulée d'une lagune du domaine marin soumise à un flux d'évaporation de 1 m/an

## 7. La genèse d'un bassin évaporitique

Dans cette partie nous considérons un coefficient de diffusion-dispersion relativement faible et réaliste, En effet, selon les descriptions, évoquées précédemment, de la composition de la lagune en gypse et en halite, nous remarquons que les saumures gypseuses correspondent à un stade peu évolué de l'eau de mer, Ces évolutions traduisent que ces saumures sont situées aux zones d'alimentation de la lagune en eau de mer, Les saumures dans l'halite sont plus évoluées, en effet il s'agit des niveaux d'évolution assez différents vu l'existence de gypse, de la polyhalite et de la sylvite, Les vitesses d'écoulement engendrées par l'évaporation et l'entrée de l'eau de mer sont très faibles, seule une diffusion-dispersion faible peut expliquer cette grande variabilité spatiale des concentrations,

L'objectif de ce travail étant la compréhension de la genèse d'une lagune d'origine marine, nous nous intéressons aux conditions d'entrée de l'eau de mer dans la lagune, Deux scénarios sont ainsi proposés suivant que l'eau de mer entre dans le domaine par le côté latéral ou bien par le fond,

### 7.1. L'entrée de l'eau de mer par le côté gauche

Le contact de l'eau de mer avec la lagune se fait à travers le côté gauche du domaine, Les simulations correspondantes donnent les résultats suivants :

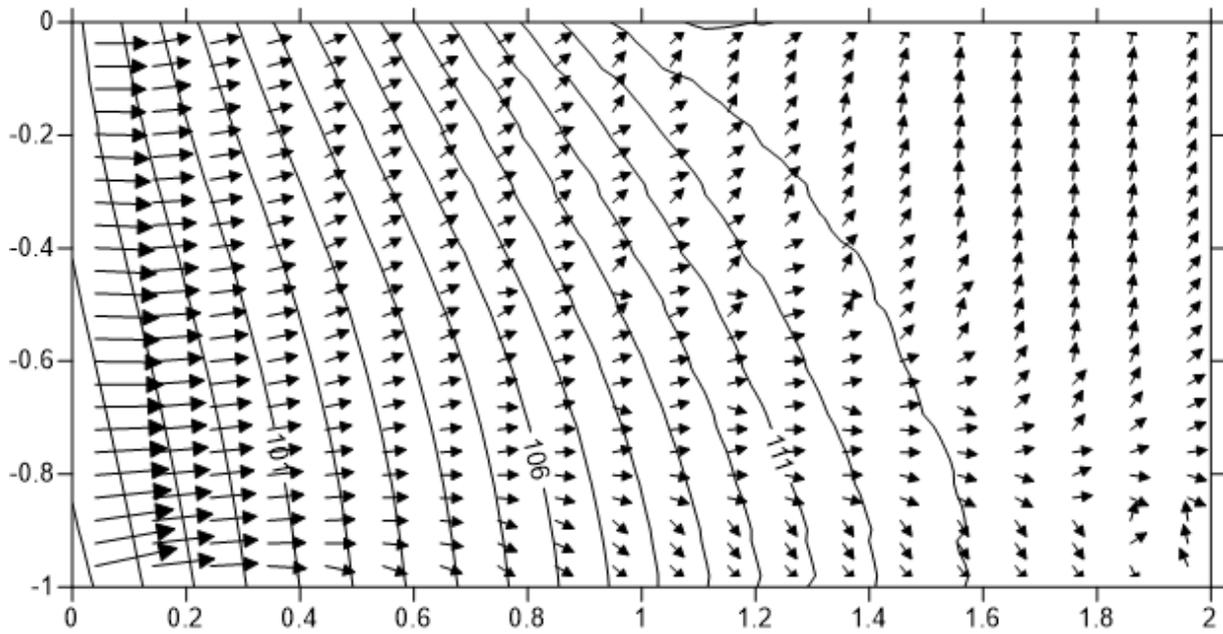


Figure 5,7 Champ de vitesses et isoconcentrations (g/kg de milieu poreux) de la saumure en Na+ à 120 ans ,

L'entrée de l'eau de mer se fait par le côté gauche et l'évaporation est de 1m/an

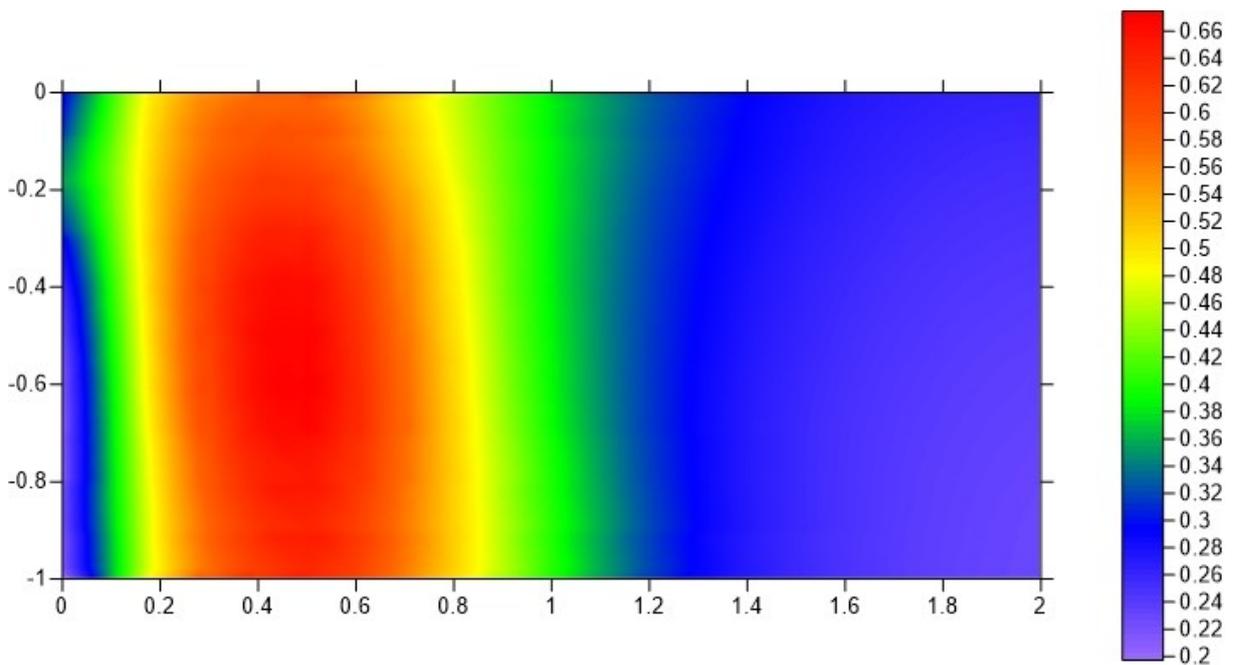
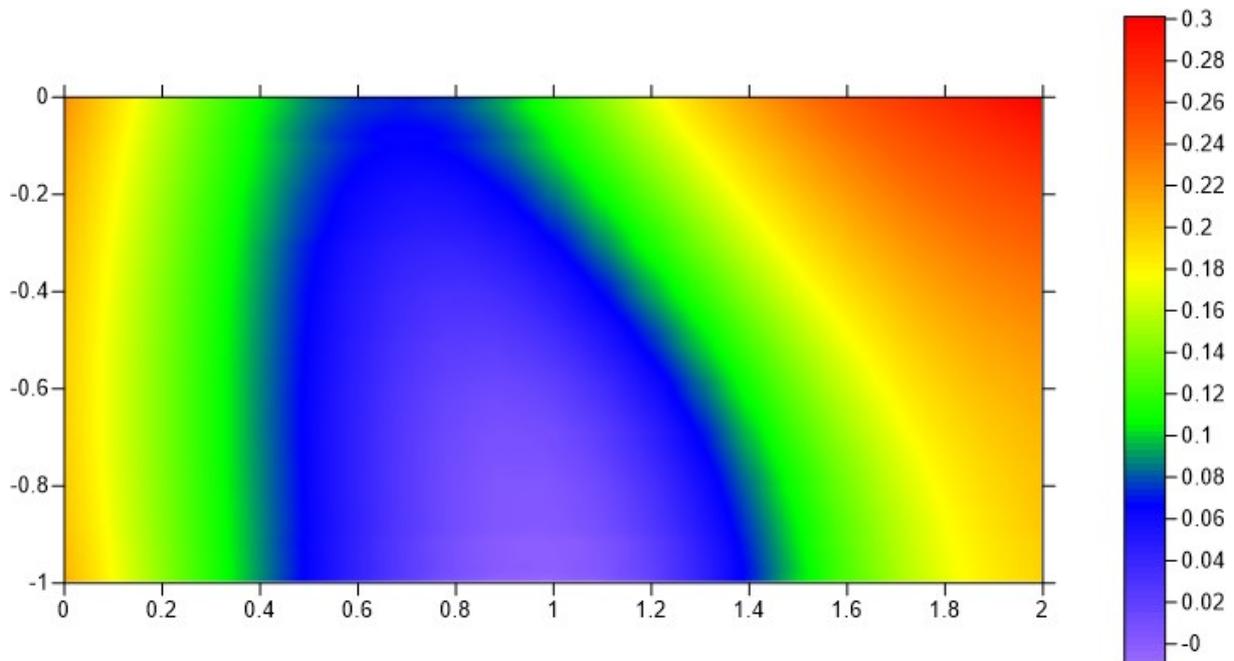
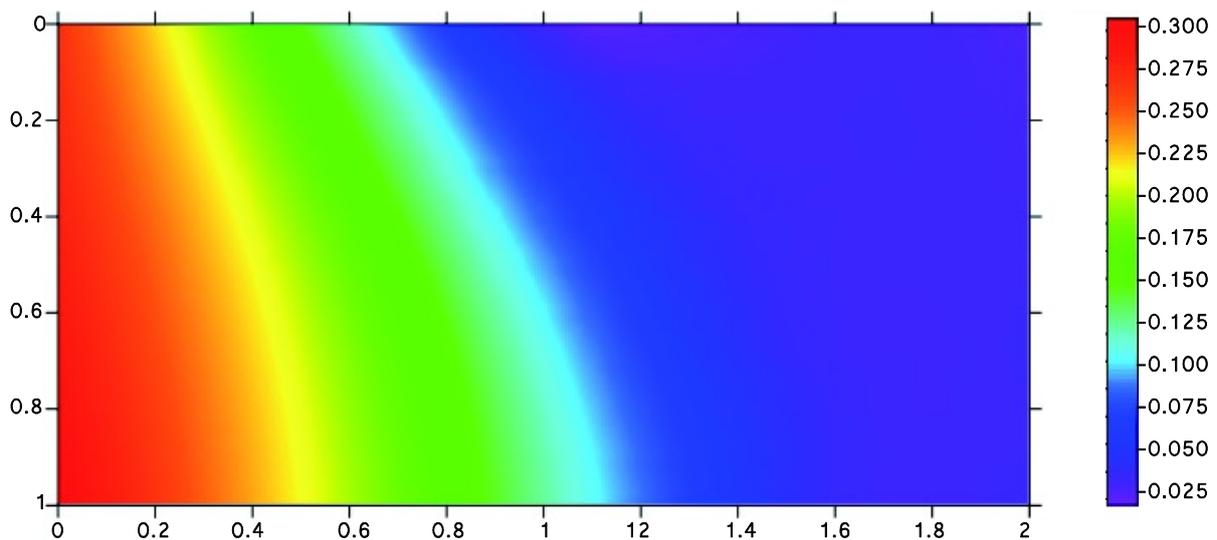


Figure 5,8: fraction massique (kg/kg de milieu poreux) d'halite dans la matrice solide à 120 ans,



**Figure 5,9: Fraction massique(kg/kg de milieu poreux) de gypse dans la matrice solide à 120 ans,**



**Figure 5,10 : Champs de porosité de la lagune à 120 ans**

La figure (5,7) montre le champ de vitesses superposé aux iso-concentrations en  $\text{Na}^+$ , A première vue nous remarquons une formation d'une cellule de champs de vitesse au côté droit du bassin, La figure (5,8) montre la répartition de la fraction massique de la Halite, La figure (5,9) montre la répartition de la fraction massique de gypse, Ces résultats correspondent à 120 ans d'évaporation à un taux de 1m/an avec un coefficient de diffusion de  $2,10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$  avec un pas de temps de calcul de 2 jours, Le temps de simulation choisit est de 120 ans, En

effet, la porosité pour cette période diminue jusqu'à 0,3 pour une grande partie du domaine (figure 5,10),

### 7.2. L'entrée de l'eau de mer par le bas

Pour ces simulations nous adoptons une alimentation verticale de la lagune par l'eau de mer, L'eau de mer entre par le bas du domaine et s'évapore par le côté supérieur à un flux de 1 m/an,

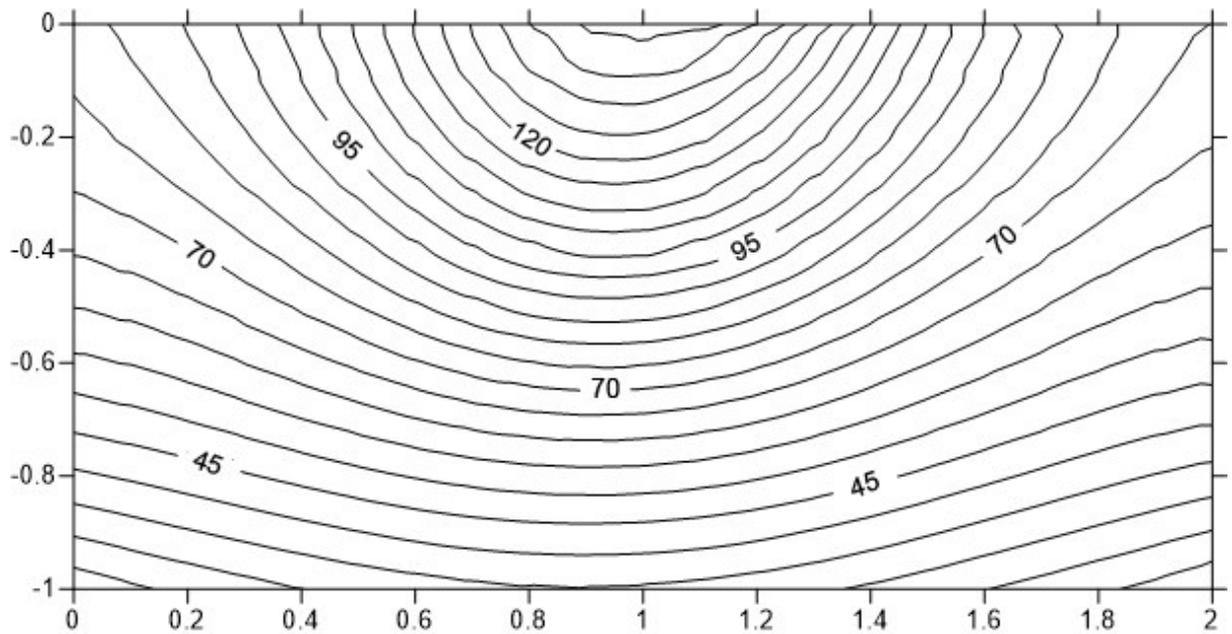
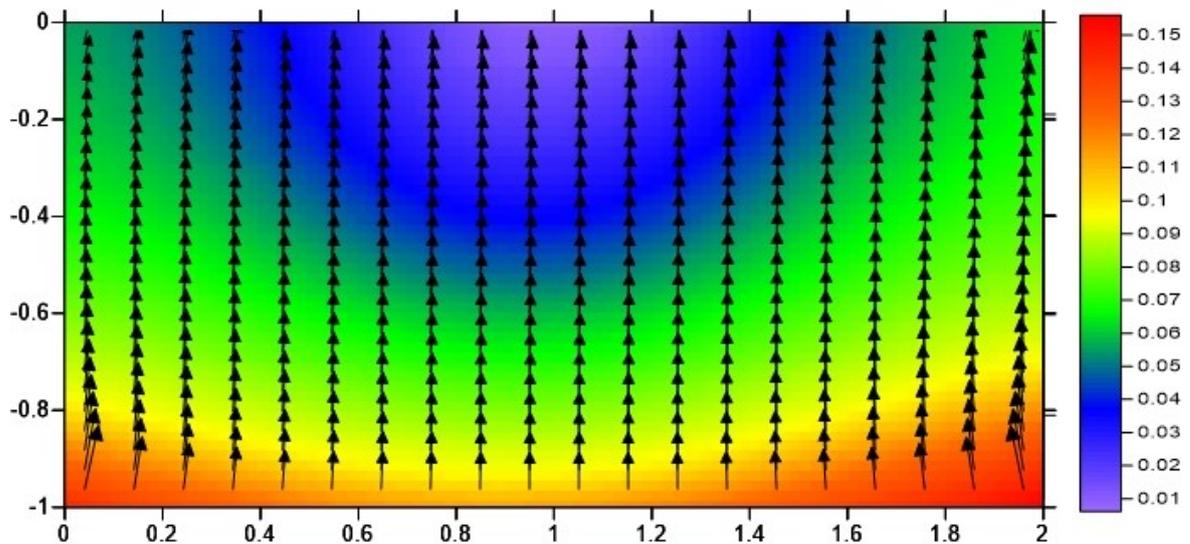


Figure 5,11 : Champ de vitesses et isoconcentrations (g/kg de milieu poreux) de la saumure en  $\text{Na}^+$  à 15 ans, L'entrée de l'eau de mer se fait par le côté inférieur et l'évaporation est de 1m/an



**Figure 5,12: Champs des vitesses et fraction massique de gypse (kg/kg de milieu poreux) dans la matrice solide à 15 ans,**

Les figures précédentes montrent les champs des iso concentrations et des vitesses pour le  $\text{Na}^+$  (figure 5,11) et la répartition des fractions de gypse (figure 5,12) à 15 ans de simulation,

Conformément au scénario de précipitation des sels (figure 5,6), le gypse disparaît pour donner place à l'halite qui précipite d'une manière continue, Les autres sels précipitent progressivement à des faibles quantités (figure 5,13 jusqu'à figure 5,17), Du point de vue des écoulements, si les mouvements ascendants des fluides suite à l'évaporation en surface sont de faibles intensités et pratiquement uniformes, les courants de convection due à la variabilité des densités dans le système, et qui s'y superposent dès que les gradients de concentrations le permettent, sont moins uniformes en direction et en intensité, En effet, le champ des vitesses reste vertical et uniforme jusqu'à 70 ans, À partir de cette date, le champ de concentration s'accroît vers le haut du bassin et crée une inversion du champ de vitesse, En effet, il s'installe un régime de convection stable engendrant la formation d'une cellule de Rayleigh,

Afin de trouver le profil le plus réaliste, nous avons mené une simulation jusqu'à l'obtention d'un champ de porosité inférieur à 0,3, Les variations temporelles des porosités et des perméabilités ne sont pas toujours dans le sens de la diminution puisque les domaines de précipitation et de dissolution des différents sels sont complexes

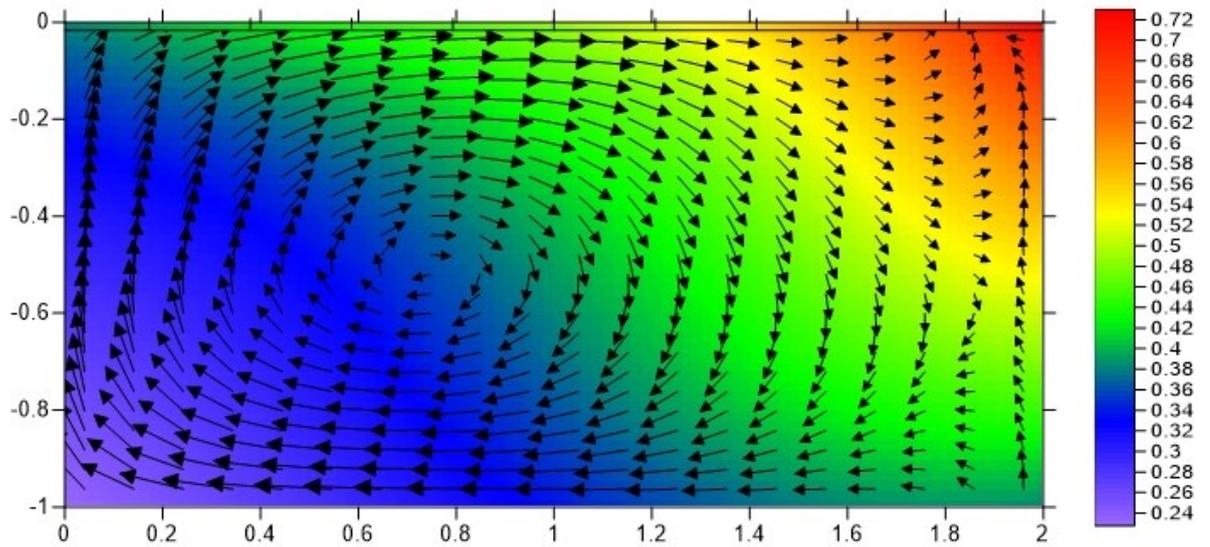


Figure 5,13 : Champs de vitesse et fraction massique(kg/kg de milieu poreux) de l'Halite à 100 ans

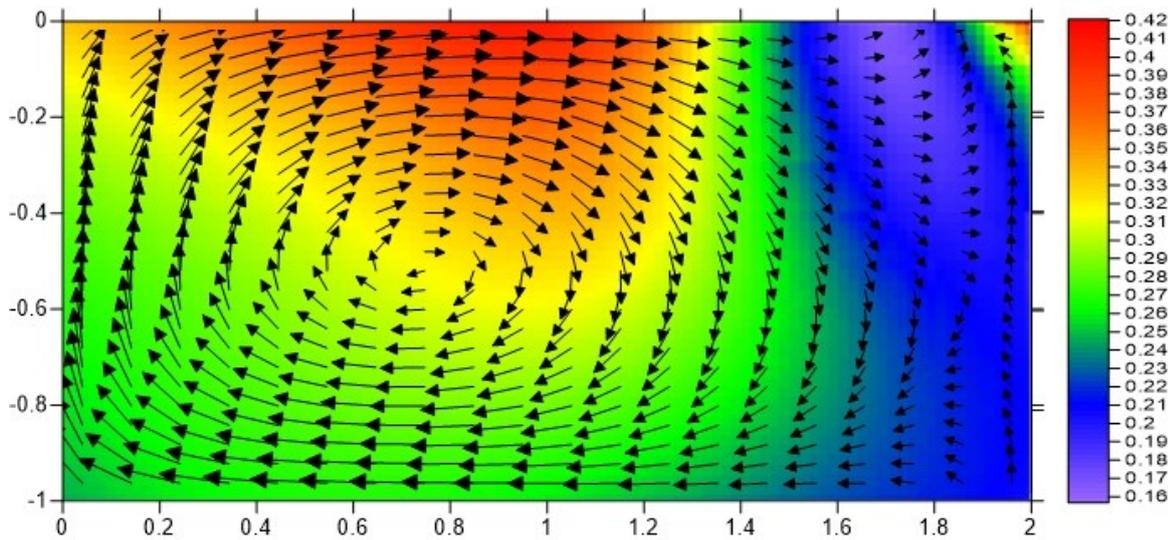
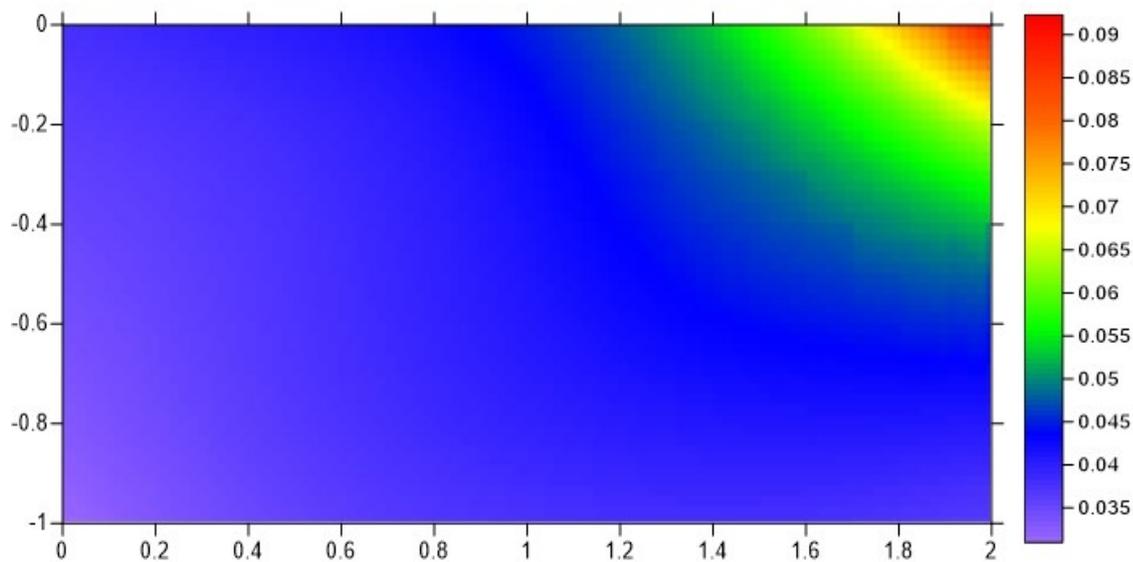
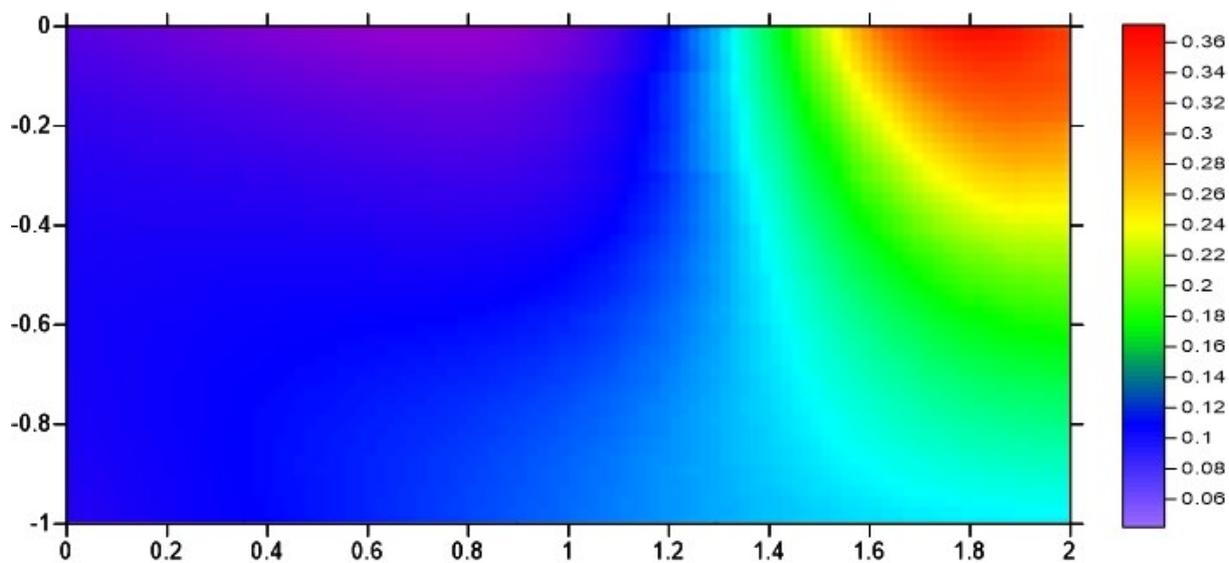


Figure 5,14 : Champs de vitesse et fraction massique (kg/kg de milieu poreux) du Polyhalite à 100 ans



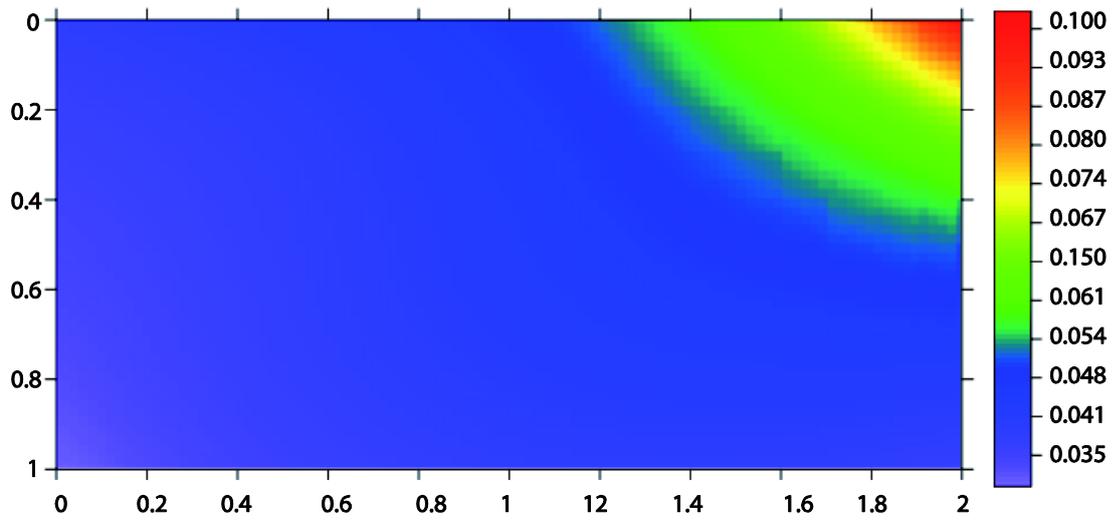


Figure 5,17 : fraction massique (kg/kg de milieu poreux) du carnallite à 100 ans

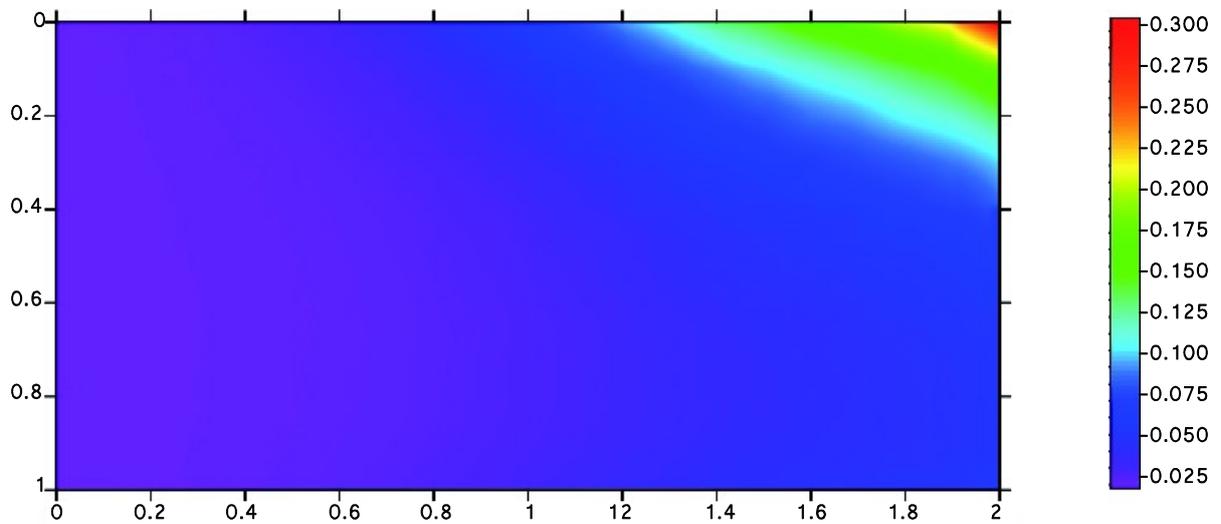


Figure 5,18 : Champs de Porosité à 100 ans

## 8. Conclusion

La genèse d'une sebkha suite à l'évaporation de l'eau de mer est caractérisée par des processus physiques et chimiques complexes qui engendrent des échelles d'espace et de temps très variés et différents, Le champ de vitesse, engendré par un mouvement ascendant dû à l'évaporation et des mouvements variables dus aux différences des densités, est très instable en direction et en intensité, Les mécanismes de précipitation et de dissolution des sels, à leur tour, accentuent les gradients des concentrations et donc la variation des écoulements, Malgré la complexité de reproduction de la genèse d'une sebkha, nous avons pu réaliser des approximations des conditions initiales et aux limites, Nous avons pu conclure que ce type de phénomène est très sensible au choix des conditions initiales, aux limites et à l'entrée de l'eau, Les scénarios d'entrée de l'eau de mer, même s'ils ne reflètent pas exactement la réalité des choses, inspirent les futures recherches à bien caler les conditions aux limites de ce type de phénomènes,

**Conclusion Générale**

À la suite d'une étude théorique bibliographique, les phénomènes de transfert réactifs engendrent une formulation mathématique où les équations de l'écoulement et du transport sont couplées et fortement non linéaires, Afin de résoudre ce problème, nous avons adopté une procédure aux éléments finis qui se base sur la méthode de Galerkin, combinée avec la forme convective de l'équation du transport et un schéma implicite en temps avec prédiction-correction, Dans l'étude de la géochimie des sels et des saumures, nous avons adopté un modèle géochimique qui permet de préciser la densité de la saumure, de caractériser son état d'équilibre vis-à-vis des différents sels et de calculer les quantités de sels dissous ou précipités au cours du temps, C'est le code SELSAUM qui se base sur le modèle de Pitzer, Le couplage des processus hydrodynamiques et de transport avec ceux de dissolution et de précipitations des sels se réalise à travers des relations entre le volume des sels et la porosité du milieu en tenant compte des flux géochimiques,

Le code dont nous disposons : GEODENS a montré plusieurs faiblesses numériques, Nous avons effectué de multiples améliorations sur le code tels que le changement de la méthode de stockage des matrices, l'utilisation de la bibliothèque de résolution UMFPACK qui comporte un solveur adapté au nouveau format de stockage 'sparse', Les changements ont aussi touché le schéma numérique où nous avons éliminé l'aspect itératif du schéma en gardant les mêmes normes de convergence, Tous ces changements ont garanti une amélioration du code en différents points nous en citons la réduction du temps de calcul CPU, l'augmentation de la capacité de maillage, la stabilité ... tout en gardant la même fiabilité physique des résultats,

Les performances numériques impressionnantes que nous avons eues suite aux améliorations apportées, nous ont permis d'utiliser cette version pour construire une version multi espèces, L'architecture numérique adoptée nous offre plusieurs avantages tels que la possibilité de changement des codes utilisés (chimique ou même physique), Elle garantit un temps de calcul minimal, en effet le temps de calcul dépend essentiellement des performances et nombres de processeurs de la machine, Elle nous permet de fixer le nombre de processeurs avec lesquels nous souhaitons simuler,

La nouvelle version nous offre la possibilité d'étudier plusieurs problèmes hydrogéologiques complexes, chose qui n'était pas garantie avec les versions antérieures, Le Problème de dôme de sel est l'une des applications hydrogéologiques les plus intéressantes, vu son utilisation pour le confinement des déchets nucléaires, Elle est aussi intéressante vu la complexité des phénomènes ayant lieu essentiellement lors de son processus de formation,

mais aussi vu la forte non-linéarité des équations qui gouvernent ce problème, Les résultats obtenus avec le code GEODENS sont en parfait accord avec les travaux antérieurs effectués sur ce problème, Mais nous avons simulé le cas où la roche qui forme le dôme n'est pas e considérée comme imperméable, La porosité du dôme est multipliée par 4,5 fois pour une simulation de 10 000 ans, Pour cette même durée, la couche supérieure de dôme perd 50 % de la quantité de sel emmagasiné dans ses pores, Le processus de dissolution est assez lent, mais nous avons prouvé qu'il ne peut pas être négligé, Le scénario de l'accident de stockage proposé estime que la molécule nucléaire peut s'échapper du dôme dans une durée de 2200 ans, Cette estimation est basée uniquement sur le processus de diffusion et ne prend pas en considération l'existence de circulations des eaux due à l'augmentation de la perméabilité à cause du processus de dissolution,

Comme deuxième application nous avons étudié la configuration hydrodynamique d'une lagune d'origine marine, Ce phénomène est caractérisée par une forte instabilité numérique vu le fort couplage entre les deux processus hydrodynamique et géochimique, En effet, cette application était un exercice pour évaluer les performances de notre code ainsi qu'une validation de nos résultats actuels par rapport aux travaux antérieurs, Nous avons aussi montré que la configuration actuelle de la sebkha dépend fortement de la zone d'infiltration de l'eau et que l'infiltration verticale (par le bas) est plus réaliste que celle par le côté,

## **Perspective**

Les premières perspectives de ce travail entrent dans le cadre du perfectionnement du code, En effet, les améliorations que nous proposons se divisent en deux catégories, La première est de prendre en considération les aspects thermiques auxquels les processus géochimiques sont très sensibles, et qui sont aussi nécessaires pour améliorer la description des différents phénomènes géochimiques, Le deuxième axe d'amélioration consiste à ajouter d'autres espèces chimiques, en particulier carbonatées, dans les modèles géochimique et hydrogéochimique, Ceci nous permettra de traiter des saumures diverses et d'étudier quantitativement ainsi que qualitativement l'évolution des milieux évaporitiques du domaine marin,

Un autre aspect de développement c'est le maintien des méthodes et des options numériques à jour, L'amélioration continue des modèles devient une nécessité pour pouvoir répondre aux besoins d'actualité dans le monde de la modélisation hydrogéologique, Enfin, le

passage à un modèle en trois dimensions représente aussi un grand défi et un objectif très intéressant à poursuivre,

## Bibliographie

- Dupays Isabelle [et al,]** Message Passing Interface [Book], - france : Institut du développement et des ressources en informatique scientifique, 2014,
- Ababou R, and Bagtzoglou A,C,** BIGFLOW: A numerical code for simulating flow in variably saturated, heterogeneous geologic media, Theory and user's manual, Version 1,1 [Report] : Technical Report / Nuclear Regulatory, - Washington : Government Printing Office, Washington D,C., U,S,A., 1993, - NUREG/CR--6028; CNWRA--92-026,
- Ackerer ph, YOUNES A and MOSE R** Modeling variable density flow and solute transport in porous medium:1 numerical model and verification [Journal] // Transport in porous media, - 1998, - Vol, 35, - pp, 345-373,
- Al bitar Ahmed** Modélisation des écoulements en milieu poreux hétérogènes 2D / 3D, avec couplages surface / souterrain et densitaires [Report] : thèse de doctorat, - Toulouse : INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE, 2007, - p, 157,
- Anderson Peter, Cunningham Colin J, and Barry D, A,** Gravimetric analysis of organic contamination in railway ballast [Journal] // Land Contamination & Reclamation, - 2000, - Vol, 08, - pp, 71-74,
- Atkinson K [et al,]** NAMMU user guide, [Report], - United Kingdom : AERE-R--11364; DOE-RW--85,065; ISBN 0-7058-1421-1; Worldcat; CONTRACT PECD-7/9/124-35/83; H,M, Stationery Office, London, 1985,
- Aufricht W, R., Howard, K, C** Salt Characteristics As They Affect Storage of Hydrocarbons [Journal] // Society of Petroleum Engineers,, - august 1961, - 08 : Vol, 13, - pp, 733-738,
- Babiker Insaf S [et al,]** Assessment of groundwater contamination by nitrate leaching from intensive vegetable cultivation using geographical information system [Journal] // Environment International, - 2004, - 08 : Vol, 29, - pp, 1009-1017,
- Bakker Mark, Farthing Matthew W, , Kees, Christopher E, and Woodward Carol S,** Editorial: Computational challenges in the solution of water resources problems [Journal] // Advances in Water Resources, - [s,l] : ELSEVIER, 2011, - 09 : Vol, 04, - pp, 1059–1061,
- Balk R,** Structure of Grand Saline Salt Dome, Van Zandt County, Texas [Book], - texas : The American Association Petroleum Geology bulletin, 1949, - Vol, 33 : 11 : pp, 1791-1829,
- Barton Donald C,** Mechanics of Formation of Salt Domes with Special Reference to Gulf Coast Salt Domes of Texas and Louisiana [Book], - [s,l] : The American Association of Petroleum Geologists, 1933, - Vol, 17 : 9 : pp, 1025-1083,

## **BEN REFIFA Marwen**

**Bea SA [et al,]** Geochemical and environmental controls on the genesis of soluble efflorescent salts in coastal mine tailings deposits: a discussion based on reactive transport modeling, [Journal] // Journal of Contaminant Hydrology, - 2009, - 1-4 : Vol, 111, - pp, 65-82,

**Bear J,** Dynamics of Fluids In Porous Media [Book] / ed, du Université, - Michigan : American Elsevier Publishing Company, 1972, - Vol, 01 : p, 764,

**Bear Jacob and Bachmat Y,** Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media [Book], - Netherlands : Springer , 1990, - Vol, 4 : pp, XXIV, 554,

**Bear Jacob, Zaslavskiï David Iosifovich and S, Irmay** Physical Principles of Water Percolation and Seepage [Book], - [s,l,] : Unesco, 1968, - Vol, 29 : p, 465,

**Beisman J,J, [et al,]** ParCrunchFlow: an efficient, parallel reactive transport simulation tool for physically and chemically heterogeneous saturated subsurface environments [Journal] // Computational Geosciences, - [s,l,] : Springer, 2015, - 02 : Vol, 19, - pp, 403–422,

**Beljin Milovan S, and van der Heijde Paul K, M,** Testing, Verification, and Validation of Two-Dimensional Solute Transport Models [Book], - Indiana, USA : Springer Netherlands, 1989, - pp, 121-137,

**Bird R,B,, STEWART E,, W, and LIGHTFOOT E N,** Transport phenomena [Book], - NEW YORK : Wiley International Edition, 1960, - p, 780,

**Bolton K,A,, Campbell V,M, and F,D, Burton** Chemical Analysis of Soils of Kowloon (Hong Kong) Eaten by Hybrid Macaques [Journal] // Journal of Chemical Ecology, - 1998, - 02 : Vol, 24, - pp, 195-205,

**Borsi I, [et al,]** Modeling unsaturated zone flow and runoff processes by integrating MODFLOW-LGR and VSF, and creating the new CFL package [Journal] // Journal of Hydrology, - [s,l,] : ELSEVIER, 2013, - Vol, 488,

**Borsi I, [et al,]** Modeling unsaturated zone flow and runoff processes by integrating MODFLOW-LGR and VSF, and creating the new CFL package [Journal] // Journal of Hydrology, - 2013, - Vol, 488, - pp, 33–47,

**Bouc O, and Auclair S,** Critères de sécurité pour les analogues industriel au stockage géologique du CO<sub>2</sub> [Report], - 3 ill,2 ann : BRGM/RP-55840 –FR, 2007, - p, 64,

**Bouhlima Rachida and Laabidi Ezzedine** Impacts of calcite dissolution on seawater intrusion processes in coastal aquifers: Density dependent flow and multi species reactive transport modelling [Conference] // ModelCARE, - Copenhague , DANEMARK : IAHS-AISH, 2008, - Vol, 320, - pp, 220-225,

## **BEN REFIFA Marwen**

**Bouhlila Rachida** Ecoulements, Transports et Réactions Géochimiques Couplés Dans le milieu Poreux, Cas des sels et des saumures [Report], - Tunisie : Ecole Nationale d'Ingenieur de Tunis, 1999,

**Bryant Robert** The sedimentology and geochemistry of non-marine evaporites on the Chott el Djerid, using both ground and remotely sensed data [Report] : PHD, - [s,l.] : University of Reading,, 1993,

**Butow E, and Holzbercher E,** On the modeling of groundwater flow under the influence of salinity, Use of models in decision making [Book] / ed, G, JOUSMA KULMER, - [s,l.] : Academic Publishers, 1989, - p, 347,

**Campbell Marius Robison** Historical review of theories advanced by american geologists to account for the origine and accumulation of Oil [Journal] // Economic Geology, - economic geology : [s,n,], 1911, - 4 : Vol, 6, - pp, 363-395,

**Cannot Edourad** Muesli , Fortran 95 implementation [Book], - Rennes, France : IRISA/CNRS, Rennes, France, 2011, - p, 447,

**Clement T,P, [et al,]** Modeling Multispecies Reactive Transport in Ground Water [Journal] // Groundwater Monitoring & Remediation, - 1998, - 02 : Vol, 18, - pp, 79-92,

**Clendenin W,W** A preliminary report upon the Florida Parishes of East Louisiana and the Bluf, Prairie, Hill islands of S,W, Louisiana, [Report], - New Orleans : Louisiana State Experimental Station, Geology and Agriculture,, 1896, - pp, 236-240,

**Comte J,C** Apport de la tomographie électrique a la modélisation des écoulements densitaires dans les aquifères côtiers [Report] : thèse de doctorat, - Marseille : Ecole doctorale SIBAGHE, 2008, - p, 200,

**Coudrain-Ribstein A** Transport d'éléments et réactions géochimiques dans les aquifères [Report] : Thèse de doctorat es-sciences, - Strasbourg : IRD, 1988, - p, 381,

**Cushman J, H** Dynamics of fluids in hierarchical porous media [Book], - London : Academic Press, 1990,

**Datt and Touzot** une presentation de la méthode des éléments finis [Book] / ed, S,A Maloine, - [s,l.] : Université LAVAL, 1981, - p, 540,

**Davis M and Duff I** AN UNSYMMETRIC-PATTERN MULTIFRONTAL METHOD FOR SPARSE LU FACTORIZATION\* [Journal] // SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, - 1997, - 01 : Vol, 18, - pp, 140-158,

**Dawson C, and Gerritsen M** Computational Challenges in the Geosciences [Book], - London : Springer-Verlag New York, 2013, - Vol, 156 : p, 167,

## **BEN REFIFA Marwen**

**de Josselin de Jong G**, Singularity distributions for the analysis of multiple-fluid flow through porous media [Journal], - 1960, - 11 : Vol, 65, - pp, 3739–3758,

**Degolyer Lee everti** Origin of north american salt dome: Bulletin of [Book], - United states : The American Association of Petroleum Geologists, 1926, - Vol, 9 : 5 : pp, 832-833,

**Deliege François Jean** Modélisation intégrée du cycle de l'eau: methodologie et perspective [Conference] // Or bleau, indispensable, inodore et sans saveur, - Liège : Bulletin de la société royale de liège vol 79, 2010, - pp, 91-130,

**Dhatt and Touzot** une présentation de la méthode des éléments finis [Book] / ed, S,A Maloine, - [s,l,] : Université LAVAL, 1981, - p, 540,

**Diersch H and Kolditz O**, Variable-density flow and transport in porous media: [Journal] // Advances in Water Resources, - 2001, - Vol, 25, - pp, 899–944,

**Diersch H J and Kolditz O** Coupled groundwater flow and transport:2,Thermoline and 3D convection Systems [Journal] // Advences in water Ressource, - 1998, - Vol, 21, - pp, 401-425,

**Diersch HJ**, Primitive variables finite element solutions of free convection flows in porous media, [Article], - 1981, - Vol, 61, - pp, 325-337,

**Dieuleveult Caroline** Un modèle numérique global et performant pour le couplage géochimie-transport [Report] : thèse de doctorat, - Rennes : Université de Rennes1, 2008, - p, 150,

**Djahanguiri F, and Matthews S,C**, Geotechnical considerations for design of a nuclear repository in bedded salt in the U,S [Book Section] // Sixth International Symposium on Salt, - Alexandria Va : the Salt Institute, 1985,

**Dotsika E, [et al,]** A natron source at Pikrolimni Lake in Greece? Geochemical evidence [Journal] // Journal of Geochemical Exploration, - 2009, - 2-3 : Vol, 103, - pp, 133-143,

**Elder J, W**, Steady free convection in a porous medium heated from below [Journal] // Journal of Fluid Mechanics, - 1967, - 01 : Vol, 27, - pp, 29-48,

**Essink G, O**, Improving fresh groundwater supply : problems and solutions [Article] // Ocean and Coastal, - 2001, - Vol, 44, - pp, 429-449,

**Eugster Hans P** Geochemistry of Evaporitic Lacustrine Deposits [Journal] // Annual Review of Earth and Planetary Sciences, - 1980, - pp, 35-63,

**Fan Y,, Durlofsky L, J, and Tchelepi H, A**, A fully-coupled flow-reactive-transport formulation based on element conservation, with application to CO2 storage simulations [Journal] // Advances in Water Resources, - [s,l,] : ELSEVIER, 2012, - Vol, 42, - pp, 47–61,

## **BEN REFIFA Marwen**

**Fontes J,Ch, and Perthuisot Jean Piere** Faciès minéralogiques et isotopiques des carbonates de la Sebkha el Melah (Zarzis, Tunisie); les variations du niveau de la Méditerranée orientale depuis 40,000 ans, [Report] : fasc, - Paris : Rev, Géogr, phys, Géol, Dynam, 1971, - pp, 299-314,

**Forlokovic P, and De Cshepper H,** Numerical modeling of convection dominated transport with density driven flow in porous media [Article] // water Resources, - 2001, - Vol, 24, - pp, 63-72,

**Freedman Vicky and Ibaraki Motomu** Effects of chemical reactions on density-dependent fluid flow: on the numerical formulation and the development of instabilities [Journal] // Advances in Water Resources, - 2002, - 4 : Vol, 25, - pp, 439–453,

**Friedly John C, and Rubin Jacob** Solute transport with multiple equilibrium-controlled or kinetically controlled chemical reactions [Journal] // Water Resources Research, - [s,l.] : AGU Journal, 1992, - 07 : Vol, 28, - pp, 1935–1953,

**Fries G,** Étude de l'éventualité de création d'un dôme [Report] = Géologie des dômes de sel : Rapport final / Direction générale Science, recherche et développement, - LUXEMBOURG : COMMISSION DES COMMUNAUTÉS EUROPÉENNES, 1987, - p, 144,

**Frind E,** Simulation of long-term transient density-dependent transport in groundwater [Article] // Advances in Water Resources, - 1982, - Vol, 5, - pp, 73-88,

**Gérard Frédéric** Modélisation géochimique thermodynamique et cinétique avec prise en compte des phénomènes de transport de masse en milieu poreux saturé [Report] : Thèse de doctorat / l'ULP de Strasbourg, - Strasbourg : [s,n,], 1996, - p, 249,

**Ghogomu NF and Therrien R** Reactive mass transport modeling in discretely fractured [Journal] // Computational Methods in Water Resources , - Rotterdam, Netherlands : [s,n,], 2000, - Vol, 08,

**Ghoryechi Mehdi and Daupley Xavier** Devenir à long terme d'exploitation abandonnées de sel en France [Conference] // Colloque International Après-mine 2003, - Nancy, France : [s,n,], 2003,

**Goblet P,** Modélisation des transferts de masse et d'énergie en aquifère, [Report] : Thèse de Docteur Ingénieur / Université Pierre et Marie Curie, - Paris : ENSM, 1981, - p, 231,

**Gray William G,** Thermodynamics and constitutive theory for multiphase porous-media flow considering internal geometric constraints [Journal] // Advances in Water Resources, - [s,l.] : ELSEVIER, 1999, - 05 : Vol, 22, - pp, 521–547,

## **BEN REFIFA Marwen**

**Gueddari M**, Géochimie et thermodynamique des évaporites continentales, Etude du lac Natron en Tanzanie et du Chott El Djerid en Tunisie [Report] / Institut de géologie, - Strasbourg : Université Louis Pasteur de Strasbourg, 1984, - p, 143,

**Guggenheim E,A**, The specific thermodynamic properties of aqueous solutions of strong electrolytes [Journal] // The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, - 1935, - 127 : Vol, 19, - pp, 588-643,

**Hammond G,E,, P,C, Lichtner and R,T, Mills** Evaluating the performance of parallel subsurface simulators: An illustrative example with PFLOTRAN [Journal] // Water Resources Research, - [s,l.] : AGU Journal, 2014, - 01 : Vol, 50, - pp, 208–228 ,

**Harris Gilbert D, and Veatch A, C**, A preliminary report on the geology of Louisiana [Book], - [s,l.] : irection of State experiment station, Baton Rouge, La., 1899, - pp, 9-138,

**Harris Gilbert D**, GEOLOGICAL SURVEY OF LOUISIANA: [Book], - New Orleans : Baton Rouge, 1907, - Vol, 6,

**Hart Peter [et al,]** Survey of salt dome investigations [Book], - [s,l.] : U,S Nuclear Regulatory Comission, 1981,

**Hassanizadeh Majid and Gray William G** General conservation equations for multi-phase systems: 1, Averaging procedure [Journal] // Advances in Water Resources, - 1979, - Vol, 02, - pp, 131-144,

**Hassanizadeh Majid and Gray William G**, General conservation equations for multi-phase systems: 3, Constitutive theory for porous media flow [Journal] // Advances in Water Resources, - 1980, - 01 : Vol, 03, - pp, 25-40,

**Hassanizadeh Majid** Derivation of basic equations of mass transport in porous media, Part 1, Macroscopic balance laws [Journal] // Advances in Water Resources, - 1986, - 04 : Vol, 09, - pp, 196-206,

**Henry H,R** Effects of dispersion on salt encroachment in coastal aquifers [Article] // U,S, Geological Survey Water-Supply Paper, - 1964, - 1613-C, - pp, 70-84,

**Herbert A W, Jackson C P and Lever D A** Coupled groundwater flow and solute transport with fluid density strongly dependent upon concentration [Journal] // Water Ressources Research, - 1988, - 0 : Vol, 34, - pp, 1781-1795,

**Herbst Michael [et al,]** On preconditioning for a parallel solution of the Richards equation [Journal] // Computers & Geosciences, - [s,l.] : ELSEVIER, 2008, - 12 : Vol, 34, - pp, 1958–1963,

**Hoffmann J,, Kräutle S, and Knabner P**, A parallel global-implicit 2-D solver for reactive transport problems in porous media based on a reduction scheme and its application to the

## **BEN REFIFA Marwen**

MoMaS benchmark problem [Journal] // Computational Geosciences, - [s,l] : Springer, 2010, - 03 : Vol, 14, - pp, 421–433,

**Holt M,S** Sources of Chemical Contaminants and Routes into the Fresh Water Environment [Journal] // Food and Chemical Toxicology, - 2000, - Vol, 38, - pp, 21-27,

**Hopkins F,V**, First annual repprt of the lousiana state Geological Survey [Report], - New Orleans : Board of supervisor Lousiana state seminary of learning and military academy, 1870, - pp, 77-109,

**Huehlgerger W,R**, Internal structures and mode of uplift of the Grand Saline dome Van Zandt county, Texas, USA, [Book], - Copenhagen : 21st International Geology Congress, 1960, - Vol, 18 : pp, 28-33,

**Huyakorn P,S, [et al,]** Saltwater intrusion in aquifers: development and testing of a three-dimensional finite element model [Article] // Advances in Water Resources, - 1987, - Vol, 23, - pp, 293–312,

**Jackson M,P,A, and Seni S, J**, Geometry and evolution of salt structures in a marginal rift basin of the Gulf of Mexico, east Texas [Journal] // Geology, - [s,l] : Geological Society of America, 1983, - 3 : Vol, 11, - pp, 131-135,

**Jaiswal Dilip Kumar, Kumar Atul and Yadav Raja Ram** Analytical Solution to the One-Dimensional Advection-Diffusion Equation with Temporally Dependent Coefficients [Journal] // Journal of Water Resource and Protection, - 2011, - Vol, 3, - pp, 76-84,

**Johnson Stephen John, Nick Christofi and Barry D, A**, Anaerobic biodegradation of linear alkylbenzene, [Journal] // Land Contamination and Reclamation, - 2001, - 03 : Vol, 09, - pp, 279-291,

**Kelsall P,C and Nelson J, W**, Geologic and ingeneering characterizations of gulf region salt domes applied to underground storage and mining [Book], - [s,l] : sixth international symposium on salt, 1985, - Vol, 1 : pp, 519-544,

**Konikow L F, Sanford W E and Campbell P J** Canstant concentration boundary conditions:lessons from the hydrocoin variable density groundwater benchmark problem [Journal] // Water Ressources Reaserch, - 1997, - 10 : Vol, 33, - pp, 2253-2261,

**Kupfer D,H**, Environment and intrusion of Gulf Coast salt and its probable relationship to platetectonics, In: Fourth symposium on sal [Book], - Cleveland : Ohio, Northern Ohio Geological Society, 1974, - pp, 197-213,

**Laabidi E**, Ecoulement saturé-non saturé en transport multi-espèces réactif dans les milieux poreux : extension de mefdens aux ions carbonatés [Report] : rapport de mastère, - TINISIE : ENIT, 2007, - p, 113,

## **BEN REFIFA Marwen**

**Laabidi Ezzedine and Bouhlila Rachida** Nonstationary porosity evolution in mixing zone in coastal carbonate aquifer using an alternative modeling approach [Journal] // *Environmental Science and Pollution*, - [s,l.] : Springer, 2015, - 13 : Vol, 22,

**Lakhdar Rached [et al,]** A Mediterranean Holocene restricted coastal lagoon under arid climate: Case of the sedimentary record of Sabkha Boujmel (SE Tunisia) [Journal] // *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology*, - 2006, - 2 : Vol, 241, - pp, 177-191,

**Langwaldt Jörg and Puhakka Jaakko A** On-Site Biological Remediation of Contaminated Groundwater: A Review [Journal] // *Environmental Pollution*, - 2000, - 2 : Vol, 107, - pp, 187–197,,

**Larsson Alf** The international projects INTRACOIN, HYDROCOIN and INTRAVAL [Journal] // *Advances in Water Resources*, - [s,l.] : ELSEVIER, 1992, - 01 : Vol, 15, - pp, 85-87,

**Last William M,** Continental brines and evaporites of the northern Great Plains of Canada [Journal] // *Sedimentary Geology*, - 1989, - 4 : Vol, 64, - pp, 207-221,

**Leal A,M,M, [et al,]** Computational methods for reactive transport modeling: An extended law of mass-action, xLMA, method for multiphase equilibrium calculations [Journal] // *Advances in Water Resources*, - [s,l.] : ELSEVIER, 2016, - Vol, 96, - pp, 405–422,

**Lee Chun-Hian and Cheng Ralph Ta-Shun** On seawater encroachment in coastal aquifers [Journal] // *Water Resources Research*, - [s,l.] : AGU Journal, 1974, - 05 : Vol, 10, - pp, 1039–1043,

**Lehmann F, and Ackerer Ph,** Comparison of Iterative Methods for Improved Solutions of the Fluid Flow Equation in Partially Saturated Porous Media [Journal] // *Transport in Porous Media*, - [s,l.] : Springer, 1998, - 03 : Vol, 31, - pp, 275–292,

**Lichtner Peter C,** Time-space continuum description of fluid/rock interaction in permeable media [Journal] // *Water Resources Research*, - [s,l.] : AGU Publications, 1992, - 12 : Vol, 28, - pp, 3135–3155,

**Lockett S, H,** Report of topographical survey of Louisiana [Book], - Paris : Librairie scientifique, Industrielle et agricole, 1871, - pp, 16-26,

**Lomax H, Thomas H, Pulliam and Zingg David W,** Fundamentals of Computational Fluid Dynamics [Book], - Berlin, Heidelberg : Springer, 2001, - pp, 7-18,

**Marsily G, de** Hydrogéologie quantitative [Book], - Paris : Masson, 1981, - Vol, 1 : p, 215,

**Massal P** Rheologie, propriété physiques de sel gemme et phénomènes de migration dans le sel [Book], - Orléons : Bureau de Recherche géologiques et minière, BRGM, 1988, - pp, 16-40,

## **BEN REFIFA Marwen**

- Mermoud André** *Éléments de physique du sol* [Book], - Bucarest : Ed, H,G,A,, 1998,, 1998,
- Michard Gil** *Equilibres chimiques dans les eaux naturelles* [Book], - [s,l.] : Publisud, 1989, - p, 357,
- Miller Cass T., Clint N, Dawson [et al,]** *Numerical simulation of water resources problems: Models, methods, and trends* [Journal] // *Advances in Water Resources*, - [s,l.] : ELSEVIER, 2013, - Vol, 51, - pp, 405–437,
- Millero Frank J** *The use of the specific interaction model to estimate the partial molal volumes of electrolytes in seawater* [Journal] // *Geochimica et Cosmochimica Acta*, - 1977, - 02 : Vol, 41, - pp, 215-223,
- M'nif A, and Rokbani R,** *Minerals successions crystallisation related to tunisian natural brines* [Journal] // *Crystal Research and Technologie*, - 2004, - 1 : Vol, 39, - pp, 40-49,
- Monnin Christophe** *An ion interaction model for the volumetric properties of natural waters: Density of the solution and partial molal volumes of electrolytes to high concentrations at 25°C* [Journal] // *Geochimica et Cosmochimica Acta*, - 1989, - 6 : Vol, 53, - pp, 1177-1188,
- Monnin Christophe** *Densities and apparent molal volumes of aqueous CaCl<sub>2</sub> and MgCl<sub>2</sub> solutions* [Journal] // *Journal of Solution Chemistry*, - [s,l.] : Springer, 1987, - 12 : Vol, 16, - pp, 1035–1048,
- Morel F, M,M,** *Principles of aquatic chemistry* [Book], - [s,l.] : Ed, Wiley Interscience Publications, 1983, - p, 446,
- Moussa Mahmoud** *Turbulence et circulation générées par le vent dans les systèmes aquatiques peu profonds : application au lac de Tunis* [Report] : PhD Thesis, - Toulouse : Institut national polytechnique, 1986,
- Nasri Nesrine, Boughlila Rachida and Riadh Ahmed** *Multivariate Statistical Analysis of Saline Water — A Case Study: Sabkha Oum LeKhalate (Tunisia)* [Journal] // *Int, J, Environ, Sci, Dev*, - 2015, - Vol, 6, - pp, 40-43,
- Nettleton Lewis Lomax** *Fluids mechanics of salt domes* [Book], - [s,l.] : American Association of Petroleum Geologists (AAPG), 1934, - Vol, 18 : 9 : pp, 1175-1203,
- OECD (Organisation for Economic Cooperation and De** *The international Hydrocoin Project,Level 1,code verification* [Report], - Paris : Rep,71617, 1988,
- Pakzad H, R, and Ajalloeian R,** *Geochemistry of the Gavkhoni playa lake brine* [Journal] // *Carbonates and Evaporites*, - 2004, - p, 19:67,
- Paniconi Claudio and Putti Mario** *A comparison of Picard and Newton iteration in the numerical solution of multidimensional variably saturated flow problems* [Journal] // *Water Resources Research*, - [s,l.] : AGU Journal, 1994, - 12 : Vol, 30, - pp, 3357–3374,

## **BEN REFIFA Marwen**

- Parker T,J, and Mcdowell A,N**, Model studies of salt dome tectonics [Book], - Tulsa, Oklahoma : the american association of petroleum geologists bulletin, 1955, - Vol, 39 : 12 : pp, 2384-2470,
- Parkhurst D,L, and L, Wissmeier** PhreeqcRM: A reaction module for transport simulators based on the geochemical model PHREEQC [Journal] // Advances in Water Resources, - [s,l,] : ELSEVIER, 2015, - Vol, 83, - pp, 176–189,
- Peach C J** Influence of deformation on the fluid transport properties of salt rocks [Book Section] // Geologica Ultraiectina, - [s,l,] : Faculteit Aardwetenschappen der Rijksuniversiteit te Utrecht, 1991,
- Perthuisot Jean-Pierre** La Sebkhah el Melah de Zarzis Genèse et évolution d'un bassin salin paralytique [Report] : Thèse / Travaux du Laboratoire de géologie ; École normale supérieure, Paris, - Paris : École normale supérieure, Paris, 1975,
- Perthuisot Jean-Pierre** Les dépôts salins de la Sebkhah el Melah de Zarzis: Conditions et modalités de la sédimentation évaporitique, [Journal] // Rev, Géogr, phys, Géol, dynam, - [s,l,] : Rev, Géogr, phys, Géol, dynam, 1974, - 2 : Vol, XVI, - pp, 177-187,,
- Perthuisot Jean-Pierre** LES VICISSITUDES CONCEPTUELLES SUR LA GENÈSE D'UN BASSIN SALIN : [Report], - Paris : COMITÉ FRANÇAIS D'HISTOIRE DE LA GÉOLOGIE, 1981,
- Pitzer Kenneth S**, Thermodynamics of electrolytes, I, Theoretical basis and general equations [Journal] // J, Phys, Chem, - 1973, - 02 : Vol, 77, - pp, 268–277,
- Polmann Donald J, [et al,]** Stochastic modeling of large-scale flow in heterogeneous unsaturated soils [Journal] // Water Resources Research, - [s,l,] : AGU Journal, 1991, - 07 : Vol, 27, - pp, 1447–1458,
- Pueyo Juan J**, Génesis de formaciones evaporíticas, Modelos Andines e Ibéricos [Report], - Barcelona : Edicions Universitat Barcelona, 1971, - p, 417,
- Ranghathan vishnu and Jeffery Hanor S**, Density-driven Groundwater flow near salt domes [Journal] // Chemical Geology, - 1988, - pp, 173-188,
- Reeves M [et al,]** Theory and implementation of SWIFT II, the sandia waste isolation flow and transport model for fractured media, Release 4, 84 [Report], - United States : Sandia National Labs,, Albuquerque, NM (USA), 1986,
- Robinson Bruce A,, Viswanathan Hari S, and Valocchi Albert J**, Efficient numerical techniques for modeling multicomponent ground-water transport based upon simultaneous solution of strongly coupled subsets of chemical components, [Journal] // Advances in Water Resources, - [s,l,] : ELSEVIER, 2000, - 04 : Vol, 23, - pp, 307–324,

## **BEN REFIFA Marwen**

**Rosen Michael Robert** Sedimentologic, geochemical, and hydrologic evolution of an intracontinental, closed-basin playa (Bristol Dry Lake, CA): a model for playa development and its implications for paleoclimate [Report] : UT Electronic Theses and Dissertations, - Texas : University of Texas at Austin, 1989, - p, 266,

**Rosen Michael** The importance of groundwater in playas: A review of playa classifications and the sedimentology and hydrology of playas, Paleoclimate and Basin Evolution of Playa Systems [Book Section] // Geological Society of America Special Papers, 289, - 1994,

**S, Molins [et al,]** A formulation for decoupling components in reactive transport problems [Journal] // Water Resources Research, - [s,l.] : AGU Journal, 2004, - 10 : Vol, 40,

**Saaltink Maarten W,, Ayora Carlos and Carrera Jesús** A mathematical formulation for reactive transport that eliminates mineral concentrations [Journal] // Water Resources Research, - [s,l.] : AGU Journal, 1998, - 07 : Vol, 34, - pp, 1649–1656,

**Saaltink Maarten W,, Carrera Jesús and Ayora Carlos** On the behavior of approaches to simulate reactive transport [Journal] // Journal of Contaminant Hydrology, - 2001, - 3-4 : Vol, 48, - pp, 213-235,

**Saaltink Maarten W,, Carrera Jesús and Ayora Carlos** On the behavior of approaches to simulate reactive transport [Journal] // Journal of Contaminant Hydrology, - [s,l.] : ELSEVIER, 2001, - 03-04 : Vol, 48, - pp, 213–235,

**Sanford Ward E, and Konikow Leonard F,** A TWO-CONSTITUENT [Report] / Water-Resources Investigations , - Virginia : U,S, GEOLOGICAL SURVEY, 1985, - pp, 85-4279,

**Sanford Ward E, and Wood Warren W,** Brine Evolution and Mineral Deposition in Hydrologically Open Evaporite Basins [Journal] // American Journal of Science, - virgiea : ajs, 1991, - Vol, 291, - pp, 687-710,

**Sanford WE and Konikow L F** Simulation of calcite dissolution and porosity changes in saltwater mixing zones in coastal aquifers [Journal] // Water Ressource research, - [s,l.] : AGU Pubilcations, 1989, - Vol, 25, - pp, 655-667,

**Sauter F,J [et al,]** a computer code for the simulation of the transport of contaminants with groundwater [Article] // METROPOL, - NETHERLANDS : National Institute of Public heath and environmental protection-Bilthoven, 1990, - pp, 174-203,

**Scheidegger Adrian E,** The physics of flow through porous media [Book], - Michigan : University of Toronto Press, 1974, - Vol, 03 : p, 353,

**Schmidt Nadja** Hydrogeological and hydrochemical investigations at the Salar de Uyuni (Bolivia) with regard to the extraction of lithium [Journal] // FOG - Freiberg Online Geoscience, - 2010, - Vol, 26, - pp, :1-131,

## **BEN REFIFA Marwen**

**Segol G., Pinder G, and Gray W,G** A Galerkin -finite element technique for calculating the transient position of the saltwater front [Article], - 1975, - 2 : Vol, 11, - pp, 343-347,

**Senger Rainer K, and Fogg Graham E,** Regional underpressuring in Deep Brine Aquifers, Palo Duro Basin, Texas: 1, Effects of hydrostratigraphy and topography [Journal] // Water Resources Research, - [s,l,] : AGU Journal, 1987, - 08 : Vol, 23, - pp, 1481–1493,

**Shelkes Klaus [et al,]** Water-conducting features in a geologic system consisting of a salt dome and overlying unconsolidated sediments [Conference] // Water-conducting features in radionuclide Migration,Proc, GEOTRAP Workshop, - Paris : OECD/NEA, 1999, - pp, 145-156,

**Simmons Craig and Narayan Kumar** Modelling density-dependent flow and solute transport at the Lake Tutchewop saline disposal complex, Victoria [Journal] // Journal of Hydrology , - 1998, - 03 : Vol, 206, - pp, 219-236,

**Simpson Matthew J, and Landman Kerry A,** Analysis of split operator methods applied to reactive transport with Monod kinetics [Journal] // Advances in Water Resources, - [s,l,] : ELSEVIER, 2007, - 09 : Vol, 30, - pp, 2026–2033,

**Smykatz Kloss Werner and Roy Priyadarsi D,** Evaporite mineralogy and major element geochemistry as tools for palaeoclimatic investigations in arid regions: A synthesis [Journal] // Boletín de la Sociedad Geológica Mexicana, - Mexico : [s,n,], 2010, - 3 : Vol, 62, - pp, 379-390,

**Stanford WE and Konikow L F** Simulation of calcite dissolution and porosity changes in saltwater mixing zones in coastal aquifers [Journal] // Water Ressource, - 1989, - Vol, 25, - pp, 655-667,

**Steefel C, I and Yeh , C, A, J, AppeloB, AroraD, JacquesT, KalbacherO, KolditzV, LagneauP, C, LichtnerK, U, MayerJ, C, L, MeeussenS, MolinsD, MoultonH, ShaoJ, ŠimůnekN, SpycherS, B, YabusakiG, T,** Reactive transport codes for subsurface environmental simulation [Journal] // Computational Geosciences, - [s,l,] : Springer, 2015, - 03 : Vol, 19, - pp, 445–478,

**Steefel C, I, and Yabusaki S,B,** os3D/GIMRT Software for Modeling Multicomponent-Multidimensional Reactive Transport USER MANUAL & PROGRAMMER' S GUIDE [Report] : Technical Report / Department of Geology, University of South Florida Tampa, Florida 33620 U,S,A,, - Richland, Washington : Pacific Northwest Nati, 1996, - pp, 5-40,

**Steefel Carl I, and MacQuarrie Kerry T, B,** Approaches to modeling of reactive transport in porous media [Journal] // Reviews in Mineralogy and Geochemistry, - [s,l,] : Mineralogical Society of America, 1996, - 01 : Vol, 34, - pp, 85-129,

## **BEN REFIFA Marwen**

**Stille E** Geology of Salt Dome Oil Fields [Book], - Chicago : The American Association of Petroleum Geologists, 1926, - pp, 207-208,

**Stivaletta Nunzia [et al,]** Astrobiological significance of the sabkha life and environments of southern Tunisia [Journal] // Planetary and Space Science, - 2009, - 5-6 : Vol, 57, - pp, 597-605,

**Stormont J C, Howard C L and Daemen J K** Changes in rock salt permeability due to nearby excavation, Rock Mechanics as a Multidisciplinary Science [Book Section] // Proceedings of the 32nd US Symposium, - Balkema, Brookfield : The University of Oklahoma, Norman, Oklahoma, 1991,

**Stumm Werner and Morgan James J,** Aquatic Chemistry, An introduction emphasizing chemical, [Book], - [s,l] : Ed Wiley Interscience, 1970, - p, 583,

**Tang Guoping [et al,]** Application of a hybrid MPI/OpenMP approach for parallel groundwater model calibration using multi-core computers [Journal] // Computers & Geosciences, - [s,l] : ELSEVIER, 2010, - 11 : Vol, 36, - pp, 1451–1460,

**Teller James T, and Last Williams M,** Paleohydrological indicators in playas and salt lakes, with examples from Canada, Australia, and Africa [Journal] // Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology, - 1990, - 3-4 : Vol, 76, - pp, 215-240,

**Thomassy Raimond** éologie pratique de la Louisiane [Book], - Nouvelle-Orléon et Paris : Librairie scientifique,Industruelle et agricole, 1860, - pp, 300-358,

**Tracy Fred T,** Accuracy and Performance Testing of Three-Dimensional Unsaturated Flow Finite Element Groundwater Programs on the Cray XT3 Using Analytical Solutions [Conference] // HPCMP Users Group Conference, 2006, - Denver, CO, USA : IEEE, 2006,

**Trauth R and Xanthopoulos C** Non-point pollution of groundwater in urban areas, [Journal] // Water Research, - 1997, - 11 : Vol, 31, - pp, 2711-2718,

**Trompert R,A, Verwer J,G and Blom J,G** Computing brine transport un porous media with an adaptative-gird method [Article] // int.j,for Num,Meth,in Fluid, - 1993, - Vol, 16, - pp, 43-63,

**Trusheim F,** Mechanism of salt migration in Northern Germany [Book], - [s,l] : the american association of petroleum geologists bulletin, 1960, - Vol, 44 : pp, 1519-1540,

**Verma A, and Pruess K,** Thermohydrological conditions and silica redistribution near high-level nuclear wastes emplaced in saturated geological formations [Journal] // Journal of geophysical Research, - 1988, - B2 : Vol, 93, - pp, 1159–1173,

## **BEN REFIFA Marwen**

- Voss C, and Sousa W,R** Variable density flow and solute transport simulation of regional aquifers containing a narrow freshwater-saltwater transition zone [Article] // *advances Water Resources*, - 1987, - Vol, 23, - pp, 51-66,
- Walter A, L, [et al,]** Modeling of multicomponent reactive transport in groundwater: 1, Model development and evaluation [Journal] // *Water Resources Research*, - 1994, - 11 : Vol, 30, - pp, 3137–3148,
- Wang Wenqing, Kosakowski Georg and Kolditz Olaf** A parallel finite element scheme for thermo-hydro-mechanical (THM) coupled problems in porous media [Journal], - 2009, - 08 : Vol, 35, - pp, 1631–1641,
- Warsta Lassi [et al,]** Simulation of water balance in a clayey, subsurface drained agricultural field with three-dimensional FLUSH model [Journal] // *Journal of Hydrology*, - [s,l.] : ELSEVIER, 2013, - Vol, 476, - pp, 395–409,
- Watson ANDREW** Structure, chemistry and origins of gypsum crusts in southern Tunisia and the central Namib Desert [Journal] // *Sedimentology*, - 1985, - 6 : Vol, 32, - pp, 855-875,
- Whitaker S,** The Method of Volume Averaging [Book], - Netherlands : Springer, 1999, - Vol, 13 : pp, 20-190,
- Wood Warren and Sanford Ward** Ground-water control of evaporite deposition [Journal] // *Economic Geology*, - 1990, - 6 : Vol, 85, - pp, 1226-1235,
- Wooding R, A,** Steady state free thermal convection of liquid in a saturated permeable medium [Journal] // *Journal of Fluid Mechanics*, - 1957, - 3 : Vol, 2, - pp, 273-285,
- Yechieli Yoseph and Wood W Warren** Hydrogeologic processes in saline systems: playas, sabkhas, and saline lakes [Journal] // *Earth-Science Reviews*, - 2002, - 3-4 : Vol, 58, - pp, 343-365,
- Yeh Gour-Tsyh and Tripathi Vijay S,** A Model for Simulating Transport of Reactive Multispecies Components: Model Development and Demonstration [Journal] // *Water Resources Research*, - [s,l.] : AGU Journal, 1991, - 12 : Vol, 27, - pp, 3075–3094,
- Yeh Gour-Tsyh, Shih Don-Sin and Cheng Jing-Ru C,** An integrated media, integrated processes watershed model [Journal], - [s,l.] : ELSEVIER, 2011, - 01 : Vol, 45, - pp, 2–13,
- Younes Anis, Ackerer PH, and Mose R,** Modeling variable density flow and solute transport in porous medium:2 Re evaluation of the salt dome flow problem [Journal] // *Transport in porous media*, - 1998, - Vol, 35, - pp, 375-394,
- Zhang Qi, Volker Ray and Lockington David A,** Experimental investigation of contaminant transport in coastal groundwater [Journal] // *Advances in Environmental Research*, - 2002, - 03 : Vol, 06, - pp, 229-237,

## **BEN REFIFA Marwen**

**Zhao C, Hobbs B,E,, Ord A**, Fundamentals of Computational Geoscience: Numerical Methods and Algorithms, [Book], - Berlin : Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009, - Vol, 122 : p, 323,