



Talisman

Un logiciel basé sur un schéma combiné volumes finis – éléments finis pour la simulation numérique d'écoulement et du transport de contaminants en sous-sol avec contrôle d'erreur a posteriori et raffinement adaptatif de maillages

Présentation et manuel d'utilisation

Martin Vohralík

HYDR  EXPERT
la maîtrise de l'eau

53, rue Charles Frérot, 94 250 GENTILLY

www : <http://www.ged.fr/hydroexpert.html> e-mail : info@hydroexpert.com

Table des matières

PARTIE 1 : PRESENTATION GENERALE

1.	Introduction et destination de Talisman	6
2.	Eléments clés de Talisman	6
2.1	Domaines adaptés au sous-sol.....	7
2.2	Représentation des données naturelle et puissante	7
2.3	Equations approuvées par la pratique hydrogéologique	8
2.3.1	Ecoulement	8
2.3.2	Transport.....	9
2.4	Interface d'utilisateur élaboré et interactif	9
2.5	Schéma numérique innovant, combinant les avantages des volumes finis et des éléments finis	10
2.6	Méthodes de résolution performantes.....	11
2.7	Contrôle d'erreur, efficacité et précision par adaptativité en espace et en temps..	12
2.8	Concepts de programmation C++ orienté objets au cœur de Talisman	12
3.	Documentation de Talisman	13
4.	Sommaire de Talisman.....	13

PARTIE 2 : MANUEL D'UTILISATION

1.	Les opérations d'ouverture et de fermeture	16
1.1	Lancement de Talisman	16
1.2	Création d'un nouveau modèle	16
1.3	Ouverture d'un modèle existant.....	16
1.4	Ajustement d'un modèle	16
1.5	Enregistrement d'un modèle	17
1.6	Fermeture d'un modèle.....	17
1.7	Fermeture de Talisman.....	17
2.	Discrétisation du modèle créé.....	17
2.1	Discrétisation spatiale.....	17
2.1.1	Frontière du modèle	18
2.1.2	Repérage du modèle	18
2.1.3	Taille des colonnes	18

2.1.4	Taille des lignes.....	18
2.2	Discrétisation temporelle	18
2.2.1	Régime permanent	18
2.2.2	Régime transitoire	18
3.	La saisie des données physiques du modèle.....	19
3.1	Données pour écoulement Dupuit ou Hantush	19
3.2	Données pour écoulement Richards.....	20
3.3	Données pour transport	20
4.	Les outils de manipulation	21
4.1	Se déplacer dans les couches	21
4.2	Sélectionner des mailles	21
4.3	Sélectionner une zone	21
4.4	Agrandir ou réduire la vue d'une couche ou d'une zone	21
4.5	Coloriser les valeurs	22
4.6	La division des mailles	22
4.7	Organisation des fenêtres.....	23
5.	Conditions.....	24
5.1	Débordement.....	24
5.2	Recharge.....	25
5.3	Puits	25
5.4	Limites imposées	26
5.5	Conditions de flux pour transport.....	26
6.	Paramètres et fonctionnalités supplémentaires	27
6.1	Paramètres d'écoulement.....	27
6.2	Valeurs limites	27
6.3	Valeurs consultables en lecture seule.....	28
6.4	Mailles d'observation	29
6.5	Zones de bilan	29
6.6	Sauvegarde des résultats	29
6.7	Paramètres d'affichage pendant le calcul	32
7.	Calcul	32
7.1	Calcul hydrodynamique	32
7.2	Calcul du transport	34

8.	Remarques différentes	35
8.1	Visualisation des solutions après le calcul.	35
8.2	Conditions et calcul adaptatif	35
8.2.1	Pendant le calcul	35
8.2.2	Après le calcul	36
8.3	Revenir au maillage initial après le calcul d'écoulement adaptatif.....	36
8.4	Calcul précise (adaptatif) du transport	36
8.5	Calcul des lignes de courant.....	37
9.	Le transfert de données.....	37
9.1	Importation de données	37
9.2	Interpolation de données d'une couche à partir de quelques valeurs.....	37
9.3	Exportation de données	38
9.4	Exportation du maillage	38
9.5	Exportation des limites du modèle	38

PARTIE1 : PRESENTATION GENERALE

1. Introduction et destination de Talisman

Evolution du niveau de l'eau souterraine et le déplacement de contaminants dans les nappes aquifères souterraines sont décrits par des équations (aux dérivés partielles) assez complexes. Il est impossible d'en trouver les solutions exactes si bien que le seul outil disponible pour donner des prévisions est représenté par des méthodes de simulation numérique, qui permettent d'obtenir les solutions approchées à l'aide d'algorithmes implémentés dans un ordinateur.

Ces dernières années, les recherches théoriques sur des méthodes numériques ont donné lieu à des progrès considérables. Le transfert de ces avancées théoriques dans les codes utilisés en pratique en hydrogéologie est malheureusement en retard. Ces codes utilisent souvent des méthodes qui ne sont pas suffisamment précises, peuvent donner des résultats physiquement incorrects (violation du principe de la conservation de la masse et donc des bilans incorrects d'écoulement, valeurs négatives de la concentration), ne sont pas adaptées aux domaines typiques du sous-sol général et ne permettent pas un traitement facile des maillages utilisés dans la pratique hydrogéologique pour la description du milieu souterrain (géométrie, composants du milieu, propriétés des composants).

Un très grand gain du rapport précision / coût du calcul pour des simulations numériques ne dépend que de la façon comment les calculs ont été faites, mais dans un premier temps du choix des équations qu'on prends pour la description du processus simulé. Concernant l'écoulement de l'eau dans un régime non saturé par exemple, c'est un système des équations de Navier-Stokes qui le décrit ; ce système d'équations est néanmoins très coûteux à résoudre numériquement et on trouve que pour le sous-sol, c'est l'équation de Richards qui le peut remplacer. Toutefois, on peut la souvent encore beaucoup simplifier, en introduisant par exemple l'hypothèse de Dupuit ou celle d'Hantush. C'est finalement assez semblable pour le domaine, où on peut souvent remplacer le milieu de sous-sol tridimensionnel par un système des couches aquifères uniquement.

Le logiciel Talisman a été développé dans la collaboration d'une société hydrogéologique spécialisée dans la maîtrise des domaines, équations, représentation des données et connaissance des besoins réels, et des chercheurs universitaires, spécialistes des méthodes numériques les plus performantes d'aujourd'hui. Sa destination est de donner les meilleures approximations des processus en sous-sol dans des temps de calcul très raisonnables, permettant notamment maintenir le cadre compact d'une application PC, en combinant la maîtrise complète des doubles enjeux hydrogéologiques et mathématiques.

2. Eléments clés de Talisman

Nous allons présenter ici les éléments clés du logiciel Talisman, ces hypothèses de basse, les équations traitées, ses avantages, conceptions et méthodes numériques.

2.1 Domaines adaptés au sous-sol

Le milieu poreux du sous-sol est dans la plupart des cas structuré sous la forme de plusieurs couches géologiques. C'est cette propriété des domaines souterraines qui est au cœur de la conception du logiciel Talisman. Nous représentons graphiquement sur la Figure 1 un exemple typique du milieu poreux souterrain. En Talisman, trois types de la représentation existent :

- Le domaine est donné par l'ensemble des couches géologiques, perméables et semi-perméables, qui recouvrent la partie entière du sous-sol. Cette représentation, correspondante dans la partie gauche de la Figure 1, est dans la suite notée « **3D** ».
- Le domaine est uniquement donné par des couches aquifères ou perméables, comme c'est le cas dans la partie droite de la Figure 1, où uniquement les couches de sable et de sable et gravier sont représentés, alors que la couche semi-perméable les séparant n'est pas explicitement prise en compte. Cette représentation est dans la suite notée « **2D multicouche** ».
- On représente une coupe verticale du milieu poreux. Dans ce cas, le domaine devient bidimensionnel et cette représentation est dans la suite notée « **2D** ».

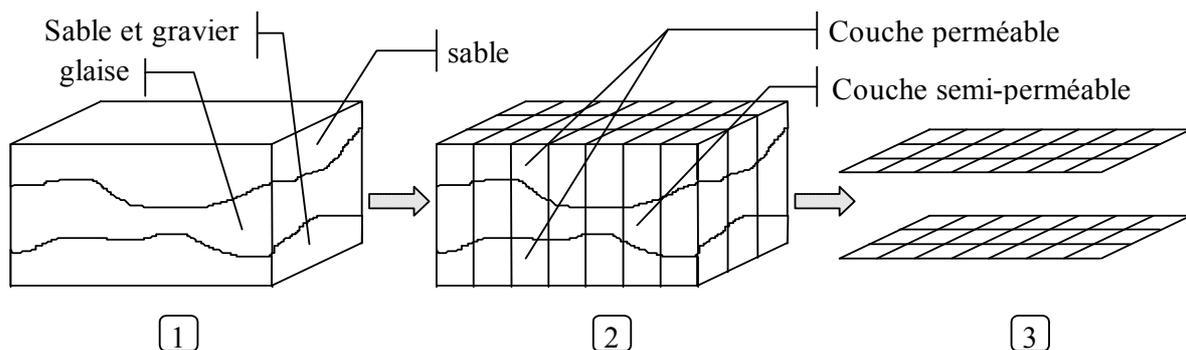


Figure 1 Modèle multicouche utilisé dans le logiciel Talisman

2.2 Représentation des données naturelle et puissante

Afin de représenter le milieu souterrain composé de différentes couches avec des géométries, composants et propriétés de ces composants différentes, la conception suivante est utilisée dans Talisman :

- Pour le cas *3D*, chaque couche est représentée par un maillage composé de *cellules bidimensionnelles* rectangulaires (comme on peut le voir sur la Figure 1), auxquelles on associe le niveau du *toit* et du *substratum*. Chaque maille représente alors en effet un *prisme* (avec notamment une épaisseur verticale). Le substratum d'une maille et le toit de la maille qui se trouve en dessous coïncident, c'est à dire qu'on a finalement un vrai *maillage des prismes* qui recouvre *tout le domaine tridimensionnel*.
- Pour le cas *2D multicouche*, on représente toujours chaque couche par un maillage composé de cellules bidimensionnelles rectangulaires, auxquelles on associe le toit et le substratum. La distance verticale entre le substratum d'une maille et le toit de

la maille qui se trouve en dessous définit ensuite l'épaisseur de la couche semi-perméable qui quant à elle, rappelons, n'est pas directement prise en compte dans ce cas.

- Pour le cas *2D*, on pourrait s'imaginer qu'on utilise une seule *couche* qu'on *tourne verticalement* et ne tient pas de compte des propriétés du toit et du substratum.

En plus de cette représentation fréquemment rencontrée dans l'hydrogéologie, l'exclusivité de Talisman est dans le fait suivant :

- On permet de *raffiner* les *cellules rectangulaires* individuelles de chaque couche dans des sous-maillages, comme c'est indiqué par le trait interrompu sur la Figure 2 ci-dessous.

2.3 Equations approuvées par la pratique hydrogéologique

Nous décrivons ici les lois physiques dirigeant l'écoulement de l'eau souterraine et le transport des contaminants, considérés en Talisman.

2.3.1 Ecoulement

Correspondant au choix de la représentation du domaine, Talisman permet différents choix des équations décrivant l'écoulement de l'eau souterraine :

- **L'équation de Richards.** Cette équation doublement non linéaire est l'équation générale décrivant l'écoulement de l'eau souterraine mélangée à de l'air dans un milieu poreux, en régime transitoire non saturé. Elle est disponible dans Talisman pour des domaines 3D et 2D. Au cas 3D, la hauteur piézométrique dépend de la coordonnée verticale dans la couche ; en conséquence, il y devrait avoir plusieurs couches de données (maillages du calcul) (avec des mêmes propriétés du milieu) pour représenter une couche géologique.
- **L'équation de Dupuit.** L'équation de Dupuit est basée sur l'intégration de l'équation de Richards à travers de l'épaisseur d'une couche sous la condition que des écoulements tridimensionnels réels sont essentiellement des écoulements bidimensionnels horizontaux dans cette couche (les gradients hydrauliques très petits verticalement). On arrive ainsi à une expression plus facile : comme la hauteur piézométrique ne varie pas dans la couche, elle ne dépend pas dans cette couche de la coordonnée verticale et en conséquence, une approximation avec seulement une couche de données (maillage du calcul) par couche géologique est suffisante. En plus, l'équation résultante est moins non linéaire et il est plus facile de l'approcher numériquement. L'équation sous cette forme est disponible dans Talisman pour des domaines 3D.
- **L'équation de Hantush.** On peut compléter l'hypothèse de Dupuit par l'hypothèse que les écoulements dans les couches semi-perméables séparant des aquifères perméables sont uniquement monodimensionnels et verticaux et que les échanges se font par la drainance sans l'emménagement dans ces couches, ce qui est le cas si la perméabilité de ces couches est petite. C'est précisément pour ce cas que les domaines 2D multicouche ont été ciblés.

On permet sous Talisman de simuler deux régimes :

- **Captif.** Dans ce régime, le milieu poreux de tout le domaine est saturé. En autres mots, la hauteur piézométrique est supérieure à la cote du toit du domaine.
- **Libre.** Dans ce régime, le milieu poreux d'une partie du domaine est désaturé, contenant à la fois de l'air et de l'eau. En autres mots, la hauteur piézométrique est inférieure à la cote du toit du domaine. C'est ce régime, ou encore la transition entre les deux, qui donne lieu aux phénomènes non linéaires.

Egalement, Talisman permet l'utilisateur de choisir deux modes temporelles :

- **Permanent.** Ceci permet d'obtenir directement des solutions équilibrées.
- **Transitoire.** Cette variante permet de tenir compte des variations réelles des conditions et de la solution au cours du temps.

2.3.2 Transport

Le modèle de transport de Talisman décrit la variation de la concentration d'une espèce dissoute dans l'eau souterraine. Il permet de prendre en compte les phénomènes suivants :

- **Advection.** Les particules du polluant peuvent dans un premier temps être déplacées par le champ de la vitesse issue du modèle d'écoulement.
- **Diffusion moléculaire.** Par ce phénomène, une migration Brownienne des particules a lieu.
- **Dispersion cinématique.** Ceci est un phénomène de mélange essentiellement lié à l'hétérogénéité des vitesses microscopiques dans un milieu poreux.
- **Adsorption sur la surface de la masse poreuse.** Les particules du polluant peuvent se fixer sur la surface de la masse poreuse, y rester attachées pendant un certain temps, et puis de nouveau se libérer. On admet dans Talisman notamment les isothermes de **Freundlich** et de **Langmuir**.
- **Réactions chimiques.** Ce dernier phénomène peut par exemple décrire la biodégradation du polluant.

2.4 Interface d'utilisateur élaboré et interactif

Talisman est une application pour la plate-forme Windows disposant d'une interface très élaborée et très interactive, permettant en particulier facilement de :

- **Créer, gérer, importer et exporter des données** décrivant le **domaine** d'étude.
- A partir d'un tableur intégré, **visualiser** et **éditer** pour chaque couche des **données** de **chaque maille**.
- **Raffiner le maillage** localement pour mieux simuler les zones d'un grand intérêt, comme par exemple les villes et villages ou encore les puits.
- **Visualiser** les résultats du calcul, et ceci aussi **en temps réel**.

2.5 Schéma numérique innovant, combinant les avantages des volumes finis et des éléments finis

Dans le domaine du milieu poreux, deux méthodes numériques sont aujourd'hui les plus populaires. La *méthode des éléments finis* peut très facilement être utilisée sur des maillages non structurés, qui peuvent notamment être raffinés localement, et permet de discrétiser aisément des tenseurs de diffusion–dispersion sous la forme matricielle, tels qu'on les rencontre dans le transport des polluants. Elle souffre par contre de problèmes avec la conservation locale de la masse, notamment en présence de la convection et de la réaction, et d'oscillations numériques injustifiées lorsque l'influence du terme de convection, celui de réaction ou celui du temps est grand. Aussi, il n'est pas possible de l'utiliser sur des maillages qui ne se raccordent pas, comme celui indiqué sur la Figure 2 par le trait interrompu.

La *méthode des volumes finis* centrée par maille permet une discrétisation facile, précise et robuste des équations fortement non linéaires, garantit toujours la conservation locale de la masse du contaminant et évite des oscillations non justifiées dans les termes de convection, réaction et du temps et peut être définie sur des maillages non structurés. En revanche, il n'est pas possible de facilement raffiner les maillages, ni de discrétiser aisément des tenseurs de diffusion–dispersion matriciels. Finalement, cette méthode exige l'utilisation des maillages qui se raccordent et exclut donc par exemple des maillages comme celui de la Figure 2.

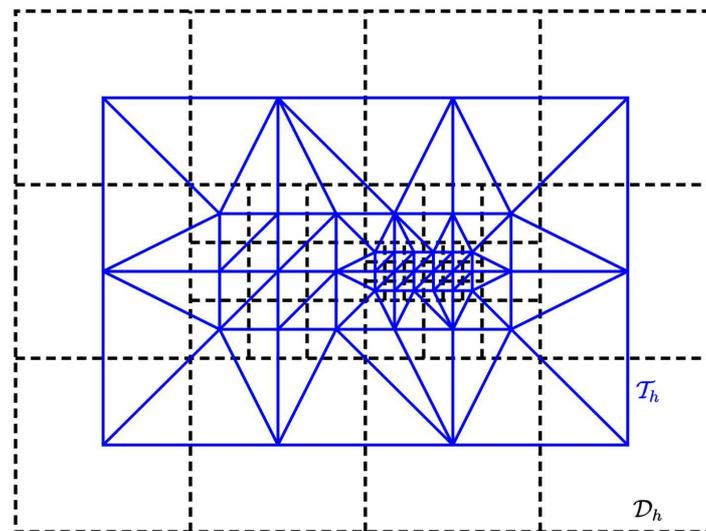


Figure 2 Maillage carré et localement raffiné qui ne se raccorde pas et maillage triangulaire dual

Dans Talisman, une *méthode combinée volumes finis – éléments finis* est implémentée. Cette méthode permet de remédier à la plupart des inconvénients et d'utiliser le meilleur de chacune des deux méthodes classiques mentionnées ci-dessus. Elle a été spécialement conçue pour Talisman et discrétise les termes de convection, de réaction, de dérivée en temps et les termes sources à l'aide de la méthode des volumes finis centrée par maille sur le maillage donné rectangulaire, qui peut être raffiné localement sans se raccorder. Le terme de diffusion est ensuite discrétisé à l'aide de la méthode des éléments

finis sur un maillage de triangles, construit à partir du maillage initial, indiqué sur la Figure 2 par le trait plein. Cette méthode possède des propriétés suivantes :

- **Conserve localement** (maille par maille) la **masse**. Ceci exprime précisément tout d'abord que la variation de la quantité de matière au cours du temps dans chaque maille, ajouté de la somme des flux entrant et sortant par rapport à son bord, est égale au débit rajouté et prélevé dans cette maille. Deuxièmement, ceci signifie que le flux sortant d'une maille est égal au flux entrant dans sa voisine.
- **Permet de discrétiser** aisément des **tenseurs de diffusion–dispersion généraux**. Plus particulièrement, Talisman est bien adapté pour la prise en compte des tenseurs fortement **inhomogènes** (possédant des fortes variations spatiales) et **anisotropes** (préférant certaines directions du flux). Notamment, on a le choix entre les **moyennes arithmétiques** et les **moyennes harmoniques**.
- Garantit les **résultats physiquement corrects**. Il n'y a notamment pas de valeurs négatives de la hauteur piézométrique ou de la concentration (au moins sous certaines conditions sur le maillage).
- **Ne produit pas** des **oscillations non justifiées** si l'influence du terme de convection, de réaction ou du temps est grande. En même temps, Talisman réduit la dissolution rapide des frontières des gradients forts engendré par le flux numérique amont en tenant compte de la proportion locale de la convection et de la diffusion, afin de n'ajouter au schéma que le minimum de diffusion numérique nécessaire à assurer la stabilité.
- Permet une **discrétisation facile, précise et robuste** des **équations fortement non linéaires**. Notamment, le cas de l'isotherme de Freundlich, entraînant la présence possible des ondes progressives dues au terme fortement non linéaire parabolique dégénérée de l'équation dans ce cas, est traité d'une manière extrêmement efficace, permettant de non seulement éviter toute régularisation parabolique, mais en plus de réduire le nombre d'inconnues des systèmes linéaires.
- Permet l'**utilisation** des **maillages localement raffinés**.
- Permet l'**utilisation** des **maillages qui ne se raccordent pas**, comme celui indiqué sur la Figure 2 par le trait interrompu.
- **Coïncide** avec la **méthode des volumes** finis sous certaines conditions, notamment sur des maillages non divisés.

2.6 Méthodes de résolution performantes

Concernant les méthodes de résolution, Talisman utilise :

- Une **discrétisation en temps complètement implicite**. Cette discrétisation permet de garantir des bonnes propriétés des solutions approchées et notamment leur stabilité et en combinaison avec d'autres outils (méthode de Newton, méthode Bi-CGStab, adaptativité) des performances exceptionnelles.
- La **méthode de Newton** pour la solution des **systèmes non linéaires**.

- La **méthode Bi-CGStab** itérative rapide et appropriée aux problèmes traités pour la solution des **systèmes linéaires**.
- Différents types de **préconditionnement** et couplage avec un **postconditionnement** est aussi disponible.

2.7 Contrôle d'erreur, efficacité et précision par adaptativité en espace et en temps

La solution calculée numériquement par ordinateur ne coïncide pas exactement avec la solution des équations données. Dans Talisman, en utilisant la théorie des *estimations d'erreur a posteriori*, on peut :

- Donner une **estimation d'erreur relative** du calcul.
- Prédire la **distribution d'erreur sur le maillage**.
- Estimer l'**erreur** due au **pas du temps** actuel.

Non seulement que Talisman fournit l'utilisateur avec ces quantités, mais il en peut aussi profiter pour :

- **Raffiner automatiquement** des endroits du **maillage** où la précision de la solution approchée n'est pas suffisante dans de but d'y diminuer l'erreur.
- **Raffiner automatiquement** le **pas du temps** afin de diminuer l'erreur due à la discrétisation temporelle.
- **Déraffiner** des endroits du **maillage** où la précision de la solution approchée devient suffisante.
- **Déraffiner** automatiquement le **pas du temps**.

Par conséquent, le calcul a des propriétés suivantes :

- **Efficacité.** Ceci concerne notamment les problèmes transitoires. Par exemple, en déplaçant une partie très raffinée du maillage avec le déplacement des polluants dans le modèle de transport, il suffit beaucoup moins des mailles (et donc beaucoup moins de la mémoire et du temps calcul) pour mener une simulation précise que pour attendre cette même précision sur un maillage fixe fin.
- **Précision garantie.** L'utilisateur peut spécifier l'erreur maximale relative qu'il permet dans le calcul et Talisman le fournit la solution approchée satisfaisant ce critère.

2.8 Concepts de programmation C++ orienté objets au cœur de Talisman

Talisman est un logiciel :

- Programmé dans le langage **C++**.
- Entièrement basé sur des idées de la **programmation orientée objets**, le permettant une grande structuration et répartition des tâches absolument nécessaire pour gérer des fonctionnalités différentes.

3. Documentation de Talisman

Le logiciel Talisman est documenté sur trois niveaux :

- **Utilisateur.**
- **Concepteur.**
- **Programmeur.**

Notamment, il y a des documentations suivantes :

- **Présentation générale.** Contient une explication claire et rapide des idées de base.
- **Manuel d'utilisation.** Donne toutes les instructions nécessaires afin de pouvoir travailler avec Talisman.
- **Documentation technique.** Contient tous les détails sur les domaines, équations, maillages, schémas numériques, solveurs linéaires et non linéaires, contrôle d'erreur et adaptativité.
- **Manuel du programmeur.** Donne les détails sur la conception du code source de Talisman et son organisation et un aperçu des différentes classes d'objets utilisés dans Talisman.
- **Documentation du code source.** Le code source est entièrement et systématiquement commenté et son aperçu permettant de s'orienter rapidement est généré par le logiciel DoxyGen sous forme .html.

4. Sommaire de Talisman

Le logiciel Talisman permet de :

- Prendre en compte des domaines souterrains tridimensionnels entiers, systèmes des couches aquifères uniquement ou des coupes bidimensionnelles verticales du sous-sol.
- Représenter d'une manière naturelle et puissante des données du milieu poreux.
- Discrétiser une gamme étendue des équations les plus adaptées au cas d'étude et simuler ainsi les écoulements souterrains dans la plupart des conditions structurales et de fonctionnement qui peuvent être rencontrées dans les systèmes hydrogéologiques naturels.
- Simuler le transport des polluants dissous en prenant en compte les phénomènes principaux.
- Ajuster dynamiquement le maillage du calcul et le pas de temps selon changements importants des quantités d'intérêt (typiquement le maillage suit le déplacement d'un polluant).
- Faire ainsi des simulations précises et efficaces.
- Atteindre l'erreur relative donnée par l'utilisateur.

- Donner des résultats physiquement corrects (pas des concentrations négatives, bilans de la masse satisfaits).

Le logiciel Talisman dispose de :

- Interface d'utilisateur élaboré et interactif.
- Visualisation des résultats du calcul en temps réel.
- Schéma numérique innovant, combinant les avantages des volumes finis et des éléments finis.
- Discrétisation en temps complètement implicite, assurant une stabilité exceptionnelle des solutions approchées.
- Solveur non linéaire de Newton fort puissant.
- Solveur Bi-CGStab linéaire itératif rapide et approprié aux problèmes traités.
- Documentation profonde aux trois niveaux (utilisateur, concepteur, programmeur).

Le logiciel Talisman est basé sur :

- Le système d'exploitation Windows.
- Concepts de programmation C++ orienté objets.
- La maîtrise complète des doubles enjeux hydrogéologiques et mathématiques.

PARTIE 2 : MANUEL D'UTILISATION

1. Les opérations d'ouverture et de fermeture

1.1 Lancement de Talisman

Talisman est une application Windows et se lance de façon classique en cliquant deux fois sur son icône. Normalement, on peut l'exécuter sur toutes les versions de Windows et il n'y a pas besoin des bibliothèques supplémentaires.

1.2 Création d'un nouveau modèle

Pour créer un modèle, sélectionner *Modèle* dans la barre d'outils (cf. Figure 4) et cliquer ensuite sur *Nouveau*. Dans la fenêtre qui apparaît, il faut spécifier :

- type de modèle d'écoulement : Dupuit 3D, Hantush 2D multicouche, Richards 3D, Richards 2D
- nombre de couches
- nombre de lignes
- nombre de colonnes
- taille des mailles

1.3 Ouverture d'un modèle existant

Pour ouvrir un modèle déjà créé :

- Sélectionner *Modèle* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Ouvrir*.
- Ou cliquer sur  dans la barre d'icônes.

Une fenêtre de dialogue permettant de naviguer dans les répertoires et d'ouvrir le modèle déjà mémorisé apparaît.

1.4 Ajustement d'un modèle

Les spécifications d'un modèle créé ou lu du disque ne sont pas définitives. Choissant *Paramètres* dans la barre d'outils et ensuite *Paramètres généraux*, on peut (re-)spécifier (voir Figure 3) :

- Type de modèle d'écoulement : Dupuit 3D, Hantush 2D multicouche, Richards 3D, Richards 2D.
- On peut choisir si chaque maille va porter aussi des données correspondantes au problème de transport. Si on est seulement intéressé par le problème d'écoulement, il est recommandé de ne pas inclure les données de transport afin d'économiser la mémoire.

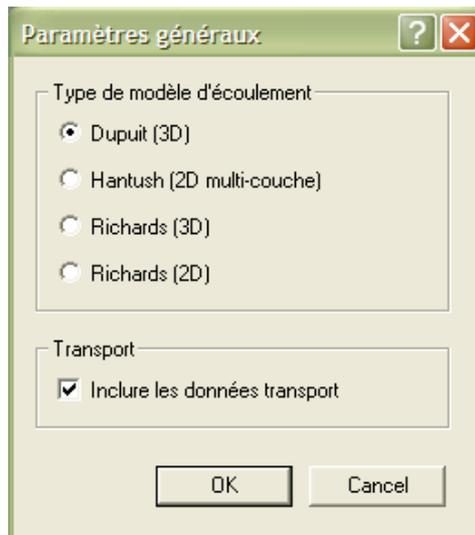


Figure 3 Fenêtre *Paramètres généraux*

1.5 Enregistrement d'un modèle

A chaque instant, on peut enregistrer un modèle et les changements de ses paramètres :

- Sélectionner *Modèle* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Enregistrer* ou *Enregistrer sous* (dans le deuxième cas ou lors d'un premier enregistrement, une fenêtre de dialogue permettant de naviguer dans les répertoires apparaît).
- Pour enregistrer, on peut aussi cliquer sur  dans la barre d'icônes.

1.6 Fermeture d'un modèle

Pour fermer un modèle seulement (pas Talisman entièrement) :

- Sélectionner *Modèle* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Fermer*.

1.7 Fermeture de Talisman

Pour fermer Talisman, deux possibilités se proposent :

- Sélectionner *Modèle* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Quitter*.
- Ou cliquer sur l'icône de la fermeture de la fenêtre Windows de Talisman.

2. Discrétisation du modèle créé

On va discuter ici la discrétisation spatiale ainsi que temporelle.

2.1 Discrétisation spatiale

C'est ici qu'on définit la forme précise du domaine à simuler.

- Sélectionner *Paramètres* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Discrétisation spatiale*.

2.1.1 Frontière du modèle

Le nombre de lignes et de colonnes du modèle a été mis en mémoire lors de sa création. Pour que la forme des couches du modèle corresponde à la réalité du terrain, où chaque couche n'est pas nécessairement un rectangle, on peut désactiver des mailles choisies.

Après avoir cliqué sur *Frontières du modèle*, le maillage du modèle apparaît. L'activation et désactivation des mailles se fait en cliquant sur chacune d'elles. Cette opération est à répéter pour les différentes couches. Pour naviguer entre les différentes couches, il suffit de cliquer sur les icônes  et .

2.1.2 Repérage du modèle

On peut repérer le domaine en rentrant les coordonnées de son coin inférieur gauche, en cliquant sur *Repérage du modèle*. Ici, rentrer les coordonnées du coin inférieur gauche qui servira de référence. Attention, on spécifie ces coordonnées en milliers de [L] ! Par défaut, ce coin a pour coordonnées {0,0}.

2.1.3 Taille des colonnes

Il est possible de choisir la taille des colonnes en cliquant sur *Taille des colonnes*.

2.1.4 Taille des lignes

Il est possible de choisir la taille des lignes en cliquant sur *Taille des lignes*.

2.2 Discrétisation temporelle

Les calculs sur le modèle peuvent être conduits soit en régime permanent, soit en régime transitoire.

- Sélectionner *Paramètres* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Discrétisation temporelle*.

2.2.1 Régime permanent

Il correspond à un état stationnaire du système.

2.2.2 Régime transitoire

Il faut dans un premier temps entrer le nombre de période d'imposition, puis saisir les paramètres standards :

- durée d'une période
- nombre de pas de temps par période

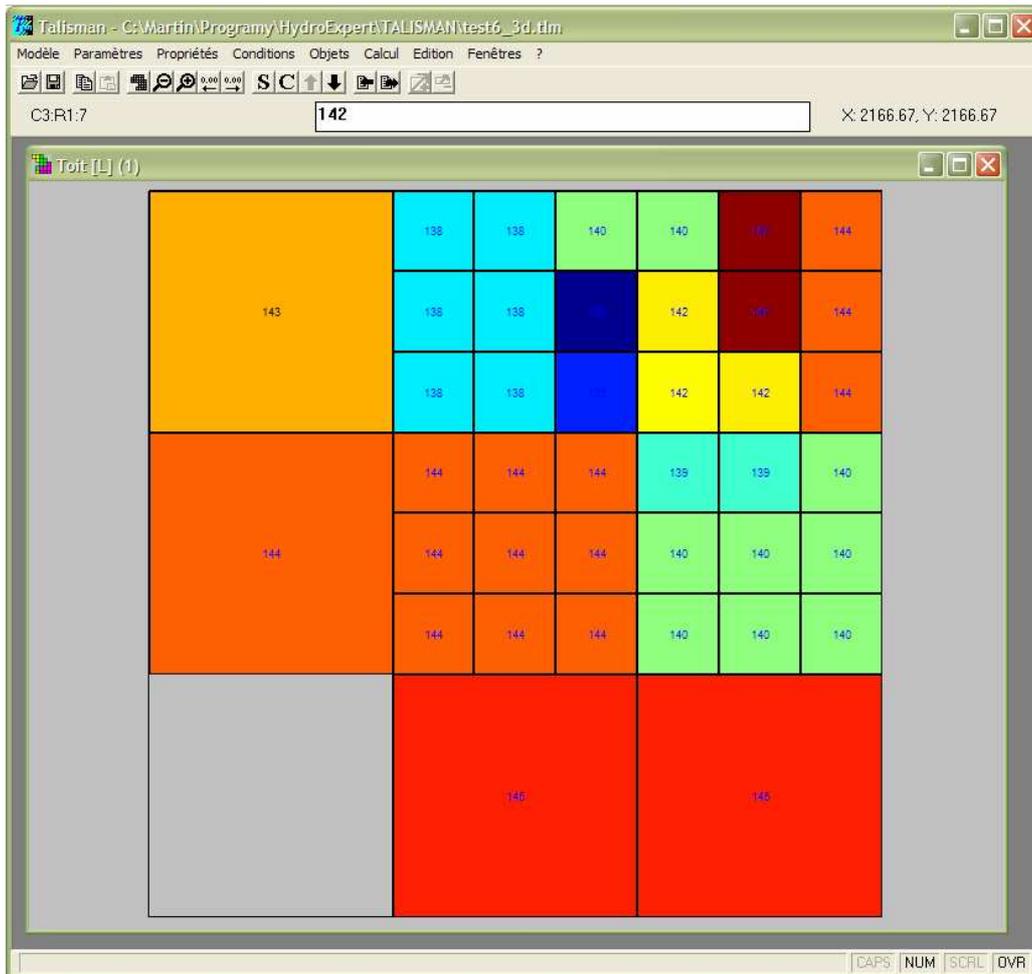


Figure 4 Fenêtre typique de Talisman

3. La saisie des données physiques du modèle

Les données physiques du modèle sont saisies dans un éditeur des mailles pour chaque couche. Pour saisir la quantité désirée, sélectionner *Propriétés* dans la barre d'outils, puis choisir la donnée souhaitée :

3.1 Données pour écoulement Dupuit ou Hantush

Ces données sont communes pour tous régimes de Talisman (tous types d'écoulement et simulation du transport) :

- **Toit** de la couche. Il correspond à la coordonnée verticale du toit de la couche, l'unité est longueur [L].
- **Substratum** de la couche. Il correspond à la coordonnée verticale du substratum de la couche, l'unité est longueur [L].
- **Emmagasinement libre**. Différence entre la *teneur volumique en eau à saturation* (le quotient du volume du milieu poreux de la partie libre entièrement occupé par l'eau et de tout le volume), qui correspond à la *porosité*, et de la *teneur en eau résiduelle* (le quotient du volume du milieu poreux de la partie libre occupé par l'eau quand toute l'eau mobilisée est partie et de tout le volume), adimensionnelle. Emmagasinement libre

peut aussi représenter le produit entre un *emmagasinement spécifique* caractéristique du milieu aquifère et la *hauteur mouillée* (voir ci-dessous pour l'explication de ces termes).

- **Emmagasinement spécifique.** Donnée par la compressibilité de l'eau, l'unité est $[L^{-1}]$.
- **Perméabilité horizontale.** La composante horizontale de la perméabilité (aussi notée conductivité hydraulique), l'unité est $[LT^{-1}]$.
- **Perméabilité verticale.** La composante verticale de la perméabilité (aussi notée conductivité hydraulique), l'unité est $[LT^{-1}]$.
- **Porosité.** Donnée par le quotient du volume du milieu poreux de la partie libre et de tout le volume. Correspond à la teneur volumique en eau à saturation, adimensionnelle.
- **Piézométrie** (hauteur piézométrique). L'inconnue des modèles d'écoulement, l'unité est $[L]$.
- **Localisation des charges constantes.** On peut définir ici les mailles où la hauteur piézométrique sera constante.

3.2 Données pour écoulement Richards

On peut uniquement saisir ces données si on a choisit le modèle d'écoulement : Richards 3D ou Richards 2D.

- **Paramètre α du modèle de van Genuchten.** L'unité est $[L^{-1}]$.
- **Paramètre n du modèle de van Genuchten.** Adimensionnel.

3.3 Données pour transport

On peut uniquement saisir ces données si on a choisit d'inclure les données du transport.

- **Concentration.** L'inconnue du modèle de transport, l'unité est $[ML^{-3}]$.
- **Localisation des concentrations constantes.** On peut définir ici les mailles où la concentration sera constante.
- **Dispersivité longitudinale.** L'unité est $[L]$.
- **Dispersivité transversale.** L'unité est $[L]$.
- **Diffusivité moléculaire.** L'unité est $[L^2T^{-1}]$.
- **Densité apparente.** L'unité est $[ML^{-3}]$.
- **Premier paramètre d'adsorption.** L'unité est $[L^3M^{-1}]$.
- **Deuxième paramètre d'adsorption.** Adimensionnel.
- **Taux de décroissance du 1er ordre.** L'unité est $[T^{-1}]$.

Remarque : la densité apparente, les paramètres d'adsorption et le taux de décroissance peuvent uniquement être saisis en fonction des choix faits dans le dialogue *Adsorption et réaction chimiques*.

4. Les outils de manipulation

On décrit dans cette section les nombreux outils de manipulation disponibles sous Talisman pour chaque propriété saisie précédemment. Après la sélection d'une des propriétés dans la barre d'outils, le maillage d'une couche du modèle apparaît. En haut de l'écran, la propriété saisie est indiquée ainsi que le numéro de la couche où l'on se place (ex : Toit [L] (1), cf. Figure 4).

4.1 Se déplacer dans les couches

Une fois qu'une fenêtre est affichée, sélectionner les flèches  et  dans la barre d'icônes pour monter ou descendre dans les couches.

4.2 Sélectionner des mailles

En sélectionnant *Edition* dans la barre d'outils et cliquant ensuite sur *Sélectionner*, ou en cliquant sur  dans la barre d'icônes, on peut sélectionner les mailles :

- suivant une valeur
- suivant une fourchette de valeurs
- toutes les mailles

Pour modifier les valeurs d'une zone sélectionnée, sélectionner *Edition* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Modifier les valeurs de la sélection* ou cliquer sur  dans la barre d'icônes. Plusieurs options sont disponibles :

- changer par
- additionner
- multiplier par

4.3 Sélectionner une zone

Cliquer sur une extrémité de la zone qu'on souhaite choisir et déplacer la souris en gardant le bouton appuyé jusqu'à ce que la zone voulue soit sélectionnée. Elle apparaît en bleu sur l'écran. Cliquer sur le bouton droit de la souris puis sur *Afficher sélection*. Pour annuler la sélection, cliquer sur le bouton droit de la souris puis sur *Annuler sélection*. Pour annuler la sélection et revenir à une vue globale, cliquer sur *Supprimer sélection*.

4.4 Agrandir ou réduire la vue d'une couche ou d'une zone

On peut zoomer et dézoomer avec Talisman :

- Sélectionner *Edition* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Zoom +*, *Zoom -*.
- Ou cliquer sur  dans la barre d'icônes.



Figure 5 Fenêtre *Remplissage*

4.5 Coloriser les valeurs

Il est souvent très utile de visualiser la fenêtre active en zones de couleurs correspondant à des fourchettes de valeurs. Pour cela :

- Sélectionner *Edition* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Visualisation*.
- Cliquer sur  dans la barre d'icônes.

Dans la fenêtre *Remplissage*, on peut définir la valeur minimale et maximale à être affichée, visualisation en couleurs ou en noir et blanc seulement ou encore choisir de visualiser le colorbar.

4.6 La division des mailles

Pour affiner la représentation géographique du modèle, il est possible de diviser les mailles. Il faut pour cela sélectionner les mailles à diviser et cliquer ensuite sur le bouton droit de la souris puis sur soit *Diviser avec interpolation* ou *Diviser données constantes*. Une interpolation à partir des valeurs dans des mailles voisines est appliquée au premier cas (sauf pour les données du toit et du substratum), alors que dans le deuxième, les valeurs dans des sous-divisions d'une maille sont données par les valeurs dans cette maille d'origine. Les mailles se divisent toujours en neuf sous-mailles et cette opération peut être répétée jusqu'au neuf fois, le modèle possède alors dix ordres de divisions. Immédiatement, les divisions se visualisent. Les opérations suivantes sont possibles :

- Pour visualiser uniquement le maillage grossier, cliquer sur le bouton droit de la souris puis sur *Cacher divisions*.
- Pour visualiser le maillage divisé, cliquer sur le bouton droit de la souris puis sur *Afficher divisions*.
- Pour supprimer la division, sélectionner la zone et cliquer sur le bouton droit de la souris puis sur *Annuler division*.

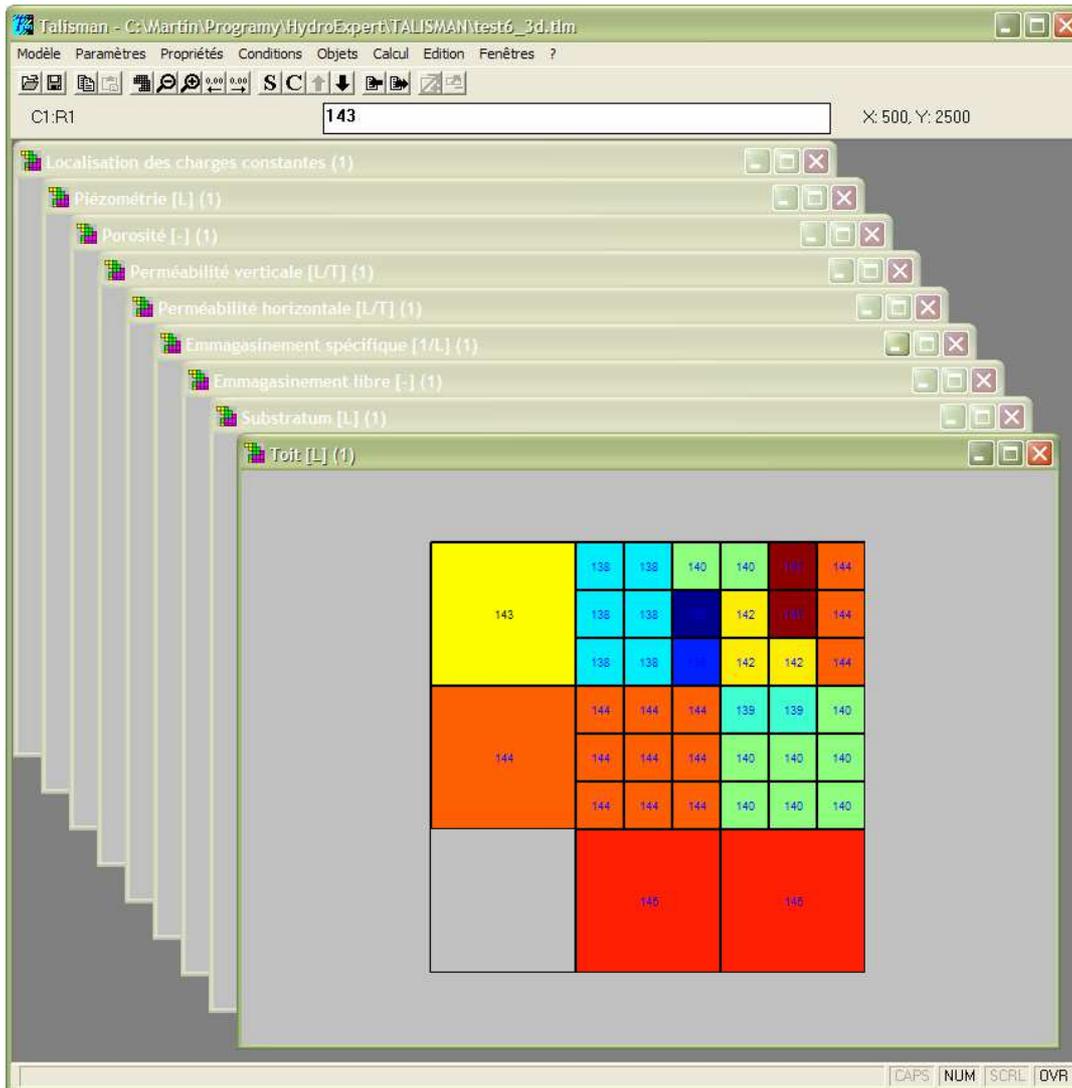


Figure 6 Fenêtres en cascade

4.7 Organisation des fenêtres

On peut organiser des fenêtres des manières différentes :

- Sélectionner *Fenêtre* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Cascade*. Les fenêtres se superposent, comme sur la Figure 6.
- Sélectionner *Fenêtre* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Mosaïque*. Les fenêtres se répartissent à l'écran, comme sur la Figure 7.
- Sélectionner *Fenêtre* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Close all*. Toutes les fenêtres ouvertes se ferment.
- Sélectionner *Edition* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Mode plein écran/partiel*. La totalité du maillage de la fenêtre active, par exemple la perméabilité, s'affiche à l'écran. On revient à la vue précédente par le même procédé.

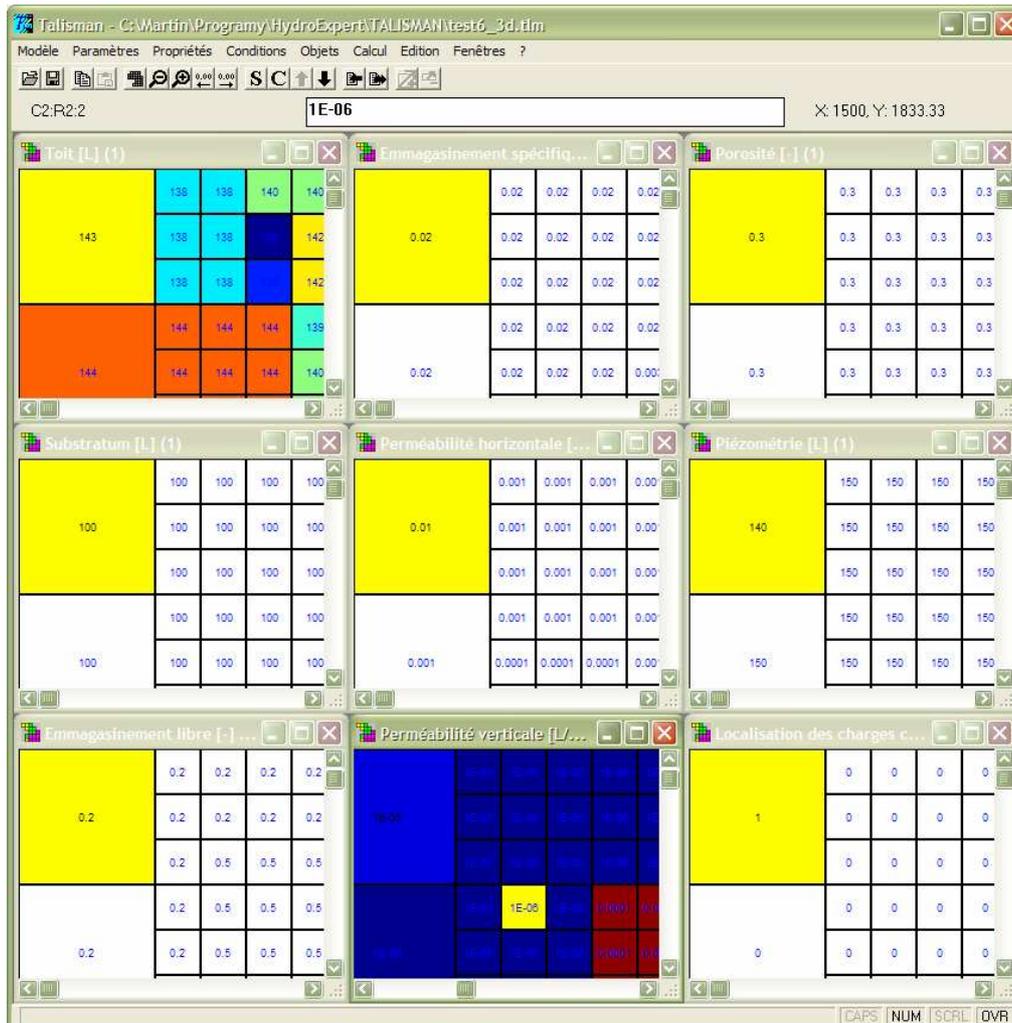


Figure 7 Fenêtres en mosaïque

5. Conditions

On spécifie les conditions imposées, les sources et les débordements de la manière suivante :

5.1 Débordement

Les mailles à débordement sont des mailles où l'eau peut sortir du sous-sol. On les spécifie comme suit :

- Sélectionner *Conditions* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Mailles à débordement* puis *Localisation des mailles à débordement*.
- Entrer les emplacements des différentes mailles à débordement en affectant la valeur 1 aux différentes mailles sélectionnées.
- Sélectionner *Conditions* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Mailles à débordement* puis *Niveau de débordement*.
- Entrer les côtes de débordement (en [L]) aux mailles précédemment définies (elles sont indiquées en rouge).

- Sélectionner *Conditions* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Mailles à débordement* puis *Conductance hydraulique*.
- Entrer les *conductances hydrauliques* aux mailles précédemment définies (elles sont indiquées en rouge). L'unité est $[T^{-1}]$.

5.2 Recharge

La recharge est spécifiée comme suit :

- Sélectionner *Conditions* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Recharge* puis *Zones de recharge*.
- Définissez ensuite sur le maillage qui est à l'écran les zones de recharges en leur affectant un chiffre. Utiliser autant de chiffre qu'il y a de zones de recharge différentes (1, 2, 3,...).
- Sélectionner *Conditions* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Recharge* puis *Historique de la recharge*.
- Entrer les valeurs de recharge dans le tableau vierge qui apparaît. Ce tableau possède autant de colonnes qu'il y a de zones de recharges définies. En plus, en régime transitoire, le tableau d'historique de la recharge possède autant de lignes qu'il y a de périodes définies. Remplir le tableau comme précédemment. Unité de la recharge : $[LT^{-1}]$ (en régime permanent ainsi qu'en régime transitoire).

5.3 Puits

Pour la simulation d'écoulement et du transport, on spécifie les puits de la manière suivante :

- Sélectionner *Conditions* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Puits* puis *Localisation des puits*.
- Entrer les emplacements des différents puits en affectant la valeur 1 aux différentes mailles sélectionnées.
- Sélectionner *Conditions* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Puits* puis *Historique des débits aux puits*.
- Entrer les valeurs de débit pour chaque puits défini dans le tableau vierge qui apparaît. Ce tableau possède autant de colonnes qu'il y a de puits définis. En régime transitoire, le tableau d'historique des débits possède autant de lignes qu'il y a de périodes définies. Remplir le tableau comme précédemment. Unité des débits : $[M^3T^{-1}]$.

Pour la simulation du transport, on peut en plus spécifier les concentrations aux puits :

- Sélectionner *Conditions* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Puits* puis *Historique des concentrations aux puits*.
- Entrer les valeurs des concentrations pour chaque puits défini dans le tableau vierge qui apparaît. Ce tableau possède autant de colonnes qu'il y a de puits définis. En régime transitoire, le tableau d'historique des concentrations possède autant de lignes qu'il y a de périodes définies. Remplir le tableau comme précédemment. Unité des concentrations au puits : $[ML^{-3}]$.

5.4 Limites imposées

Pour la simulation d'écoulement et du transport, on spécifie les hauteurs piézométriques imposées comme suit :

- Sélectionner *Conditions* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Limites imposées* puis *Localisation des charges imposées*.
- Entrer les emplacements des charges imposées en donnant la valeur 1 aux mailles sélectionnées.
- Sélectionner *Conditions* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Limites imposées* puis *Historique des charges imposées*.
- Entrer les valeurs des charges imposées pour chaque maille. Le tableau comporte autant de colonnes que des mailles sélectionnées. En régime transitoire, le tableau d'historique des charges imposées possède autant de lignes qu'il y a de périodes définies. Remplir le tableau comme précédemment. Unité des charges imposées : [L].

Pour la simulation du transport, on peut en plus spécifier les concentrations imposées :

- Sélectionner *Conditions* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Limites imposées* puis *Localisation des concentrations imposées*.
- Entrer les emplacements des concentrations imposées en donnant la valeur 1 aux mailles sélectionnées.
- Sélectionner *Conditions* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Limites imposées* puis *Historique des concentrations imposées*.
- Entrer les valeurs des concentrations imposées pour chaque maille. Le tableau comporte autant de colonnes que des mailles sélectionnées. En régime transitoire, le tableau d'historique des concentrations imposées possède autant de lignes qu'il y a de périodes définies. Remplir le tableau comme précédemment. Unité des concentrations imposées : [ML⁻³].

5.5 Conditions de flux pour transport

Pour la simulation du transport, on peut aussi spécifier les conditions de flux (pour écoulement, l'analogie se fait avec des puits) :

- Sélectionner *Conditions* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Conditions de flux pour transport* puis *Localisation des conditions de flux*.
- Entrer les emplacements des conditions de flux en donnant la valeur 1 aux mailles sélectionnées.
- Sélectionner *Conditions* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Conditions de flux pour transport* puis *Historique des conditions de flux*.
- Entrer les valeurs des conditions de flux pour transport pour chaque maille. Le tableau comporte autant de colonnes que des mailles sélectionnées. En régime transitoire, le tableau d'historique des conditions de flux possède autant de lignes qu'il y a de périodes définies. Remplir le tableau comme précédemment. Unité des conditions de flux : [MT⁻¹].

Ecoulement		
Epaisseur	0.1	100
Epaisseur du semi-perméable	0.1	100
Perméabilité (horizontale)	1E-08	10
Perméabilité verticale	1E-08	10
Porosité	1E-05	1
Emmagasinement libre	1E-05	100
Emmagasinement spécifique	1E-05	100
Transport		
Dispersivité longitudinale	1E-08	100
Dispersivité transversale	1E-08	100
Diffusivité moléculaire	1E-08	100
Densité apparente	1E-08	100000

Figure 8 Fenêtre *Valeurs limites*

6. Paramètres et fonctionnalités supplémentaires

Les fonctionnalités supplémentaires suivantes sont aussi disponibles sous Talisman :

6.1 Paramètres d'écoulement

On peut spécifier deux paramètres servant à la régularisation des fonctions non linéaires dans des modèles d'écoulement en sélectionnant *Propriétés* dans la barre d'outils et cliquant ensuite sur *Paramètres d'écoulement*. Il s'agit de :

- **Epaisseur minimale d'eau.** Cette valeur est utilisée pour régulariser la définition de la transmisivité (voir Section 6.3) et de la teneur en eau dans des modèles de Dupuit et Hantush. En plus, double de cette valeur représente l'épaisseur minimale d'une couche ou d'un semi-perméable.
- **Epaisseur minimale de débordement.** Cette valeur sert à la régularisation de la fonction non linéaire de débordement.

6.2 Valeurs limites

Pour définir les valeurs limites des différentes quantités, aller dans *Propriétés* dans la barre d'outils et cliquer ensuite sur *Valeurs limites*. Une fenêtre comme celle donnée sur la Figure 8 apparaît.

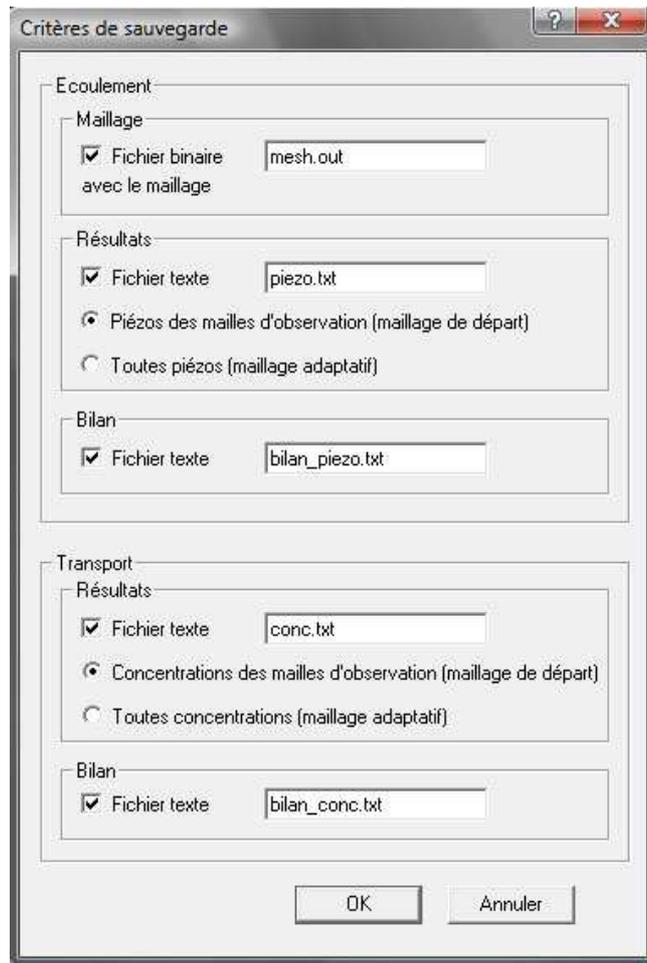


Figure 9 Fenêtre *Critères de sauvegarde*

6.3 Valeurs consultables en lecture seule

En allant dans *Propriétés* dans la barre d'outils et cliquant ensuite sur *Ecoulement et géométrie*, on peut consulter (en lecture seule) :

- **Épaisseur.** Épaisseur de la couche dans la maille, c'est à dire la valeur du toit moins celle de substratum.
- **Épaisseur du semi-perméable.** Uniquement disponible pour le modèle de Hantush.
- **Épaisseur mouillée.** Différence de la hauteur piézométrique et du substratum.
- **Transmissivité.** Perméabilité fois l'épaisseur mouillée si hauteur piézométrique et inférieur au toit. Perméabilité fois l'épaisseur sinon.
- **Drainance vers le haut.** Flux de l'eau dans la maille voisine supérieure.
- **Drainance vers le bas.** Flux de l'eau dans la maille voisine inférieure.
- **Débits de débordements.** Les débits de débordements dans chaque maille à débordement.

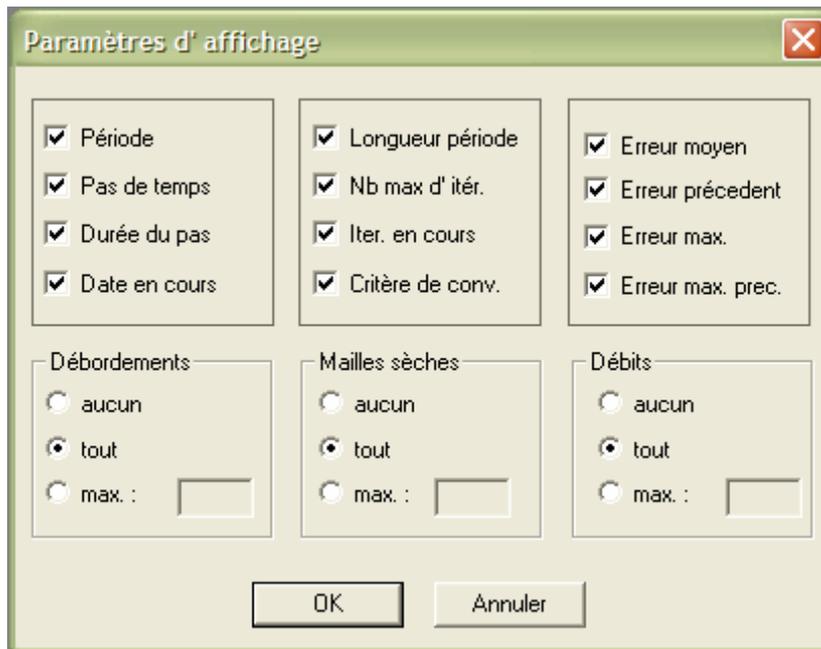


Figure 10 Fenêtre *Paramètres d'affichage*

- **Vecteur des vitesses de Darcy.** Sont disponibles uniquement après la finalisation du calcul d'écoulement. Utilisant   dans la barre d'icônes permet d'augmenter et diminuer les vecteurs visibles. Sélectionnant *Edition* dans la barre d'outils et cliquant ensuite sur *Mode proportionnel/régulier* permet de faire la longueur des vecteurs proportionnelle à la vitesse de Darcy ou égale entièrement.

6.4 Mailles d'observation

En allant dans *Propriétés* dans la barre d'outils et cliquant ensuite sur *Mailles d'observation*, on peut définir des mailles d'observation. C'est sur ces mailles que des résultats des calculs seront sauvegardés si on le choisit (voir Section 6.6).

6.5 Zones de bilan

On peut définir des zones (ensembles des mailles) sur lesquelles on peut observer la satisfaction du bilan de masse, si on choisit cette option (voir Section 6.6). Pour la définition des zones :

- Sélectionner *Propriétés* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Zones de bilan*.
- Sélectionner les différentes mailles et leur affecter un numéro (1, 2, 3, 4,...). Répéter cette opération pour les différentes couches. L'ensemble des mailles avec le même numéro constitue une zone de bilan. Les mailles qui restent à la valeur 0 n'appartiennent pas à aucune zone de bilan.

6.6 Sauvegarde des résultats

En allant dans *Calcul* dans la barre d'outils et cliquant sur *Choix de sauvegarde* on peut (tant pour l'écoulement que pour transport) choisir deux types de sauvegarde des résultats (voir Figure 9) :

- Les valeurs dans des mailles d'observation (voir Section 6.4) sont sauvegardées.
- Les valeurs dans toutes les mailles (en particulier à chaque pas de temps pour des régimes transitoires et aux maillages évolutifs au cas d'adaptativité) sont sauvegardées.

Ici, on peut aussi décider si on veut créer des fichiers avec le bilan de masse. Si ceci est le cas, il y aura toujours les bilans de chaque couche sur chaque pas de temps de chaque période. En plus, si des zones de bilan ont été défini (voir Section 6.5), il y aura aussi des bilans sur ces zones. Enfin, c'est uniquement avant le lancement du calcul qu'il faut spécifier le souhait de la création des fichiers bilan– on ne peut pas produire les bilans après la fin de la simulation. Le fichier *.txt* crée aura la structure suivante (écoulement et transport respectivement) :

Bilan piézo	Entrée		Sortie		Total	
Période 1, temps 1, couche 1						
Terme du bilan	[L ³ /T]	Nb mailles	[L ³ /T]	Nb mailles	[L ³ /T]	Nb mailles
Recharge						
Puits						
Mailles à charge imposée						
Maille à débordement						
Echanges verticaux couche inférieure						
Echanges verticaux couche supérieure						
Echanges horizontaux						
Variation de stock (emmagasinement)						
Bilan total						

.... Période k, temps l, zone m

Bilan concentrations	Entrée		Sortie		Total	
Période 1, temps 1, couche 1						
Terme du bilan	[M/T]	Nb mailles	[M/T]	Nb mailles	[M/T]	Nb mailles
Mailles à concentration imposée						
Mailles à charge imposée						
Echanges verticaux couche inférieure						
Echanges verticaux couche supérieure						
Echanges horizontaux						
Variation de stock (emmagasinement)						
Puits						
Adsorption / désorption						
Dégradation / filiation						
Bilan total						

.... Période k, temps l, zone m

Paramètres de la résolution ✕

Type de problème

Permanent

Transitoire

Adaptativité en temps

Inclure adaptativité en temps

Nbr. max. de raffinements

Adaptativité en espace

Inclure adaptativité en espace

Erreur maximale relative dans le calcul (en %)

Niveau max. de division des mailles (entre 1 et 9)

Schéma numérique

Vol. finis (si pas de raff.)

Vol. finis - éléments finis

Paramètres d'écoulement pour transport

Type de problème

Permanent

Transitoire

Schéma numérique

Vol. finis

Vol. finis - éléments finis

Visualisation

Visualisation pendant le calcul

Moyennes aux interfaces

Moyennes harmoniques

Moyennes arithmétiques

Méthode de Newton pour des problèmes non linéaires

Précision (erreur maximale par maille)

Nombre d'itérations maximal

Précision pour des mailles suspectes

Solution des systèmes linéaires

Précision de la méthode BiCGStab

Nombre d'itérations maximal

Préconditionnement

Aucun

Jacobi

Ssor

PostConc

Figure 11 Fenêtre *Paramètres de la résolution*

6.7 Paramètres d'affichage pendant le calcul

En allant dans *Calcul* dans la barre d'outils et cliquant sur *Paramètres d'affichage des itérations*, on peut choisir des propriétés à visualiser pendant le calcul (voir Figure 10). On peut notamment, après chaque période d'imposition, visualiser :

- Une liste des mailles à débordement.
- Une liste des mailles sèches.
- Une liste des mailles avec des débits.

7. Calcul

Après avoir saisi les données et choisi des différents paramètres, on peut lancer le calcul finalement.

7.1 Calcul hydrodynamique

Pour lancer le calcul hydrodynamique, sélectionner *Calcul* dans la barre d'outils et cliquer ensuite sur *Calcul hydrodynamique*. Fenêtre *Paramètres de la résolution*, voir Figure 11, apparaît. Il faut maintenant saisir des différents paramètres.

Type de problème (régime) :

- **Permanent.** Dans ce cas, même si on a précédemment choisi le régime transitoire en Section 2.2, les calculs seront faite en régime permanent. Concernant des conditions définies en Section 5, leurs valeurs de la première période d'imposition seront utilisées. A noter particulièrement que toutes conditions ont les mêmes unités tant pour le régime permanent que pour le régime transitoire, alors il n'est pas nécessaire de revenir au saisi des contions. En particulier, les données saisies en Section 2.2 restent inchangées, alors qu'il est possible de passer directement par la suite à une simulation en régime transitoire.
- **Transitoire.** Dans ce cas, les données temporelles saisies en Section 2.2, notamment le nombre des périodes d'imposition, durée de chaque période et nombre de pas de temps par période, seront suivies. Pour le cas de plusieurs pas de temps par période, Talisman simplement effectue le nombre des calculs par période donné, en utilisant pour des conditions toujours les valeurs de la période d'imposition correspondante.

Adaptativité en temps (uniquement en régime transitoire) :

- **Adaptativité en temps choisie.** Dans ce cas, Talisman va a priori suivre les périodes d'impositions définies et sur chaque période, il va effectuer le nombre de pas de temps donné. En même temps, il va monitorer l'*erreur relative dans le calcul*. Si elle va avoir la tendance de dépasser sa valeur maximale (saisie dans la fenêtre d'adaptativité en espace), Talisman va raffiner le pas de temps donné par trois, réessayer ainsi et le cas échéant continuer avec les divisions jusqu'au **nombre maximal de raffinements du pas de temps** (cf. ci-dessous).
- **Nombre maximal de raffinements du pas de temps.** Cf. ci-dessus.

Adaptativité en espace :

- **Adaptativité en espace choisie.** Dans ce cas, Talisman va a priori faire les calculs sur le maillage donné. En même temps, il va monitorer l'erreur relative dans le calcul. Si elle va avoir la tendance de dépasser sa valeur maximale (cf. ci-dessous), Talisman va raffiner les mailles où l'estimation sur l'erreur relative est la plus grande, réessayer ainsi et le cas échéant continuer avec les divisions jusqu'au **niveau maximal de divisions des mailles** (cf. ci-dessous).
- **Niveau maximal de divisions des mailles.** Cf. ci-dessus.
- **Erreur maximale relative dans le calcul.** La borne supérieure (en %) sur l'estimation de l'erreur maximale relative (estimation de l'erreur divisée par la norme de la solution approchée). A noter qu'il s'agit seulement d'*estimation*, c'est à dire que l'erreur maximale n'est pas *garantie* au sens strict. Néanmoins, pratiquement, l'estimation est très proche de l'erreur actuelle dans la plupart des cas et on le sait démontrer mathématiquement sous la condition que la dimension des mailles tend vers 0. A noter aussi que pour des problèmes transitoires, l'espoir d'attendre ce critère est seulement fort si on utilise l'adaptativité en temps *et* l'adaptativité en espace. Cet espoir est d'autant plus grand qu'on admet le nombre maximal de raffinements du pas de temps et le niveau maximal de divisions des mailles grand, mais ceci de l'autre côté ralentit des calculs.

Schéma numérique :

- **Volumes finis.** Approprié au cas quand il n'y a pas de raffinements dans le maillage. Notamment impossible d'utiliser au cas d'adaptativité en espace *ou* en temps.
- **Volumes finis – éléments finis.** Approprié dans tous les cas. La seule possibilité si l'adaptativité en espace *ou* en temps est souhaitée.

Visualisation :

- **Visualisation pendant le calcul.** Si une fenêtre avec l'inconnue (hauteur piézométrique pour écoulement, concentration pour transport) est ouverte, Talisman va y reporter l'évolution de cette inconnue en temps réel. On peut ainsi aussi suivre l'évolution du maillage. Particulièrement utile si en plus la colorisation des valeurs a été choisie précédemment sur cette fenêtre (voir Section 4.5).

Moyennes aux interfaces :

- **Moyennes harmoniques.** Option préférée dans le domaine du milieu poreux.
- **Moyennes arithmétiques.** Option non préférée dans le domaine du milieu poreux.

Méthode de Newton pour des problèmes non linéaires :

- **Précision (erreur maximale par maille).** Il s'agit d'erreur maximale qu'on admet dans chaque maille dans la quantité inconnue (hauteur piézométrique pour écoulement, concentration pour transport), pondérée par le rapport de la surface bidimensionnelle de la maille donnée et de la plus petite maille du maillage. Cette pondération donne une préférence de convergence sur des grandes mailles, où la précision doit être encore supérieure.

- **Nombre d'itérations maximal.** Nombre d'itérations maximal de la méthode de Newton. Si atténuée, Talisman va arrêter le calcul et prévenir l'utilisateur qu'il n'était pas possible de trouver la solution approchée.
- **Précision pour des mailles suspectes.** Toutes les mailles où cette précision donnée n'était pas atténuée à la fin de la méthode de Newton seront sorties dans le fichier `MaillesSuspectes.txt`.

Solution des systèmes linéaires :

- **Précision de la méthode Bi-CGStab.** Il s'agit de la précision relative de la solution des systèmes linéaires. La précision de la méthode Bi-CGStab devrait être supérieure à la précision (erreur maximale par maille) de la méthode de Newton. La valeur recommandée est 10^{-6} . Cette précision est seulement importante si le *nombre d'itérations maximal* (cf. ci-dessous) est grand.
- **Nombre d'itérations maximal de la méthode Bi-CGStab.** Dans Talisman, on résout d'habitude des problèmes non linéaires, et ceci par la combinaison de la méthode de Newton et de la méthode Bi-CGStab. La seule valeur qui détermine la précision de la solution approchée est la précision (erreur maximale par maille) de la méthode de Newton. La méthode Bi-CGStab détermine seulement la façon comment la solution avec erreur maximale par maille est trouvée. Si on admet ici un grand nombre d'itérations maximal (100) de la méthode Bi-CGStab, la méthode Bi-CGStab sera précise, mais coûteuse. Une autre possibilité est de limiter le nombre d'itérations maximal de la méthode Bi-CGStab (par exemple par 10 ou 20). Dans ce cas, le résultat de la méthode Bi-CGStab ne sera pas précis, mais il sera très probablement suffisant pour avancer par la méthode de Newton vers une solution acceptable. La parallèle est que si quelqu'un cherche une destination, il peut être utile de ne pas passer trop de temps pour obtenir l'explication du chemin exact à partir de l'endroit où il se trouve maintenant (alors qu'en plus celle la ne peut pas être obtenue exactement), mais qu'il serait probablement plus utile de demander plusieurs explications rapides approximatives au cours du trajet. Recommandation : utiliser des valeurs de nombre d'itérations maximal de la méthode Bi-CGStab modérées.
- **Préconditionnement.** Trois différentes possibilités pour le preconditionnement de la méthode Bi-CGStab sont données :
 - **Aucun.** Pas de preconditionnement.
 - **Jacobi.** Préconditionnement par la matrice de Jacobi.
 - **SSOR.** Préconditionnement SSOR.

L'utilisation du preconditionnement est fortement recommandée et la variante SSOR est préférable. Finalement, on a aussi la possibilité d'utiliser un postconditionnement :

- **Postconditionnement.** Recommandé.

7.2 Calcul du transport

Le calcul de transport se fait selon les mêmes lignes que le calcul hydrodynamique. Il y a seulement deux différences. Tout d'abord, uniquement le schéma volumes finis – éléments finis est autorisé. Deuxièmement, dans la Fenêtre *Paramètres de la résolution* (cf. Figure 11),

on doit faire un choix supplémentaire concernant le modèle d'écoulement, simulé en parallèle afin de donner le champ des vitesses de Darcy, qui est nécessaire dans le modèle de transport.

Type de problème (régime) :

- **Permanent.** Dans ce cas, le modèle d'écoulement est supposé en équilibre (ceci est possible même si le modèle de transport est transitoire). S'il n'y a pas d'adaptativité en espace, le calcul d'écoulement n'est fait qu'une seule fois. Par contre s'il y a d'adaptativité pour le modèle de transport, le calcul d'écoulement est refait chaque fois que le maillage change. Concernant des conditions hydrodynamiques, leurs valeurs de la première période d'imposition sont utilisées.
- **Transitoire.** Dans ce cas, le calcul d'écoulement est fait à chaque pas du temps en parallèle avec celui du transport.

Schéma numérique :

- **Volumes finis.** L'utilisation du schéma des volumes finis pour simuler le problème d'écoulement pendant le transport est admis, mais fortement déconseillé si on fait le calcul sur un maillage raffiné et d'autant plus si on utilise l'adaptativité en espace.
- **Volumes finis – éléments finis.** Approprié dans tous les cas.

Pour quelques recommandations détaillées suivantes, voir Section 8.4.

8. Remarques différentes

Nous avons regroupé plusieurs remarques dans cette section.

8.1 Visualisation des solutions après le calcul.

Si la fenêtre avec l'inconnue (hauteur piézométrique pour écoulement, concentration pour transport) est déjà ouverte avant la mise en route du calcul mais la visualisation (cf. Section 6.7) n'est pas choisie, les valeurs de cette fenêtre ne seront actualisées qu'après avoir ouvert une nouvelle fenêtre avec l'inconnue ou après avoir actualisé les données de celle-ci. Pour ce faire, cliquer sur le bouton droit de la souris et sélectionner *Actualiser*.

8.2 Conditions et calcul adaptatif

Pendant le calcul adaptatif, on raffine le maillage initial donné, on déraffine les mailles qui ont été raffinées précédemment, mais on ne déraffine jamais les mailles du maillage initial. Concernant les conditions, la situation est la suivante :

8.2.1 Pendant le calcul

Pendant un calcul adaptatif, le maillage peut se raffiner. l'indication de la présence d'une condition est copiée dans des sous-mailles dans ce cas. La valeur de la condition elle-même est traitée de la manière suivante : pour des recharges, charges imposées, concentrations imposées et concentrations des sources, la valeur dans des sous-mailles et aussi une copie directe de la valeur dans des sous-mailles (ce qui est raisonnable – s'il y a par exemple une valeur de la charge imposée en [L], cette valeur se préserve dans des sous-

mailles). Par contre pour des puits et des conditions de flux sur des concentrations, il s'agit des valeurs liées au volume de la maille. Dans ce cas, on divise d'abord la valeur par le volume de la maille originale, recopie cette valeur dans des sous-maillages et puis multiplie par le volume des sous-maillages (transition $[L^3T^{-1}] - [T^{-1}] - [L^3T^{-1}]$ pour des puits et $[MT^{-1}] - [ML^{-3}T^{-1}] - [MT^{-1}]$ pour des flux sur des concentrations).

8.2.2 Après le calcul

Le maillage spatial après un calcul adaptatif peut être différent du maillage initial. Dans ce cas, l'indication de la présence d'une condition est présente dans les mailles originales et elle est aussi copiée dans des sous-maillages. Ceci n'est par contre le cas avec les conditions elles-mêmes. Il faut le faire à la main en utilisant le menu *Conditions* dans la barre d'outils. On peut ici saisir les valeurs pour des mailles du maillage actuel raffiné, mais aussi pour des mailles du maillage original ; ce sont néanmoins seulement les valeurs sur le maillage actuel raffiné qui seront prises en compte dans le calcul. La présence des conditions sur le maillage originel n'est pas gênante. Si on le veut, on peut s'en débarrasser de la manière suivante : on revient dans l'éditeur des mailles avec la localisation de la condition donnée, on saisit 0 dans toutes les sous-maillages de la maille originelle d'intérêt, ce qui indique que la condition n'est pas présente, on appuie sur le bouton droit de la souris et on choisit *Actualiser*. Par cette procédure, on recopie dans toutes les mailles « parentales » le 0 qui indique que la condition n'est pas présente. Puis on ressaisit l'indicateur de présence de nouveau ; il sera cette fois-ci uniquement associé aux mailles du maillage actuel raffiné. On revient finalement à la saisie des valeurs, cette fois-ci uniquement sur le maillage fin, dans le menu *Conditions* dans la barre d'outils.

8.3 Revenir au maillage initial après le calcul d'écoulement adaptatif

On peut revenir au maillage initial après le calcul d'écoulement adaptatif qui a changé le maillage. Pour cela, choisir *avant* le calcul d'écoulement « Fichier binaire avec le maillage » dans la Fenêtre *Critères de sauvegarde*, voir Figure 9 et Section 6.6. Après le calcul d'écoulement, sélectionner *Calcul* dans la barre d'outils et cliquer sur *Ajuster maillage du fichier d'écoulement*.

8.4 Calcul précise (adaptatif) du transport

Une bonne démarche pour bien simuler le transport de contaminants est la suivante :

- Etablir le maillage selon les données.
- Effectuer un calcul hydrodynamique adaptatif. Ceci permet d'identifier les endroits critiques du domaine concernant l'écoulement et y raffiner le maillage. Ceci est important car le maillage spatial ainsi que temporel d'un calcul adaptatif du transport sont raffinés uniquement à la base d'évolution de la concentration et non suivant les endroits difficiles d'écoulement.
- Raffiner ensuite *hautement* à la main le maillage dans des endroits où la concentration initiale est non nulle et auprès des sources de la contamination. Ceci est **le point plus critique** d'une simulation du transport de contaminants précise.
- Définir toutes les données pour le calcul du transport sur ce maillage final.

- Effectuer le calcul avec adaptativité en espace et en temps choisies, l'erreur maximale relative dans le calcul petite et le niveau maximal de divisions des mailles et le nombre maximal de raffinements du pas de temps élevés.

8.5 Calcul des lignes de courant

Talisman permet de définir des points de départ de lignes de courant et de suivre les trajectoires ainsi que le temps de transfert associé.

- Sélectionner *Propriétés* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Points de départ lignes de courant*.
- Affecter la valeur 1 aux mailles d'où vous voulez faire partir les lignes de courant. Répéter cette opération pour les différentes couches du modèle.
- Sélectionner *Calcul* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Création fichiers lignes de courant*.
- Les fichiers créés sont au nombre de deux par couches et se situent dans le répertoire courant.
- lgc_*.bln : fichier lignes de courant lisible avec le logiciel SURFER (sélectionner *Map* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Load base map*). En superposant le maillage à ce fichier, les trajectoires des lignes de courant sont nettement définies.
- lgc_*.dat : fichier temps de transfert lisible avec le logiciel SURFER (sélectionner *Map* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Classed post*). Les points correspondant aux bornes des intervalles de temps définis apparaissent superposées aux lignes de courant.

9. Le transfert de données

Différentes possibilités du transfert des données sont possibles sous Talisman.

9.1 Importation de données

Se placer dans la fenêtre où l'on désire modifier les données.

- Sélectionner *Edition* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Importer*.
- Ou cliquer sur  dans la barre d'icônes.

Choisir dans la fenêtre permettant de naviguer entre les différents fichiers celui devant être importé puis valider. Une fois que fichier a été transféré, fermer la fenêtre de données et la rouvrir. Les nouvelles données apparaissent.

9.2 Interpolation de données d'une couche à partir de quelques valeurs

Si vous possédez quelques données, de hauteur piézométrique par exemple, sur quelques mailles du modèle, il est possible d'interpoler celles-ci et de remplir la totalité du maillage grâce au logiciel SURFER par l'intermédiaire du logiciel EXCEL. La démarche est comme suit :

- Ouvrir la fenêtre désirée et rentrer les données connues (Section 3). Exporter ce fichier avec l'extension .dat. (Section 9.3).
- Aller sous EXCEL et ouvrir le fichier enregistré précédemment. Celui-ci donne la valeur affectée à chaque maille du modèle. Classer ces valeurs par ordre décroissant et éliminer toutes les valeurs nulle. Enregistrer les modifications.
- Sous SURFER, sélectionner *Data* dans la barre d'outils puis *Grid*. Rentrer le nombre de lignes et le nombre de colonnes du modèle et l'extension du fichier de sortie : .grd (ASCII). Choisir l'interpolation linéaire comme méthode de calcul. Ouvrir ensuite ce fichier sous SURFER en sélectionnant *Map* dans la barre d'outils puis *Contour*. Les données auront été interpolées.
- Il suffit ensuite d'importer ce fichier sous Talisman (Section 9.1). A chaque maille sera affectée une valeur interpolée.

9.3 Exportation de données

Sélectionner une fenêtre en cliquant sur *Propriétés* dans la barre d'outils puis sur la donnée devant être exportée (par exemple la hauteur piézométrique de la couche 1).

- Sélectionner *Edition* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Exporter*.
- Ou cliquer sur  dans la barre d'icônes.

Il faut rentrer le nom du fichier à exporter. Pour cela, il y a deux choix d'extension :

- .dat pour les maillages ne comportant pas de division
- .dmd pour les maillages divisés

Ces données seront ensuite utilisables avec le logiciel SURFER ou le logiciel Talisman.

9.4 Exportation du maillage

Sélectionner une fenêtre comportant le maillage.

- Sélectionner *Edition* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Exporter*.
- Ou cliquer sur  dans la barre d'icônes.

Rentrer le nom du fichier à exporter avec l'extension .msh. Le lire sous SURFER.

9.5 Exportation des limites du modèle

Sélectionner une fenêtre comportant la frontière à exporter.

- Sélectionner *Edition* dans la barre d'outils, cliquer ensuite sur *Exporter*.
- Ou cliquer sur  dans la barre d'icônes.

Rentrer le nom du fichier à exporter avec l'extension .bln. Le lire sous SURFER.

Annexe 1 : Liste des icônes et de leur fonction



: Ouverture d'un fichier Talisman (.t1m).



: Enregistrer un modèle et les changements de ses paramètres.



: Copier les valeurs d'une zone sélectionnée et les stocker dans la presse papier.



: Insérer le contenu de la presse papier.



: Zoom positif et négatif sur le maillage.



: Modification de l'affichage de la précision des paramètres dans le maillage.



: Remplissage du maillage par des plages de couleur suivant une fourchette de valeurs.



: Sélection de zones du maillage suivant une valeur ou suivant une fourchette de valeurs.



: Modification des valeurs d'une zone sélectionnée.



: Déplacement entre les différentes couches du modèle.



: Exportation de la fenêtre active. Apparition d'une fenêtre de dialogue.



: Importation d'une fenêtre de données. Apparition d'une fenêtre de dialogue.



: Augmentation et diminution des vecteurs de vitesse visibles.

Annexe 2 : Exemple du fichier horloge.txt

PARAMETRES GENERAUX

Equations dans le système : 1

Problème (1 écoulement, 2 transport) : 1

Type de problème (0 permanent, 1 transitoire) : 1

Type d'écoulement (1 Dupuit 3D, 2 Hantush 2D multi, 3 Richards, 4 Richards 2D) : 1

Schéma numérique (1 volumes finis, 2 volumes finis - éléments finis) : 2

Moyennes harmoniques (0 non, 1 oui) : 1

Paramètre pour la différentiation numérique : 1e-05

Précision de la méthode de Newton : 0.01

Nombre d'itérations maximal de la méthode de Newton : 20

Précision pour des mailles suspectes : 0.1

Type d'écoulement pour transport (0 permanent, 1 transitoire) : 0

Schéma numérique d'écoulement pour transport (1 volumes finis, 2 volumes finis - éléments finis) : 2

PARAMETRES D'ECOULEMENT

Epaisseur minimale de débordement : 0.01

Epaisseur minimale d'eau : 0.1

PARAMETRES DE TRANSPORT

Type d'adsorption (0 aucune, 1 linéaire, 2 Freundlich, 3 Langmuir) : 0

Type de réaction (0 aucune, 1 biodégradation) : 0

PARAMETRES DU RAFFINEMENT ADAPTATIF

Adaptativité en espace (0 non, 1 oui) : 1

Adaptativité en temps (0 non, 1 oui) : 1

Type d'estimateur a posteriori (1 gradient, 2 par résidu) : 1

Erreur maximale relative dans le calcul (en %) : 5

Nombre maximal d'itérations de raffinement en espace : 4

Niveau maximal de division des mailles : 3

Nombre maximal de raffinements en temps : 3

Critère pour raffinement : 0.25

Critère pour déraffinement : 0.05

PARAMETRES D'ENTREE - SORTIE ET VISUALISATION

Sauvegarde des fichiers binaires écoulement (0 non, 1 oui) : 1

Sauvegarde des fichiers texte écoulement (0 non, 1 mailles d'observation, 2 toutes mailles) : 1

Sauvegarde des fichiers texte transport (0 non, 1 mailles d'observation, 2 toutes mailles) : 1

Visualisation pendant le calcul (0 non, 1 oui) : 1

Fréquence de visualisation (0/1/2) : 0

Ecrire maillage, matrice et le vecteur du second membre dans fichiers (0 non, 1 oui) : 0

VALEURS LIMITES ECOULEMENT

Epaisseur : 0.1 100

Epaisseur du semi-perméable : 0.1 100

Perméabilité (horizontale) : 1e-08 10

Perméabilité verticale : 1e-08 10

Porosité : 1e-05 1

Emmagasinement libre : 1e-05 100

Emmagasinement spécifique : 1e-05 100

VALEURS LIMITES TRANSPORT

Dispersivité longitudinale : 1e-08 100

Dispersivité transversale : 1e-08 100

Diffusivité moléculaire : 1e-08 100

Densité apparente : 1e-08 100000

Erreur relative estimée espace 2.6
Erreur relative estimée temps 0.514
Erreur relative estimée complète 2.65

La durée de cette simulation est de : 53 seconds