

**« Modélisation du transport réactif dans les eaux souterraines :
Généralisation des méthodes ELLAM »
(Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method)**

Le devenir des polluants dans les sols constitue un enjeu environnemental majeur. Dans ce travail, nous apportons une contribution à quelques méthodes numériques pour la simulation de l'écoulement et du transfert de polluants en milieu poreux variablement saturés. La propagation d'un contaminant dans les milieux souterrains dépend en premier lieu des caractéristiques de l'écoulement qui le transporte. Dans la première partie de ce travail, nous présentons la méthode des éléments finis mixtes hybrides pour la résolution de l'équation de Richards. Une procédure de condensation de la masse est proposée pour éviter l'apparition d'oscillations non physiques, notamment lors de la simulation de problèmes d'infiltration dans un milieu initialement sec.

Dans la deuxième partie de ce travail, la méthode ELLAM est utilisée pour la modélisation du transport réactif en milieux fortement hétérogènes. En effet, les résultats obtenus pour le transport linéaire, décrit par l'équation d'advection-dispersion, avec les ELLAM sont très encourageants. La méthode ELLAM permet *(i)* de s'affranchir des contraintes de discrétisations spatiale et temporelle imposées avec les méthodes eulériennes classiques, *(ii)* de conserver la masse et *(iii)* de traiter toutes les conditions aux limites. Par ailleurs, nous proposons une nouvelle formulation des ELLAM (C_ELLAM) permettant d'éviter les oscillations numériques et de limiter la diffusion numérique générées par la formulation standard.

Dans la dernière partie, le code de calcul élaboré avec la formulation C_ELLAM est utilisé pour la caractérisation de la macrodispersion dans les milieux hétérogènes. Pour ce faire, il est indispensable de disposer d'outils de simulation précis et efficaces car cette étude est basée sur une méthode Monte Carlo nécessitant la réalisation d'un très grand nombre de simulations sur des grilles de calcul de l'ordre du million de mailles. Les résultats obtenus sont comparés avec une étude antérieure basée sur le Random Walk Particle Method.

Mots clés : milieux poreux, transport réactif, ELLAM, diffusion numérique, oscillations non physiques, macrodispersion