

Application de deux schémas numériques pour la simulation de la diffusion des polluants au travers des parois en béton d'un réservoir souterrain de stockage d'eau

Narcisse MALANDA¹, Christian TATHY², Paul LOUZOLO-KIMBEMBE^{1,2*}
et Cordy Jourvel ITOUA-TSELE¹

¹ École Nationale Supérieure Polytechnique (ENSP), Laboratoire de Génie civil et environnemental,
Université Marien NGOUABI, BP 69 Brazzaville, Congo

² École Normale Supérieure (ENS), Département des Sciences exactes, Université Marien NGOUABI,
BP 69 Brazzaville, Congo

* Correspondance, courriel : louzolokim@gmail.com

Résumé

Le problème de l'étanchéité des parois d'un réservoir en béton revêt une importance capitale dans le cadre du stockage des produits liquides. Lorsque le réservoir en béton est enfoui dans un sol très humide et pollué, le stockage de l'eau à usage domestique court le risque d'infiltration des substances toxiques dissoutes dans la nappe d'eau libre. Le but de ce travail est de simuler la variation de la concentration d'un polluant provenant d'un environnement extérieur, dans l'eau stockée dans un réservoir souterrain à l'aide d'un modèle mathématique des phénomènes diffusifs, basé sur un schéma de volumes finis en espace et les schémas d'Euler explicite et implicite en temps. D'après les résultats obtenus, la convergence physique des courbes théoriques et expérimentales suggère que le modèle mathématique utilisé est valable pour expliquer le problème de la diffusion des polluants dans une matrice cimentaire, notamment avec le schéma d'Euler implicite en temps qui semble mieux adapté.

Mots-clés : *modélisation mathématique, méthode numérique d'Euler, phénomène de diffusion, réservoir souterrain, béton.*

Abstract

Application of two numerical schemes for the simulation of the diffusion of pollutants through the concrete walls of an underground water storage tank

The problem of the waterproofness of the walls of a concrete tank is of paramount importance in the storage of liquid products. When the concrete tank is buried in polluted water-saturated soil, storing water inside this tank for domestic use is a risk of infiltration of dissolved toxic substances from the free water layer. The aim of this study is to simulate the variation of the concentration of pollutant coming from outside environment, in water stored into an underground concrete tank with a mathematical model of diffusive phenomena based on space finite volumes scheme and on time explicit and implicit Euler schemes.

According to results obtained, the physical convergence of theoretical and experimental curves suggests that the mathematical model used is valid to explain the problem of the diffusion of pollutants in a cementitious matrix, especially with the time implicit Euler scheme which seems more adapted.

Keywords : *mathematical modeling, numerical Euler method, diffusion phenomena, underground tank, concrete.*

1. Introduction

L'eau, en tant que ressource vitale, est indispensable pour l'homme, l'ensemble de la biodiversité ainsi que tous les écosystèmes. Comme telle, elle doit être exempte de toutes sortes d'altération aux fins de la rendre propice à la consommation. De plus, dans de nombreuses villes de pays en développement, l'approvisionnement permanent en eau à partir du réseau de distribution public n'est pas toujours correctement assuré, elles subissent régulièrement des ruptures d'eau. En République du Congo, plus précisément dans la ville de Brazzaville, pour pallier ce problème, certains ménages et établissements à caractère commercial ont opté pour un système de stockage de l'eau dans des ouvrages de génie civil enterrés, construits en béton armé ou en maçonnerie [1]. L'eau est ensuite pompée dans le bâtiment à l'aide d'une motopompe. Aussi, le stockage de l'eau à usage domestique dans les réservoirs enterrés, plus précisément dans une zone où le sol est très humide et pollué, constitue une problématique intéressante. Il apparaît que peu de travaux ont été menés dans ce cadre. Les réservoirs destinés à contenir l'eau potable devraient normalement être étanches pour préserver celle-ci de toute contamination. De même, les décharges d'ordures non traitées altèrent considérablement les sites humides et favorisent la diffusion et la migration des polluants vers les nappes phréatiques en profondeur par gravité et à travers les sols sous-jacents. Ces polluants sont susceptibles d'altérer la qualité de l'eau contenue dans les réservoirs enterrés, puisque la migration est favorisée par la nappe "d'eau libre". La diffusion des polluants au travers des parois poreuses est nocive. Dans ces conditions, les problèmes d'étanchéité des parois desdits réservoirs deviennent alors délicats à traiter vu leur impact considérable sur la qualité de l'eau [2].

Pour la plupart de ces réservoirs enterrés, le matériau le plus largement utilisé est le béton ou les maçonneries de blocs pleins, de nature poreuse et enclin à la fissuration, surtout dans le domaine de la construction. Ces deux faiblesses conduisent souvent à prévoir des parois épaisses de béton ou des traitements d'étanchéité spéciaux afin de préserver la potabilité de l'eau. Ces dernières dispositions techniques induisent quelque fois une autre activité polluante qui semble être très prononcée par l'utilisation du ciment "sika" comme adjuvant [1]. De même, les matériaux cimentaires comme le béton en contact avec la nappe d'eau souffrent de vieillissement. Parmi les facteurs participant au vieillissement des constructions en béton armé ou en maçonnerie de parpaing il y a les micro-organismes tels que les bactéries, les champignons, les algues, les lichens et les mousses présents dans la nappe d'eau et qui induisent de la bio-altération et dans certains cas la biodégradation ou bio-détérioration [3]. Enfin, le stockage de l'eau domestique dans les réservoirs enterrés tel qu'il est observé dans les pays en développement, en Afrique sub-saharienne et plus spécifiquement en République du Congo, suggère un certain nombre de questionnements. Il appelle pour cela à une prise en compte des certaines contraintes dites environnementales, ceci pour garantir la santé des consommateurs dans les ménages. De façon évidente, le faible niveau de vie de la population, le manque de politique d'assainissement adéquat rendent difficile sinon problématique la gestion des effluents domestiques. De même, les rejets d'ordures diverses dus à un déversement intempestif et non contrôlé entraînent de manière inéluctable la pollution dans les zones dites de décharges des déchets, ceci par effet de dissolution des substances toxiques dans la nappe d'eau.

Cette activité provoque une pollution environnementale qui affecte les eaux de la nappe libre [4-6]. Ces eaux sollicitent à leur tour les réservoirs enterrés, destinés à stocker de l'eau à usage domestique dans les ménages [2]. La durabilité des ouvrages en béton, enterrés dans les milieux chimiquement agressifs, est l'un des problèmes pour lesquels la diffusion ionique est déterminante [7]. Les problèmes d'infiltration engendrés par l'effet de capillarité deviennent des questions extrêmement importantes. La structure du réseau poreux du béton armé permet la pénétration d'agents extérieurs (souvent agressifs) vers le cœur du matériau altérant ainsi la qualité de l'eau stockée. Ce problème physique rencontré dans notre quotidien, qui n'est autre que la diffusion des polluants, est décrit mathématiquement par des équations différentielles partielles (EDP). En général, ces équations n'admettent pas de solutions analytiques sauf dans des cas très simplifiés. C'est pourquoi un recours aux méthodes de résolution numérique s'avère nécessaire. Il existe plusieurs méthodes numériques: la méthode des éléments finis, la méthode des différences finies, la méthode des volumes finis, les méthodes spectrales, etc. Une étude récente a mis en évidence, grâce à des simulations expérimentales et numériques, la diffusion des ions d'ammoniac en solution (polluant) issus du milieu environnemental extérieur, au travers des parois en béton grâce à la loi de Fick [8]. Les simulations numériques ont été abordées par l'approximation d'une équation aux dérivées partielles (EDP) parabolique non linéaire avec la méthode de volumes finis, dans laquelle le coefficient de diffusion, dépendant de la concentration, est associé à la loi de Bazant [9]. La diffusion est simulée dans le contexte d'un milieu poreux hétérogène (matériau granulaire cimenté), sur la base d'un modèle mathématique 1D adapté. Ce modèle s'appuie sur une résolution numérique explicite d'une EDP en volumes finis dans le cadre de l'approximation de l'expérience proposée.

Dans ce travail, nous nous proposons d'étudier l'approximation de la solution d'une équation de diffusion non linéaire par la méthode des volumes finis. La méthode intègre, sur des volumes élémentaires de forme simple, les équations écrites sous forme de loi de conservation. Elle fournit ainsi de manière naturelle des approximations et est particulièrement bien adaptée aux équations de la mécanique des fluides. Sa mise en œuvre est simple avec des volumes rectangulaires. Parmi les avantages, nous pouvons noter qu'elle permet de traiter des géométries complexes avec des volumes de forme quelconque (ce qui est le cas des matériaux granulaires cimentés comme le béton), la détermination plus naturelle des conditions aux limites de type Neumann, bien que peu de résultats théoriques de convergence soient connus. La méthode des volumes finis permet la résolution des EDP; elle comporte une phase de maillage et une phase de discrétisation. La phase de maillage consiste à diviser le domaine d'étude en de petits volumes appelés cellules ou volumes de contrôle, et la phase de discrétisation transforme le problème continu en un problème discret. Les équations ainsi que les conditions aux limites sont approchées par des équations et conditions discrètes. En réalité, ce travail fait suite à l'étude mentionnée ci-dessus [8]. Il s'agira ici de comparer les résultats des simulations effectuées à partir d'une résolution numérique se basant sur le schéma d'Euler explicite avec ceux obtenus à partir d'une résolution par schéma d'Euler implicite d'une EDP, dans le cadre des essais de laboratoire proposés.

2. Matériel et méthodes

Nous nous sommes basés sur deux approches (simulations expérimentales et numériques) pour mettre en évidence la contamination de l'eau stockée dans les réservoirs en béton armé enterrés, ceci par la détermination des concentrations du polluant.

2-1. Dispositif expérimental de laboratoire

Nous avons analysé deux échantillons distincts pour cette phase d'essais pour la détermination de la concentration en ammoniac (NH_3), considéré comme polluant potentiel de l'eau contenue dans le réservoir.

Le dispositif expérimental mis en place comporte (*Figures 1 et 2*) : un bac en plastique (polyvinyle) ; une cuve en béton contenant l'eau potable ; du sable fin saturé en eau polluée par le NH_3 . La spectrophotométrie est la méthode utilisée pour la détermination des valeurs de concentration en ammoniac (NH_3) dans la cuve en béton contenant l'eau potable. Toutes les mesures ont été effectuées à l'aide d'un colorimètre de marque HACH DR890. Les essais expérimentaux se sont déroulés selon le protocole décrit dans le catalogue de l'appareil de mesure.

2-2. Approche scientifique de la démarche

Plusieurs modèles traduisant le transfert d'eau ou d'humidité dans la matrice cimentaire ont été développés [10-14]. Deux échelles peuvent être considérées :

- L'échelle macroscopique permettant la résolution du problème aux limites, en utilisant les équations constitutives globales;
- L'échelle microscopique pour laquelle la microstructure existe, gouvernant le comportement global du matériau.



Figure 1 : Bac en plastique contenant le polluant (ammoniac) + sable et cuve en béton contenant l'eau potable

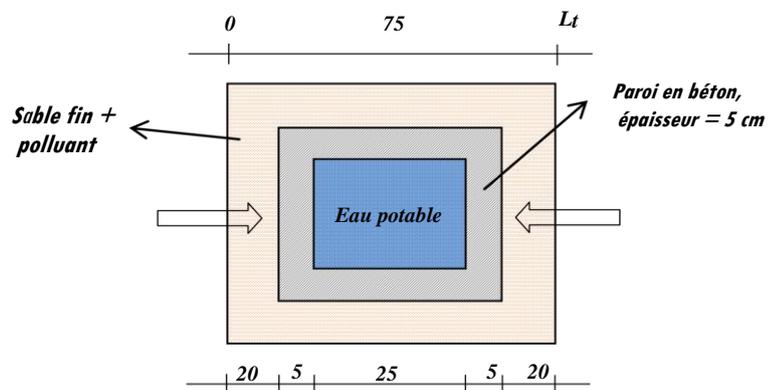


Figure 2 : Schéma du dispositif expérimental

Mais selon Baroghel-Bouny [10], le problème peut être abordé sous trois axes avec des démarches différentes :

- La méthode d'homogénéisation qui consiste à considérer le milieu poreux comme un assemblage d'éléments microscopiques;
- L'approche microscopique de type réseau, faisant appel à la notion de percolation qui se déroule en trois phases :
 - Schématisation de la microstructure du matériau par un réseau plus ou moins complexe à mailles régulières de sphères (sites) connectées par des tubes cylindriques (liens);
 - Description du transfert à travers un pore élémentaire cylindrique par une analyse microscopique;
 - Couplage des deux analyses précédentes pour obtenir une estimation des coefficients effectifs de transfert dans le matériau modèle considéré.
- L'approche à l'échelle macroscopique où le milieu poreux est assimilé à un milieu continu fictif équivalent.

Nous retiendrons cette dernière approche pour décrire les problèmes de transfert d'eau au sein du réseau poreux dans la matrice cimentaire (béton). Cependant, la complexité de ce type de matériau fait que cette diffusion est la plupart du temps associée à des phénomènes physiques ou chimiques non linéaires difficiles à apprécier, d'où le recours à des hypothèses restrictives.

2-3. Les différents modes de transfert

Il existe deux modes de transfert à travers une surface :

- la convection : tout phénomène de transfert est lié à un mouvement d'ensemble du milieu, toutes catégories de particules confondues;
- la diffusion : mode de transfert en l'absence de mouvement d'ensemble, dû à une inhomogénéité dans le milieu (concentration, température, etc.).

2-4. Modélisation des phénomènes diffusifs

2-4-1. La formulation mathématique

Le problème de la contamination de l'eau stockée dans un réservoir souterrain situé en milieu saturé en eau polluée par le NH₃ peut être modélisé mathématiquement par une équation aux dérivées partielles non linéaire du type parabolique [15, 16] :

$$\begin{cases} \Phi(x) \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Phi(x) D(u(x, t)) \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right), \forall (x, t) \in]0, L_t[\times]0, T[\\ \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial u}{\partial x}(L_t, t) = 0, \forall t \in]0, T[, \\ u(x, 0) = u_0(x), \forall x \in]0, L_t[, \end{cases} \quad (1)$$

dans laquelle $D(u(x, t)) > 0$ est le coefficient de diffusion, $\Phi(x) > 0$ est la porosité du milieu, u_0 est une fonction donnée et u la fonction inconnue définie de $]0, L_t[\times]0, T[$ dans \mathbb{R} .

N.B. L_t (en mètre) est la longueur totale du domaine d'intégration de l'équation et T (en seconde) est le temps final de l'expérience.

On cherche à construire un schéma de volumes finis pour approcher la fonction u , solution du **Problème (1)**.

2-4-2. Résolution numérique de l'équation de diffusion en dimension 1 (1D)

Le phénomène physique considéré est celui de la simulation expérimentale réalisée avec le dispositif décrit au paragraphe 2.1.

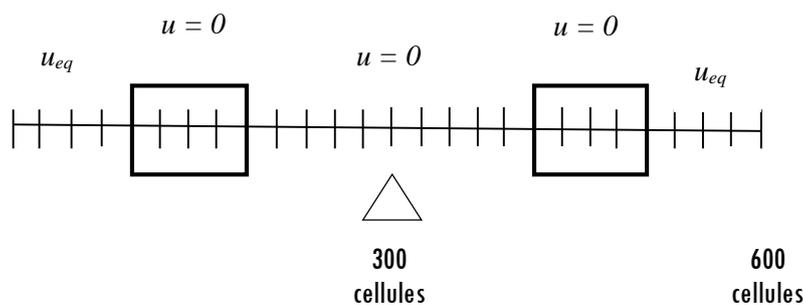


Figure 3 : Division du domaine d'étude en de petits volumes (volumes de contrôle) et conditions initiales

Les points x_i , $0 \leq i \leq N + 1$, sont les nœuds du maillage. On notera par N le nombre de cellules ou volumes de contrôle. La **Figure 3** représente une coupe monodimensionnelle du schéma du dispositif expérimental (**Figure 2**). Pour réaliser la discrétisation du **problème (1)**, on se donne un maillage en volumes finis (**Figure 4**) d'intervalle $[0, L]$, c'est-à-dire un ensemble de points : $0 = x_0 = x_{1/2} < x_1 < x_{3/2} < \dots < x_{i-1/2} < x_i < x_{i+1/2} < \dots < x_N < x_{N+1/2} = x_{N+1} = L$, tels que les intervalles $\Omega_i =]x_{i-1/2}; x_{i+1/2}[$, $1 \leq i \leq N$, sont les cellules ou volumes de contrôle, et les x_i , $0 \leq i \leq N + 1$, sont les nœuds. On pose $h_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$ ($1 \leq i \leq N$) et $h_{i+1/2} = x_{i+1} - x_i$ ($1 \leq i \leq N - 1$). Dans le cas où h_i et $h_{i+1/2}$ sont constants, et les nœuds sont les milieux des volumes de contrôle, on définit un pas d'espace du maillage par $h = h_i = h_{i+1/2}$. Par conséquent $x_i = x_0 + ih$ ($1 \leq i \leq N + 1$).

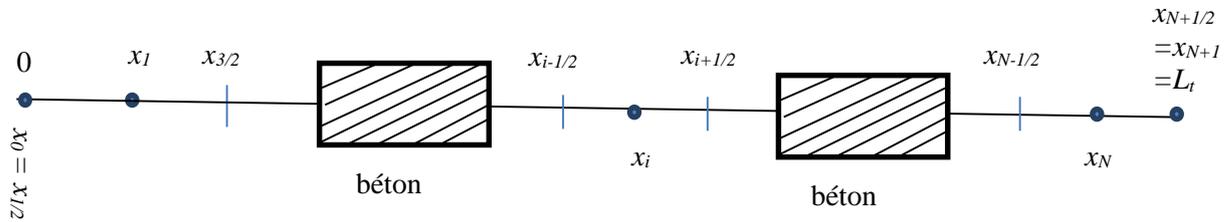


Figure 4 : Maillage d'un domaine en 1D

On se donne un pas de temps k (un réel strictement positif) et on discrétise l'intervalle de temps $]0, T[$ par $t_n = nk$, $n \geq 0$. On désigne par u_i^n , $1 \leq i \leq N$ et $n > 0$, les inconnues du problème discrétisé. Ce sont des approximations de la solution exacte dans chaque cellule Ω_i et au temps t_n . Les inconnues u_i^n peuvent être déterminées de deux manières :

- u_i^n peut-être une approximation de la valeur moyenne de u sur Ω_i au temps t_n , c'est-à-dire :

$$u_i^n \simeq \frac{1}{h_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u(x, t_n) dx \tag{2}$$

- u_i^n peut-être une approximation de u au point x_i (nœud) et au temps t_n , c'est-à-dire :

$$u_i^n \simeq u(x_i, t_n) \tag{3}$$

On intègre l'**Equation (1)** sur $]x_{i-1/2}, x_{i+1/2}[\times]t_n, t_{n+1}[$.

On obtient :

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \Phi(x) \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) dx dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Phi(x) D(u(x, t)) \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right) dx dt \tag{4}$$

C'est-à-dire :

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \Phi(x)[u(x, t_{n+1}) - u(x, t_n)]dx = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[\Phi\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right) D\left(u\left(x_{i+\frac{1}{2}}, t\right)\right) \frac{\partial u}{\partial x}\left(x_{i+\frac{1}{2}}, t\right) - \Phi\left(x_{i-\frac{1}{2}}\right) D\left(u\left(x_{i-\frac{1}{2}}, t\right)\right) \frac{\partial u}{\partial x}\left(x_{i-\frac{1}{2}}, t\right) dt \right] \quad (5)$$

On pose $\Phi_i = \Phi(x_i)$ et on fait les approximations ci-dessous.

2-4-3. Schéma d'Euler explicite en temps

Pour $1 < i < N$, on approche :

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \Phi(x)[u(x, t_{n+1}) - u(x, t_n)]dx \simeq \Phi_i h_i (u(x_i, t_{n+1}) - u(x_i, t_n)) \simeq \Phi_i h_i (u_i^{n+1} - u_i^n) \quad (6)$$

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \Phi(x_{i+\frac{1}{2}}) D(u(x_{i+\frac{1}{2}}, t)) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+\frac{1}{2}}, t) dt \simeq k \cdot \frac{1}{2} [\Phi_i D(u(x_i, t_n)) + \Phi_{i+1} D(u(x_{i+1}, t_n))] \cdot \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{h_{i+\frac{1}{2}}} \quad (7)$$

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \Phi(x_{i-\frac{1}{2}}) D(u(x_{i-\frac{1}{2}}, t)) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-\frac{1}{2}}, t) dt \simeq k \cdot \frac{1}{2} [\Phi_i D(u(x_i, t_n)) + \Phi_{i-1} D(u(x_{i-1}, t_n))] \cdot \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{h_{i-\frac{1}{2}}} \quad (8)$$

Après développement, on aboutit au schéma numérique suivant [20] :

$$\left\{ \begin{array}{l} u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{k}{2h_i} \left\{ \left[D(u_i^n) + \frac{\Phi_{i+1}}{\Phi_i} D(u_{i+1}^n) \right] \cdot \frac{(u_{i+1}^n - u_i^n)}{h_{i+\frac{1}{2}}} - \left[D(u_i^n) + \frac{\Phi_{i-1}}{\Phi_i} D(u_{i-1}^n) \right] \cdot \frac{(u_i^n - u_{i-1}^n)}{h_{i-\frac{1}{2}}} \right\} \\ \text{pour } 1 < i < N \text{ et } n \geq 0 \\ u_1^{n+1} = u_1^n + \frac{k}{2h_1 h_{\frac{3}{2}}} \left[D(u_1^n) + \frac{\Phi_2}{\Phi_1} D(u_2^n) \right] (u_2^n - u_1^n), \quad \text{pour } i = 1 \text{ et } n \geq 0 \\ u_N^{n+1} = u_N^n - \frac{k}{2h_N h_{N-\frac{1}{2}}} \left[D(u_N^n) + \frac{\Phi_{N-1}}{\Phi_N} D(u_{N-1}^n) \right] (u_N^n - u_{N-1}^n), \quad \text{pour } i = N \text{ et } n \geq 0 \\ u_i^0 = u_0(x_i), \quad \text{pour } 1 \leq i \leq N \\ u_0^n = u_1^n \text{ et } u_{N+1}^n = u_N^n, \quad \text{pour } n \geq 0 \end{array} \right. \quad (9)$$

Rappelons qu'un schéma numérique est la formulation algébrique d'un problème discret conçu à l'aide d'une méthode. Connaissant les u_i^0 , nous en déduisons les u_i^1 et ainsi de suite jusqu'aux u_i^n . Ce schéma est dit explicite, car la **Formule (9)** donne u_i^{n+1} de manière explicite en fonction des u_i^n pour $1 \leq i \leq N$.

2-4-4. Schéma d'Euler implicite en temps

Repartons à la **Relation (5)**. On fait les approximations suivantes :

Pour $1 < i < N$, on a :

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \Phi(x) [u(x, t_{n+1}) - u(x, t_n)] dx \simeq \Phi_i h_i (u_i^{n+1} - u_i^n) \quad (10)$$

La discrétisation implicite en temps est obtenue en prenant $t = t_{n+1}$, on alors :

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \Phi(x_{i+\frac{1}{2}}) D(u(x_{i+\frac{1}{2}}, t)) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+\frac{1}{2}}, t) dt \simeq k \cdot \frac{1}{2} [\Phi_i D(u(x_i, t_n)) + \Phi_{i+1} D(u(x_{i+1}, t_n))] \frac{u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}}{h_{i+\frac{1}{2}}} \quad (11)$$

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \Phi(x_{i-\frac{1}{2}}) D(u(x_{i-\frac{1}{2}}, t)) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-\frac{1}{2}}, t) dt \simeq k \cdot \frac{1}{2} [\Phi_i D(u(x_i, t_n)) + \Phi_{i-1} D(u(x_{i-1}, t_n))] \frac{u_i^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{h_{i-\frac{1}{2}}} \quad (12)$$

Après développement, le schéma d'Euler implicite en temps donne le schéma numérique suivant [20] :

Pour $i = 2$ à $N - 1$ et pour $n \geq 0$,

$$\Phi_i h_i (u_i^{n+1} - u_i^n) = \frac{k}{2} \left\{ [\Phi_i D(u(x_i, t_n)) + \Phi_{i+1} D(u(x_{i+1}, t_n))] \cdot \frac{(u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1})}{h_{i+\frac{1}{2}}} - [\Phi_i D(u(x_i, t_n)) + \Phi_{i-1} D(u(x_{i-1}, t_n))] \cdot \frac{(u_i^{n+1} - u_{i-1}^{n+1})}{h_{i-\frac{1}{2}}} \right\} \quad (13)$$

$$\text{Pour } i = 1 \text{ et } n \geq 0, \Phi_1 h_1 (u_1^{n+1} - u_1^n) = \frac{k}{2} [\Phi_1 D(u(x_1, t_n)) + \Phi_2 D(u(x_2, t_n))] \cdot \frac{(u_2^{n+1} - u_1^{n+1})}{h_{\frac{3}{2}}} \quad (14)$$

$$\text{Pour } i = N \text{ et } n \geq 0, \Phi_N h_N (u_N^{n+1} - u_N^n) = -\frac{k}{2} [\Phi_N D(u(x_N, t_n)) + \Phi_{N-1} D(u(x_{N-1}, t_n))] \cdot \frac{(u_N^{n+1} - u_{N-1}^{n+1})}{h_{N-\frac{1}{2}}} \quad (15)$$

$$\text{Pour } i = 0, \forall n \geq 0, u_0^{n+1} = u_1^{n+1} \quad (16)$$

$$\text{Pour } i = N, \forall n \geq 0, u_{N+1}^{n+1} = u_N^{n+1} \quad (17)$$

Pour ce schéma, connaissant u_i^n ($1 \leq i \leq N$), on calcule u_i^{n+1} ($1 \leq i \leq N$) en résolvant un système d'équations linéaires. La méthode SOR (successive-over-relaxation) a été utilisée pour cette résolution.

✓ **Loi de diffusion**

Les phénomènes non linéaires de la diffusion de l'humidité dans le béton associée à la loi d'écoulement un coefficient de diffusion qui s'exprime à partir du degré d'humidité relative λ , qui est relié à la concentration en eau par la courbe de sorption/désorption. La forme de cette loi est donnée par **l'Equation** [21] :

$$D(\lambda) = D_1 \left(\alpha + \frac{1-\alpha}{1 + \left(\frac{1-\lambda(u)}{1-0,75} \right)^n} \right) \tag{18}$$

Par convention : $D_1 = 3 \times 10^{10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$; $0,025 \leq \alpha \leq 0,1$; n est de l'ordre de 6 ; $\lambda(u)$ est le degré d'humidité, qui s'exprime en fonction de la concentration du polluant.

Pour le problème de diffusion traité dans ce travail, on se propose de choisir un coefficient de diffusion défini par :

$$D(u) = D_1 \left(\alpha + \frac{1-\alpha}{1 + \left(\frac{u_{eq}-u}{u_{eq}(1-u_f)} \right)^{n_f}} \right) \tag{19}$$

où α , u_f et n_f sont les paramètres de forme.

On prendra [21] :

$$0,025 \leq \alpha \leq 0,75$$

$$u_f = 0,90$$

$$0 \leq n_f \leq 16$$

et $D_1 = 6,93 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, le coefficient de diffusion dans l'eau de l'ammoniac.

En plus, on a :

$$0 \leq u_{eq} \leq 1, \text{ concentration initiale}$$

$$0 \leq \Phi \leq 1, \text{ porosité du sable}$$

Ce coefficient met en évidence le caractère non linéaire de la diffusion du polluant dissous à travers le béton.

3. Résultats et discussion

3-1. Résultats de mesures de la concentration

Les résultats des mesures de la concentration en ammoniac (NH_3) dans le bac en béton contenant l'eau potable, à partir du dispositif de la **Figure 1**, sont donnés dans le **Tableau 1**.

Tableau 1 : Résultats des mesures des valeurs de concentration en ammoniac [8]

Durée (semaines)	Solution initiale (mg/L)	Concentration (mg/L) Échantillon 1	Concentration (mg/L) Échantillon 2
1		1,12	1,10
2		1,80	1,86
3	19 600	2,25	2,05
4		2,87	2,55
5		3,18	3,50

Deux dispositifs expérimentaux (échantillon 1 et échantillon 2) ont permis d'effectuer des mesures dans le temps des valeurs de la concentration de NH_3 dans la cuve en béton. On constate globalement une variation des valeurs de la concentration mesurée dans les deux échantillons. Puisque les deux échantillons présentent les mêmes caractéristiques, on note :

- Pour l'échantillon 1 : les valeurs de concentrations de NH_3 varient entre 1,2 et 3,18 mg/L;
- Pour l'échantillon 2 : les valeurs de concentrations de NH_3 varient entre 1,10 et 3,50 mg/L.

Ces résultats mettent en évidence une diffusion du polluant NH_3 au travers des parois de la cuve en béton, altérant ainsi progressivement la qualité de l'eau potable contenue dans cette cuve [8].

3-2. Résultats avec le schéma d'Euler explicite en temps

Les résultats des tests de simulations numériques sont obtenus avec le logiciel Scilab-5.5.2 (64 bits) [22]. Ils sont présentés dans les **Tableaux A1** et **A2 (Annexes)** qui donnent, pour différentes valeurs des paramètres de forme α , u_f et n_f , les concentrations en NH_3 à l'abscisse $x = 37,5$ cm correspondant au centre du domaine modélisé. On obtient ainsi des courbes avec une certaine variabilité de concentration pour chaque test numérique effectué. Les **Figures 5** et **6** indiquent la variation spatiale (simulée) de la concentration en NH_3 en chaque point et aux temps $t = 1$ semaine et $t = 5$ semaines respectivement, avec les paramètres de forme $\alpha = 0,75$; $u_f = 0,90$ et $n_f = 16$, pour un pas de temps $k = 60$ secondes.

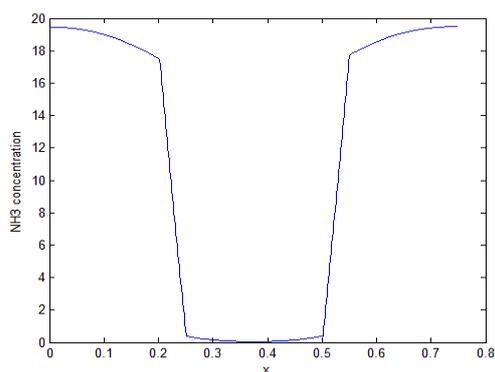


Figure 5 : Simulation 1, $t = 1$ semaine: Graphe type donnant l'allure et l'évolution spatiale de la concentration en NH_3 dans la matrice cimentaire et à l'intérieur du réservoir contenant l'eau stockée

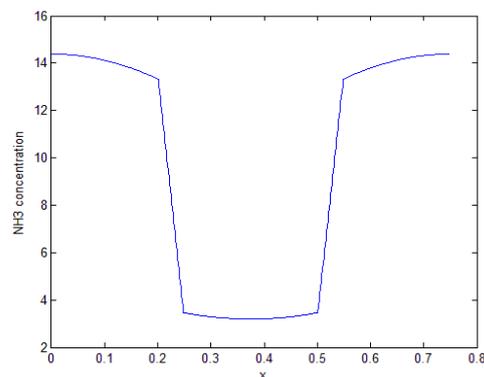


Figure 6 : Simulation 1, $t = 5$ semaines: Graphe type donnant l'allure et l'évolution spatiale de la concentration en NH_3 dans la matrice cimentaire et à l'intérieur du réservoir contenant l'eau stockée

Nous supposons que les dimensions du réservoir expérimental sont assez petites pour nous permettre de négliger à chaque temps t , les variations spatiales du champ de concentration en polluant. C'est ainsi que pour $t = 1$ semaine et $t = 5$ semaines nous mesurons expérimentalement une concentration constante dans le réservoir, respectivement égale à $1,12 \text{ mg/L}$ et $3,18 \text{ mg/L}$ (**Tableau 1**), ce qui se traduit à peu près par les paliers (de $x = 0,25 \text{ m}$ à $x = 0,50 \text{ m}$) observés sur les courbes théoriques des **Figures 5** et **6**. Les **Figures 7** et **8** indiquent la variation spatiale de la concentration en NH_3 en chaque point et aux temps $t = 1$ semaine et $t = 5$ semaines respectivement, cette fois avec les paramètres de forme $\alpha = 0,25$; $u_f = 0,35$ et $n_f = 16$, pour un pas de temps $k = 40$ secondes.

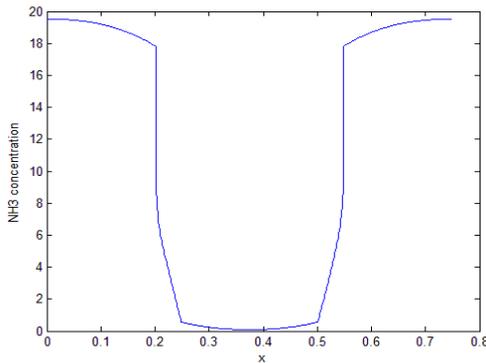


Figure 7 : *Simulation 2, $t = 1$ semaine: Graphe type donnant l'allure et l'évolution spatiale de la concentration en NH_3 dans la matrice cimentaire et à l'intérieur du réservoir contenant l'eau stockée*

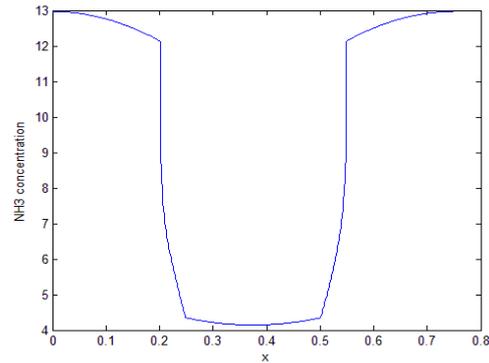


Figure 8 : *Simulation 2, $t = 5$ semaines: Graphe type donnant l'allure et l'évolution spatiale de la concentration en NH_3 dans la matrice cimentaire et à l'intérieur du réservoir contenant l'eau stockée*

3-3. Résultats avec le schéma d'Euler implicite en temps

Les résultats des tests de simulations numériques sont présentés dans les **Tableaux A3** et **A4 (Annexes)**. Ils donnent les concentrations en NH_3 à l'abscisse $x = 37,5 \text{ cm}$, correspondant au centre du domaine modélisé, pour différentes valeurs des paramètres de forme α , u_f et n_f . Les **Figures 9** et **10** montrent la variation spatiale de la concentration en NH_3 en chaque point et aux temps $t = 1$ semaine et $t = 5$ semaines respectivement, avec les paramètres de forme : $\alpha = 0,75$; $u_f = 0,90$ et $n_f = 16$, pour un pas de temps $k = 300$ secondes.

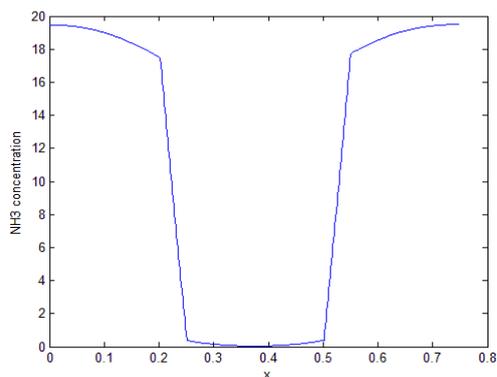


Figure 9 : Simulation 3, $t = 1$ semaine: Graphe type donnant l'allure et l'évolution spatiale de la concentration en NH_3 dans la matrice cimentaire et à l'intérieur du réservoir contenant l'eau stockée

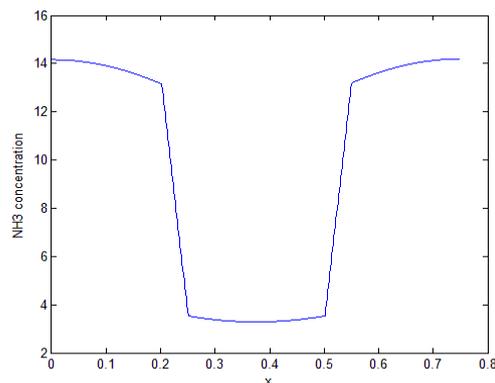


Figure 10 : Simulation 3, $t = 5$ semaines: Graphe type donnant l'allure et l'évolution spatiale de la concentration en NH_3 dans la matrice cimentaire et à l'intérieur du réservoir contenant l'eau stockée

Les **Figures 11 et 12** donnent la variation spatiale de la concentration en NH_3 en chaque point et aux temps $t = 1$ semaine et $t = 5$ semaines respectivement, les paramètres de forme sont $\alpha = 0.25$, $u_f = 0.35$ et $n_f = 16$, pour un pas de temps $k = 300$ secondes.

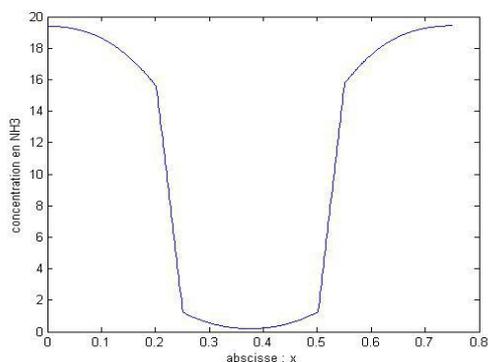


Figure 11 : Simulation 4, $t = 1$ semaine: Graphe type donnant l'allure et l'évolution spatiale de la concentration en NH_3 dans la matrice cimentaire et à l'intérieur du réservoir contenant l'eau stockée

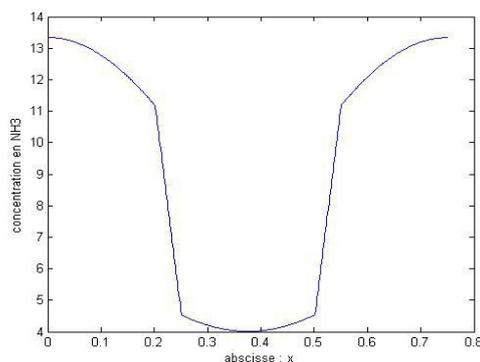


Figure 12 : Simulation 4, $t = 5$ semaines: Graphe type donnant l'allure et l'évolution spatiale de la concentration en NH_3 dans la matrice cimentaire et à l'intérieur du réservoir contenant l'eau stockée

3-4. Comparaison des valeurs de la concentration en NH_3 calculées à partir des simulations numériques basées sur les schémas d'Euler explicite et implicite

Les résultats sont donnés dans le **Tableau A5 (Annexes)**. La comparaison graphique (**Figures 13 et 14**) des résultats des mesures de la concentration obtenus à partir des simulations numériques avec les résultats expérimentaux de laboratoire conduit aux observations ci-après.

3-4-1. Pour le schéma d'Euler explicite

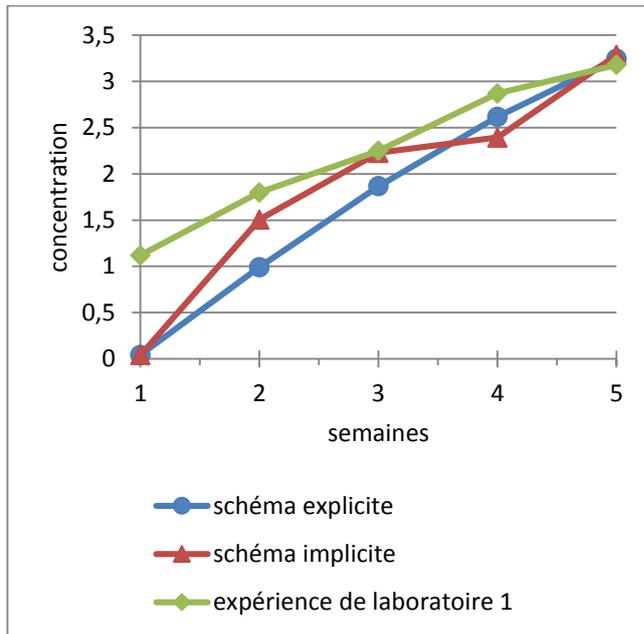


Figure 13 : Comparaison entre le schéma d'Euler explicite et le schéma d'Euler implicite de l'évolution temporelle de la concentration de NH_3 avec $\alpha = 0,75$; $u_f = 0,90$; $n_f = 16$ (courbe de référence : expérience de laboratoire 1).

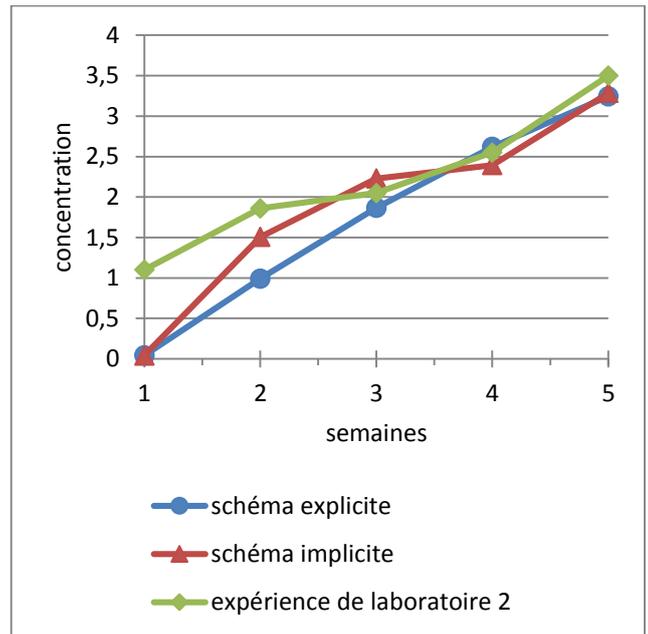


Figure 14 : Comparaison entre le schéma d'Euler explicite et le schéma d'Euler implicite de l'évolution temporelle de la concentration de NH_3 avec $\alpha = 0,75$; $u_f = 0,90$; $n_f = 16$ (courbe de référence : expérience de laboratoire 2).

On note deux phases distinctes :

- Dans une première phase, qui s'étale sur les trois premières semaines, les courbes théoriques (simulations numériques) sont assez écartées des courbes expérimentales (expériences de laboratoire).
- C'est dans la deuxième phase, qui se situe au-delà de la troisième semaine, que les courbes théoriques et expérimentales se rapprochent. Ce rapprochement est beaucoup plus net avec la courbe expérimentale de l'essai de laboratoire n°2 (Figure 14). La convergence physique a été établie en fixant le pas de temps à $k = 60$ secondes, vérifiant alors la condition de stabilité.

Il apparaît ainsi que dans le schéma d'Euler explicite en temps, plus le pas est petit, plus la condition de stabilité devient moins contraignante.

3-4-2. Pour le schéma d'Euler implicite

Ici aussi on note deux phases distinctes :

- La première phase se situe juste au cours de la première semaine. Les courbes théoriques et expérimentales sont nettement écartées (Figures 13 et 14).
- La deuxième phase commence beaucoup plus tôt que ci-dessus, dès la deuxième semaine. Les courbes issues de la simulation numérique se chevauchent avec les courbes expérimentales. La superposition des deux types de courbes (théorique et expérimentale) est très remarquable avec l'essai de laboratoire n°2 (Figure 14). La convergence physique est obtenue grâce à la fixation d'un pas de temps beaucoup plus grand à $k = 300$ secondes, la stabilité étant alors vérifiée dans ce cas.

Au regard de ces résultats, nous avons pu montrer que dans un schéma d'Euler implicite en temps, plus le pas est grand, plus la condition de stabilité paraît plus facile à réaliser.

4. Conclusion

L'équation de diffusion non linéaire décrit ici l'évolution de la concentration d'un polluant, le NH_3 , au travers des parois en béton d'un réservoir construit sous un sol saturé en eau, sur la base d'un modèle mathématique 1D. Ce modèle est basé sur la résolution numérique d'une équation de diffusion non linéaire par la méthode des volumes finis. L'approximation choisie consiste à diviser l'ensemble du domaine de calcul en un nombre de petits volumes appelés "volumes de contrôle". Cette résolution a été utilisée pour simuler la diffusion du polluant NH_3 dans un milieu poreux hétérogène, en l'occurrence un matériau granulaire cimenté (MGC). Les mesures expérimentales de laboratoire et les prédictions théoriques (schémas numériques) confirment la diffusion du polluant NH_3 au travers des parois en béton. Nous pouvons donc affirmer que les résultats des simulations numériques obtenus approchent de près les résultats expérimentaux de laboratoire. Toutefois, le schéma d'Euler implicite donne des résultats plus proches de ceux obtenus expérimentalement au laboratoire. Aussi, nous estimons que le schéma d'Euler implicite conduit à une meilleure prédiction des résultats que le schéma d'Euler explicite, dans le cadre du problème étudié. Nous pensons que l'écart observé tout au début de l'expérience (première et deuxième semaines) pourrait s'expliquer par l'influence de la structure granulaire de la matrice cimentaire, notamment par la porosité. Dans cette première phase, le temps d'absorption devrait être pris en compte en plus du phénomène de diffusion. Par conséquent, dans la recherche de l'amélioration du modèle mathématique, outre le fait qu'il faudrait envisager un problème 3D qui se rapprocherait mieux de la réalité, nous devrions associer le temps d'absorption des polluants, particulièrement au début de l'imbibition de la matrice cimentaire.

Références

- [1] - N. MALANDA and P. LOUZOLO-KIMBEMBE, *Open Journal of Civil Engineering*, 04 (2014) 13-22, <http://dx.doi.org/10.4236/ojce.2014.41002>
- [2] - N. MALANDA, L. MATINI and P. LOUZOLO-KIMBEMBE, *International Journal of Advanced Research in Engineering Technology*, 05 (10) (2014) 34-44.
- [3] - S. ROUX, "Thèse de Doctorat", Université Louis Pasteur, Strasbourg 1 (2009).
- [4] - N. MOUKOLO, "Proceedings of the Sahel form", Ouagadougou, Burkina-Faso (1989).
- [5] - N. MOUKOLO and C. BECAYE, "Unité de recherche sur les écosystèmes", Brazzaville (2001).
- [6] - N. MOUKOLO and C. BECAYE, *Sécheresse*, 02 (3) (2001) 175 – 185.
- [7] - M. D. NGUYEN, "Thèse de Doctorat", École des Ponts – Paris Tech, Laboratoire central des ponts et chaussées, Paris (2009).
- [8] - N. MALANDA, C. A. THATY and P. LOUZOLO-KIMBEMBE, *International Journal of Civil and Environmental Engineering*, 37 (2) (2015) 1408-1415.
- [9] - Z. P. BAZANT and L. J. NAJJAR, *Cement and concrete research*, 01 (1971) 461-473.
- [10] - B. V. BAROGHEL, "Thèse de Doctorat", École Nationale des Ponts et Chaussées, Paris (1994).
- [11] - F. DEDECKER, "Thèse de Doctorat", École centrale de Lyon, Génie civil (1999).
- [12] - M. MAINGUY, "Thèse de Doctorat", École Nationale des Ponts et Chaussées, Paris (1999).
- [13] - R. AFFES, "Thèse de Doctorat", Montpellier II, Montpellier (2012).
- [14] - G. RASTIELLO, "Thèse de Doctorat", Université Paris Est (2013).

- [15] - P. KNABNER and L. ANGERMANN, "*Numerical methods for elliptic and parabolic partial differential equations*", Springer (2003).
- [16] - W. ZHUOQUN, Y. JINGXUE and W. CHUMPENG, "*Elliptic and parabolic equations*", World scientific (2006).
- [17] - H. K. VERSTEEG and W. MALALASEKERA, "*An introduction to computational fluid dynamics, the finite volume methods*", Longman scientific and technical (1995).
- [18] - R. EYMARD, T. GALLOUËT and R. HERBIN, "*Finite volume methods*", Handbook of numerical analysis, Vol. III, North Holland, Amsterdam (2000) 713-1020.
- [19] - B. TIMOTHY and M. OHLBERGE, "*Finite volume methods: foundation and analysis*", Encyclopedia of computational mechanics (2004).
- [20] - C. J. ITOUA-TSELE, "*Mémoire de Master*", Ecole Nationale Supérieure Polytechnique, Brazzaville, Congo (2015).
- [21] - M. CONDE, "*Engineering: Thermo-physical properties of (NH₃+H₂O) solutions for industrial design of absorption refrigeration equipment, Formulation for industrial use*", Zurich (2004).
- [22] - J. P. CHANCELIER, F. DELEBECQUE, C. GOMEZ, M. GOURSAT, M. NIKOUKHAH and S. STEER, "*Introduction à Scilab*", Springer (2007).

ANNEXES

Tableau A1 : Résultats des mesures de concentration - simulation numérique 1/SEET

Durée (semaine)	Concentration (mg/L)	Pas de temps: $k = 60 \text{ s}$ Paramètres de forme
1	0,0420	$\alpha = 0,75$
2	0,9926	$u_f = 0,90$
3	1,8667	$n_f = 16$
4	2,6193	
5	3,2455	

Tableau A2 : Résultats des mesures de concentration - simulation numérique 2/SEET

Durée (semaine)	Concentration (mg/L)	Pas de temps: $k = 40 \text{ s}$ Paramètres de forme
1	0,0905	
2	0,7869	$\alpha = 0,25$
3	2,8103	$u_f = 0,35$
4	3,5824	$n_f = 16$
5	4,1669	

Tableau A3 : Résultats des mesures de concentration - simulation numérique 3/SEIT

Durée (semaine)	Concentration (mg/L)	Pas de temps: $k = 300 \text{ s}$ Paramètres de forme
1	0,0408	$\alpha = 0,75$
2	1,5063	$u_f = 0,90$
3	2,2281	$n_f = 16$
4	2,3943	
5	3,2863	

Tableau A4 : Résultats des mesures de concentration - simulation numérique 4/SEIT

Durée (semaine)	Concentration (mg/L)	Pas de temps: $k = 300 \text{ s}$ Paramètres de forme
1	0,2060	$\alpha = 0,25$
2	1,2951	$u_f = 0,35$
3	2,6566	$n_f = 16$
4	3,3915	
5	4,0139	

Tableau A5 : Variation de la concentration du polluant NH_3 dans les deux types de simulation (numérique et expérimentale), avec $\alpha = 0,75$ et $u_f = 0,90$

Durée (semaine)	Schéma d'Euler explicite	Schéma d'Euler implicite	Exper. Labo. 1	Exper. Labo. 2
1	0,0420	0,0408	1,12	1,10
2	0,9926	1,5063	1,80	1,86
3	1,8667	2,2281	2,25	2,05
4	2,6193	2,3943	2,87	2,55
5	3,2455	3,2863	3,18	3,50

Exper. Labo.: Expérience de laboratoire
SEET: Schéma d'Euler explicite en temps
SEIT : Schéma d'Euler implicite en temps