



Une méthode particulière pour résoudre l'équation de Richards

A particle method for solving Richards' equation

Anthony Beaudoin^a, Serge Huberson^b, Elie Rivoalen^{c,*}

^a Laboratoire ondes et milieux complexes, université du Havre, 25, rue Philippe-Lebon, BP 540, 76058 Le Havre cedex, France

^b Laboratoire d'études aérodynamiques, université de Poitiers-ENSMA-CNRS, boulevard Marie-et-Pierre-Curie, BP 30179, 86962 Futuroscope Chasseneuil cedex, France

^c Laboratoire de mécanique de Rouen, INSA de Rouen, BP 08, 76801 Saint Etienne du Rouvray, France

INFO ARTICLE

Historique de l'article :

Reçu le 10 février 2010

Accepté après révision le 26 janvier 2011

Disponible sur Internet le 3 mars 2011

Mots-clés :

Milieux poreux

Milieux poreux non saturés

Équation de Richards

Méthode particulière

Keywords:

Porous media

Unsaturated porous media

Richards' equation

Particle method

RÉSUMÉ

Sous certaines hypothèses, l'écoulement de l'eau dans des sols partiellement saturés peut être décrit par l'équation de Richards. Ce travail présente une solution complète du problème basée sur deux méthodes particulières déterministes classiques, Particle Strength Exchange et Vitesse de Diffusion. Ces deux méthodes sont appliquées au problème de la migration d'une bulle d'humidité dans un milieu poreux d'humidité faible. Les résultats sont comparés à ceux fournis par le code NAPL et montrent que chacune de ces méthodes est une alternative intéressante aux méthodes classiques avec maillage.

© 2011 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

ABSTRACT

Under some specific assumptions, the flow of the water in unsaturated porous media can be represented by the Richards equation. However the strong non-linearity of the Richards equation constitutes a difficult obstacle for such simulations. This work presents a complete solution of the problem based on two alternative deterministic schemes for the particle methods, Particle Strength Exchange and Diffusion Velocity. These two methods are used to compute the motion of an initially spherical wet region embedded in an otherwise low humidity zone. These results are compared to that of the finite element code NAPL. It is shown that each method provide a useful alternative to more classical grid methods.

© 2011 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

Abridged English version

Eq. (1) is a possible form of the Richards equation. The numerical solution of this strongly non-linear equation can involve unbounded computational domain as well as steep wetting front [1]. These last difficulties suggest that a particle method could be useful because of its abilities to transport discontinuities and to naturally simulate external boundary conditions. It consists in using water carrying Lagrangian particles which move across the computational domain according to the flow velocity [3]. However, the application of a particle method to non-linear equations is not straightforward and only one previous attempt has been made as yet [4]. Hereafter, the extension to the Richards equation of two different approaches, the Particle Strength Exchange [5] and the Dispersion Velocity [6], will be considered. The hydraulic conductivity K and the matrix potential h are defined by the empirical relationships of Van Genuchten (Eq. (2)) where α and n represent parameters

* Auteur correspondant.

Adresses e-mail : anthony.beaudoin@univ-lehavre.fr (A. Beaudoin), serge.huberson@univ-poitiers.fr (S. Huberson), elie.rivoalen@insa-rouen.fr (E. Rivoalen).

related to the air entry value and to the pore size distribution within the soil. Richards' equation can be expressed by using the soil moisture diffusivity E (Eq. (3)). The effective water saturation Se is approximated as a linear combination (Eq. (4)) of Dirac distributions δ where \mathbf{X}_i and m_i are the mass center and the weight of the particle P_i . A smooth approximation Se_ϵ of Se is recovered by using a smoothing function ζ_ϵ (Eq. (5)). Moment conditions ensure that this function is actually an approximation of δ . In the present work, a second-order Gaussian smoothing function was selected. As Se_ϵ is a sum of products of m_i and ζ_ϵ , an irregular particle distribution will lead to a shaky approximation of Se . A solution is to use a re-gridding procedure consisting in a re-location of particles onto the vertex of a uniform grid. The new effective water saturation Se^{new} is evaluated by interpolating the old effective water saturation Se^{old} on the nodes \mathbf{X}_j of the grid with a fourth-order interpolation function M_4^j . Using the infiltration velocity U_d , Eq. (3) can be rewritten as Eq. (6) which can be rewritten within a Lagrangian framework in order to provide a set of ODEs for \mathbf{X}_i and m_i . In practice, the particle trajectories are computed by using a fourth-order Runge–Kutta scheme. For the time evolution of m_i , the diffusion operator can be solved by using two deterministic algorithms. The PSE method is based on the approximation of the diffusion operator by an integral operator (Eq. (8)). In this equation, η_ϵ is a radial symmetric function which can be expressed according to the function ζ_ϵ (Eq. (9)). Another way to obtain discrete equations is to use the diffusion velocity \mathbf{U}_d as defined in Eq. (10). As a result, Eq. (6) can be written as a convective equation. The two methods were applied to the case of a high humidity spherical region (Eq. (12)) embedded within a low humidity zone. The results are compared to those of the finite element code NAPL [9]. The grid cell number used in the simulation ranges from 50 up to 200 for each direction. The particle number varies accordingly except that the particles with a relative humidity lower than 10^{-5} are eliminated. The results of the three methods are very similar as can be checked in Fig. 1. On the convergence study of Fig. 2, it can be observed that both particle methods yield better conservation properties. The computing time increases proportionally to the particle number whereas it increases dramatically for the NAPL code due to the low convergence of the iterative process involved in the solution procedure.

1. Introduction

L'objectif de ce travail est de résoudre par une méthode particulière l'équation de Richards. Celle-ci permet de simuler sous certaines hypothèses, l'écoulement de l'eau dans des sols partiellement saturés. Elle est hautement non linéaire à cause de la dépendance de la perméabilité et de la charge hydraulique à la saturation en eau. Les solutions analytiques sont limitées à des conditions simplifiées telles qu'un coefficient de diffusivité constant. Les solutions numériques permettent de considérer des cas plus complexes mais elles sont confrontées à des difficultés comme la simulation d'un domaine non borné ou la simulation d'un front abrupt d'infiltration [1]. A cause de ces difficultés, la résolution de l'équation de Richards est encore un challenge et nécessite l'utilisation de techniques spécifiques [2]. Les deux dernières difficultés suggèrent qu'une méthode particulière devrait être intéressante. Son principe est de décrire le transport d'une grandeur physique par l'étude du mouvement de particules [3]. Cette méthode a les capacités de transporter des discontinuités et de résoudre naturellement les conditions externes en domaine non borné. Cependant la forte non linéarité de l'équation de Richards constitue un obstacle pour de telles simulations et une seule tentative partielle a été faite par Rossi [4]. Ici, nous reprenons le problème afin de présenter une solution complète basée sur deux méthodes particulières déterministes classiques pour le traitement du terme de diffusion d'une équation de transport, Particle Strength Exchange (PSE) [5] et Vitesse de Diffusion (VD) [6].

2. Equation de Richards

Une forme possible de l'équation de Richards est donnée par l'expression suivante [7] :

$$\frac{\partial Se}{\partial t} - \nabla \cdot (K(Se)\nabla H(Se)) = 0 \quad \text{avec } Se = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad \text{et } H(Se) = h(Se) - z \quad (1)$$

avec Se la saturation effective en eau, K la perméabilité, H la charge hydraulique, θ la teneur en eau, θ_r la teneur en eau résiduelle, θ_s la teneur en eau de saturation, h le potentiel matriciel et z la cote positive dans le sens ascendant. K et h peuvent être donnés par les relations empiriques de Van Genuchten [8] :

$$h(Se) = \frac{1}{\alpha} \left(Se^{\frac{n}{1-n}} - 1 \right)^{\frac{1}{n}} \quad \text{et} \quad K(Se) = k_{sat} Se^{1/2} \left(1 - \left(1 - Se^{\frac{n}{n-1}} \right)^{\frac{n-1}{n}} \right)^2 \quad (2)$$

α représente un paramètre relié à la pression d'entrée de l'air et n un paramètre de forme prenant en compte la distribution de la taille des pores. k_{sat} désigne la perméabilité à saturation. En utilisant la notion de coefficient de diffusivité $E = K \partial h / \partial Se$, l'équation (1) peut encore s'écrire :

$$\frac{\partial Se}{\partial t} + \nabla \cdot (K(Se)\mathbf{k}) = \nabla \cdot (E(Se)\nabla Se) \quad (3)$$

3. Méthode particulière

3.1. Définition des particules

Dans les méthodes particulières, Se est cherchée comme la somme de distributions de Dirac δ :

$$Se_\epsilon(\mathbf{X}) = \sum_i m_i \delta(\mathbf{X} - \mathbf{X}_i) \quad \text{avec } \mathbf{X}_i = \int_{\sigma_i} \mathbf{X} dv / \int_{\sigma_i} dv \quad \text{et } m_i = \int_{\sigma_i} Se(\mathbf{X}) dv \quad (4)$$

où \mathbf{X}_i et m_i sont le centre de masse et la quantité de Se contenue dans le support σ_i de la particule P_i . Pour permettre la construction d'une approximation continue Se_ϵ de Se , une fonction ζ_ϵ est introduite :

$$Se_\epsilon(\mathbf{X}) = \sum_i m_i \zeta_\epsilon(\mathbf{X} - \mathbf{X}_i) \quad \text{avec } \zeta_\epsilon(\mathbf{X}) = (1/\epsilon^d) \zeta(\mathbf{X}/\epsilon) \quad (5)$$

où d est la dimension du problème. ζ_ϵ est une fonction de régularisation habituellement utilisée avec les méthodes particulières. Nous avons retenu ici une simple gaussienne d'ordre 2. Le choix d'une fonction à support compact de type Spline par exemple permettrait de limiter les interactions entre particules et ainsi diminuer sensiblement les temps de calcul qui sont ici très courts et ne justifient pas d'optimisation particulière. Enfin, une procédure de remaillage a été appliquée périodiquement. Une étude de sensibilité a permis de fixer la fréquence de remaillage N_f à 10 et le rapport ϵ/h à 1,25 où h est le pas de maillage de la grille d'initialisation des nouvelles particules.

3.2. Information transportée

En introduisant la vitesse d'infiltration $\mathbf{U}_g = K/S_e \mathbf{k}$ où \mathbf{k} est le vecteur unitaire de l'axe vertical, l'équation (3) peut encore s'écrire :

$$\frac{\partial Se}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}_g Se) = \nabla \cdot (E \nabla Se) \quad (6)$$

Sous forme particulière, l'équation précédente est remplacée par un système d'équations d'évolution de \mathbf{X}_i et de m_i pour chaque particule P_i :

$$\frac{d\mathbf{X}_i}{dt} = \mathbf{U}_{gi} \quad \text{et} \quad \frac{dm_i}{dt} = \int_{\sigma_i} (\nabla \cdot (E \nabla Se)) dv \quad (7)$$

Dans la pratique, la trajectoire est déterminée à l'aide d'un schéma de Runge–Kutta d'ordre 4. Pour l'évolution de m_i , l'opérateur de diffusion peut être traité avec deux méthodes particulières déterministes. La méthode PSE s'appuie sur l'approximation de l'opérateur de diffusion par un opérateur intégral [5] :

$$\nabla \cdot (E \nabla Se) = \int_{R^d} (E(\mathbf{X}) + E(\mathbf{X}')) (Se(\mathbf{X}') - Se(\mathbf{X})) \eta_\epsilon(|\mathbf{X}' - \mathbf{X}|) dv' \quad (8)$$

Si η_ϵ est une fonction gaussienne à symétrie radiale, elle peut s'exprimer en fonction de ζ_ϵ :

$$\eta_\epsilon(\mathbf{X}) = -2 \frac{\nabla \zeta_\epsilon(\mathbf{X}) \cdot \mathbf{X}}{|\mathbf{X}|^2} = \frac{4}{\epsilon^2} \zeta_\epsilon(\mathbf{X}) \quad (9)$$

Dans la méthode VD, le terme de diffusion est interprété comme le mouvement de particules dans une direction alignée avec le gradient local de Se [6]. Cette remarque amène au concept de vitesse de diffusion \mathbf{U}_d . Une nouvelle écriture de l'équation (3) est donnée par :

$$\frac{\partial Se}{\partial t} + \nabla \cdot ((\mathbf{U}_g + \mathbf{U}_d) Se) = 0 \quad \text{avec } \mathbf{U}_d = -\frac{E \nabla Se}{Se} \quad (10)$$

Le système d'équations (Eq. (7)) devient alors :

$$\frac{d\mathbf{X}_i}{dt} = \mathbf{U}_{gi} + \mathbf{U}_{di} \quad \text{et} \quad \frac{dm_i}{dt} = 0 \quad (11)$$

Le terme ∇Se est obtenu par une dérivation directe de l'équation (5).

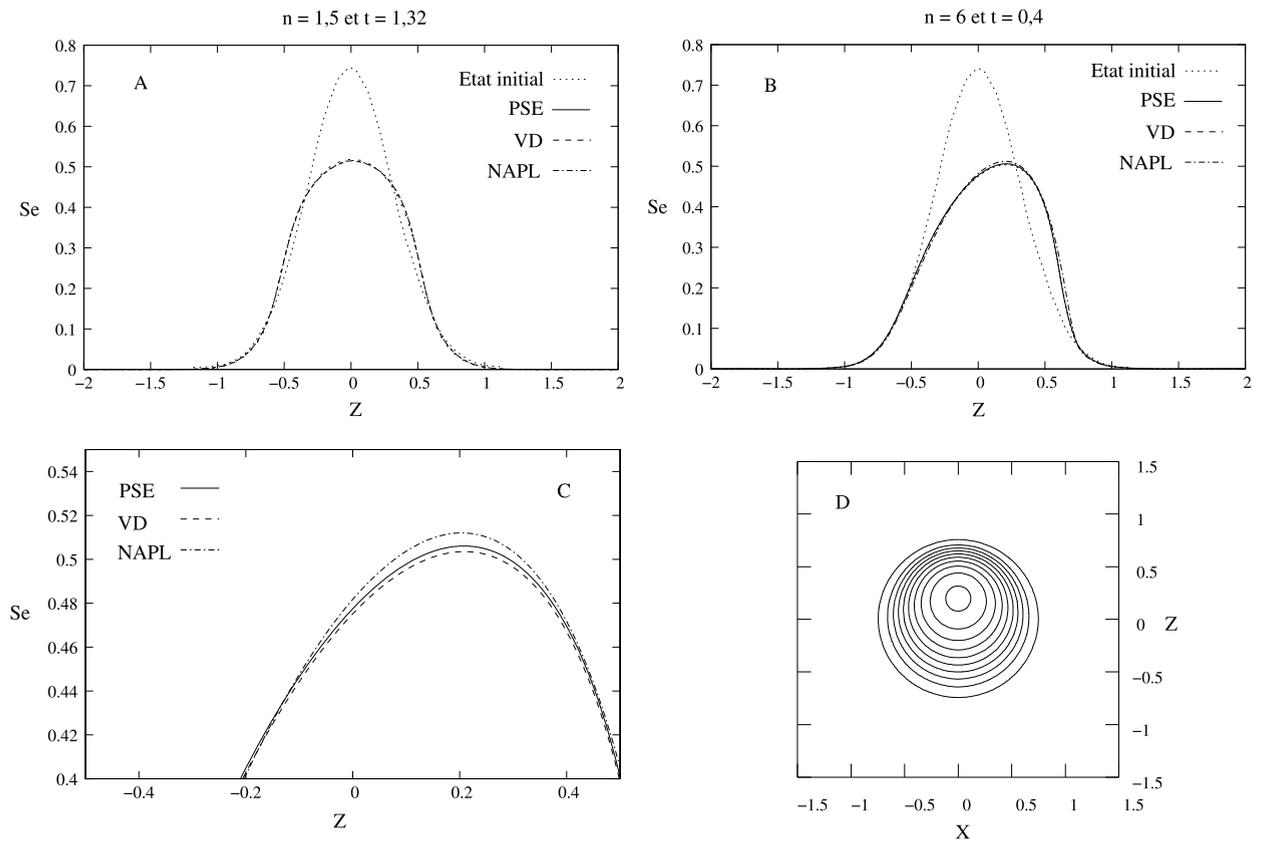


Fig. 1. Profils de la saturation effective en eau Se obtenus par les trois méthodes (PSE, VD et NAPL) pour $n = 1,5$ à $t = 1,32$ (A) et $n = 6$ à $t = 0,4$ (B), un détail de la figure B (C) et les isovaleurs de Se obtenues par la méthode particulière VD pour $n = 6$ à $t = 0,4$ (D).

4. Infiltration d'une goutte d'eau

Les comportements des deux méthodes, PSE et VD, sont étudiés en simulant l'infiltration d'une goutte d'eau dans un milieu poreux infini 2D à teneur en eau résiduelle θ_r . L'évolution de Se est donnée par une forme adimensionnelle de l'équation de Richards (Eq. (3)) qui ne dépend que de n . Les valeurs extrêmes de n testées sont $n = 1,5$ (régime principalement diffusif) et $n = 6$ (régime principalement convectif). L'état initial hydrique du sol est donné par une gaussienne : $Se(\mathbf{X}, t = 0) = Se^{\max} \exp(-|\mathbf{X}|^2/\lambda^2)$. La saturation effective maximale en eau Se^{\max} et le paramètre d'étalement λ valent respectivement 0,75 et 0,45. Les résultats sont comparés à ceux obtenus avec le logiciel NAPL (Non Aqueous Phase Liquid) développé par l'EPA (Environmental Protection Agency) [9]. Les simulations réalisées avec NAPL utilisent un nombre de mailles dans les deux directions variant entre 50 et 200. Sur les bords de la grille, une condition de flux nul est imposée. Les deux méthodes, PSE et VD, utilisent le même nombre de particules initialisées en utilisant la grille de NAPL. Seules les particules ayant une masse supérieure à 10^{-5} sont conservées. La condition $Se(\infty, t) = 0$ est ainsi automatiquement vérifiée par la méthode particulière. Un avantage de l'approche lagrangienne est que l'équation de Richards est résolue uniquement aux endroits où Se est non nulle. Pour les trois méthodes, les résultats calculés sont tout à fait comparables comme on peut le voir sur les Figs. 1A et 1B où les profils de la saturation effective en eau Se obtenus par les trois méthodes ont été représentés. La Fig. 1C est un détail de la Fig. 1B. Dans le cas d'un régime convectif ($n = 6$), on remarque l'apparition d'un front abrupt représenté par des isovaleurs resserrées de Se (Fig. 1D). L'influence de la discrétisation $N_x \times N_x$ utilisée est illustrée sur la Fig. 2 par deux types de résultats. La méthode eulérienne donne des taux d'accroissement inférieurs à ceux des méthodes particulières quand le régime est considéré comme diffusif ($n = 1,5$, Fig. 2C). Par contre quand $n = 6$ (régime convectif), les taux d'accroissement sont proches. On remarque néanmoins des temps de calcul toujours supérieurs avec la méthode eulérienne dans la gamme des paramètres testés (Figs. 2C et 2D).

5. Conclusion

Les deux méthodes particulières proposées sont des solutions alternatives pour la résolution numérique de l'équation de Richards. Les résultats obtenus montrent que la méthode PSE fournit des résultats légèrement meilleurs pour des temps de calcul comparables, avec toutefois une adaptation un peu moins facile au cas d'écoulement non borné. Par ailleurs, ces

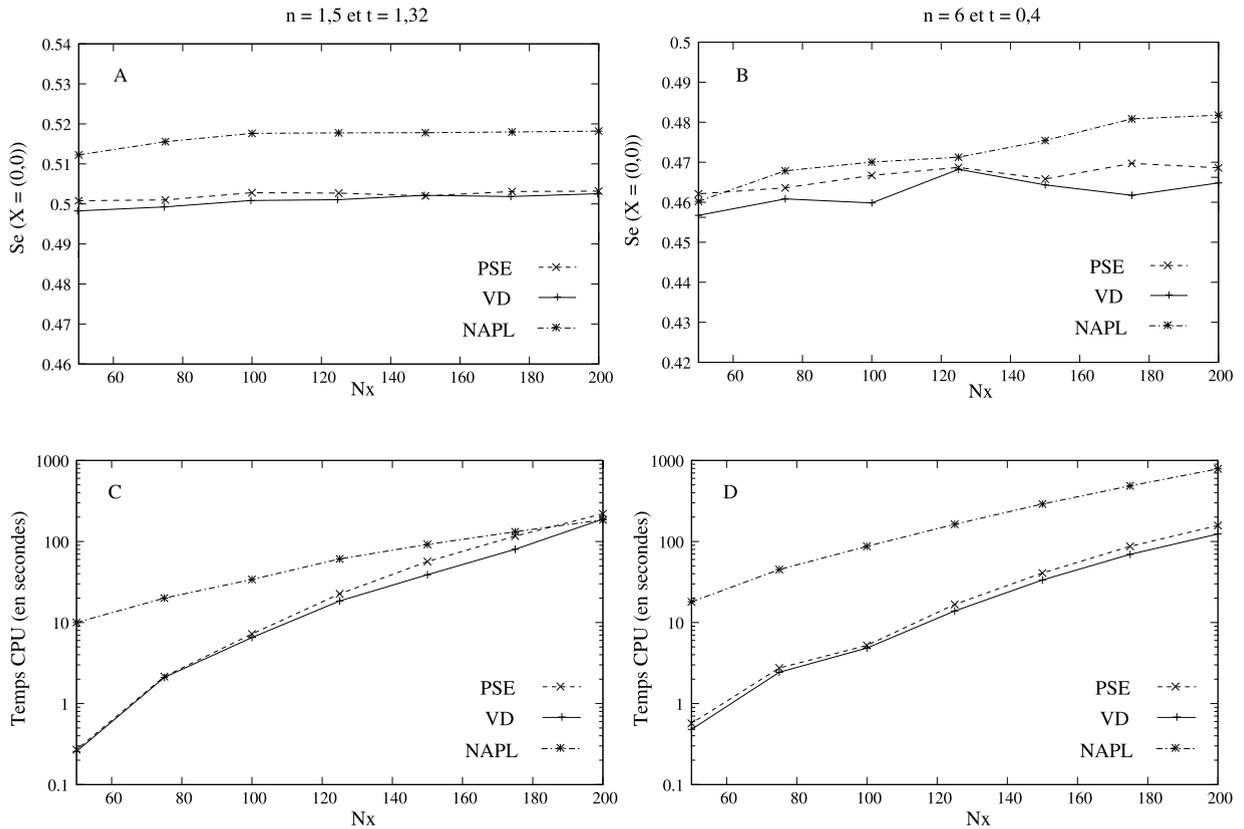


Fig. 2. Saturation effective en eau S_e à la position $\mathbf{X} = (0, 0)$ et le logarithme du temps CPU obtenus par les trois méthodes (PSE, VD et NAPL) en fonction de la discrétisation spatiale N_x pour $n = 1,5$ à $t = 1,32$ (A et C) et $n = 6$ à $t = 0,4$ (B et D).

résultats confirment l'aptitude bien connue des méthodes particulières à modéliser les équations de transport, même dans ce cas de forte non linéarité.

Références

- [1] D. Crevasier, A. Chanzy, M. Voltz, Evaluation of the Ross fast solution of Richards' equation in unfavourable conditions for standard finite element methods, *Adv. Water Res.* 32 (2009) 936–947.
- [2] C.T. Miller, C. Abhishek, M.W. Farthing, A spatially and temporally adaptive solution of Richards equation, *Adv. Water Res.* 29 (2006) 525–545.
- [3] P. Salamon, D. Fernandez-Garcia, J.J. Gomez-Hernandez, A review and numerical assessment of the random walk particle tracking method, *J. Contaminant Hydrol.* 87 (2006) 277–305.
- [4] L.F. Rossi, A high order lagrangian scheme for flow through unsaturated porous media, *Contemp. Math.* 295 (2000) 1–12.
- [5] P. Degond, S. Mas-Gallic, The weighted particle method for convection diffusion equation, Part 2: The anisotropic case, *Math. Comput.* 53 (1989) 509.
- [6] P. Degond, F.J. Mustieles, A deterministic approximation of diffusion equations using particles, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 11 (1990) 293–310.
- [7] L.A. Richards, Capillary conduction of liquids through porous medium, *Physics* 1 (1931) 318–333.
- [8] M.T. Van Genuchten, A closed form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils, *Soil Sci. Soc. Am. J.* 44 (1980) 892–898.
- [9] J. Guarnaccia, G. Pinder, M. Fishman, T.E. Short, NAPL simulator documentation, EPA/600/R-97/102, October 1997.