

---

# Simulation numérique du transport de masse dans des milieux poreux

## Utilisation de la méthode particulaire

**Anthony Beaudoin\*** — **Samira Oukfif \*** — **Ahmed Benamar\*** — **Huaqing Wang\*** — **Elie Rivoalen\*** — **Serge Huberson\*\*** — **Jean-Raynald de Dreuzy\*\*\*** — **Jocelyne Erhel\*\*\*\***

*\*Laboratoire Ondes et Milieux Complexes de l'Université du Havre, 25, Rue Philippe Lebon, BP 540, 76058 Le Havre Cedex, Anthony.Beaudoain@univ-lehavre.fr, samira.oukfif@univ-lehavre.fr, benamar@univ-lehavre.fr, huaqing.wang@univ-lehavre.fr, elie.rivoalen@insa-rouen.fr*

*\*\* Laboratoire d'Etudes Aérodynamiques de l'Université de Poitiers, serge.huberson@univ-poitiers.fr*

*\*\*\* Géosciences de l'Université de Rennes, Jean-Raynald.de-Dreuzy@univ-rennes1.fr*

*\*\*\*\* IRISA – INRIA de Rennes, jocelyne.erhel@irisa.fr*

---

*RÉSUMÉ. Ce papier présente une contribution numérique à l'étude du transport de masse dans les milieux poreux et porte sur l'utilisation d'une méthode lagrangienne appelée méthode particulaire. Cette méthode a été appliquée à ce type de problème dès les années 70. Dans la plupart des cas, la seule technique connue pour traiter le terme dispersif de l'équation de transport était la technique de marche aléatoire. Depuis, deux autres techniques ont été introduites: particle strength exchange et vitesse de dispersion. Pour rendre compte de la capacité de la méthode particulaire à résoudre les problèmes posés en milieux poreux, nous avons choisi de présenter ces trois techniques à travers trois problèmes représentatifs des différentes équations rencontrées en milieux poreux.*

*ABSTRACT. This paper presents a numerical contribution to the study of mass transport in porous media and it is concerned with the use of a lagrangian method called particle method. This method has been applied on this type of problem as soon as the years 70. In the majority of cases, the alone technique known to solve the dispersion term in the transport equation was the random walk technique. Two other techniques have been introduced since: particle strength exchange and dispersion velocity. In order to show clearly the efficiency of the particle method to solve problems of mass transport in porous media, we have chosen to present these three techniques through three problems which are representative various equations used in porous media.*

*MOTS-CLÉS: transport de masse, marche aléatoire, particle strength exchange, vitesse de dispersion, méthode particulaire.*

*KEYWORDS: mass transport, random walk, particle strength exchange, dispersion velocity, particle method.*

---

## 1. Introduction

En France, les eaux souterraines constituent 80% de la demande en eau potable. Cette principale source d'eau potable est menacée par les pollutions engendrées par l'homme (Direction générale de la santé, 2005). L'étude de ces risques nécessite de connaître les mécanismes de transport de masse. Le milieu souterrain étant difficile d'accès, les simulations numériques apportent une solution (Hoteit, 2002). Les codes de calcul réalisent ces simulations en résolvant des équations de transport à l'aide de méthodes numériques (Béchet *et al.*, 2004). Trois types de méthodes numériques sont utilisés. L'approche eulérienne résout les équations sur une grille fixe. Elle donne de bons résultats à conditions de respecter des critères de pas de temps et d'espace pour éviter les oscillations numériques. L'approche lagrangienne remplace la grille fixe par un ensemble de particules mouvantes. Elle offre un schéma conservatif mais elle a des difficultés pour traiter le terme dispersif des équations. Dans l'approche mixte, les équations sont résolues par une méthode eulérienne pour la partie dispersive et par une méthode lagrangienne pour la partie convective. Cette approche ne respecte pas la conservation de la masse (Zheng *et al.*, 1995). Ce travail présente une contribution numérique à l'étude du transport de masse dans des milieux poreux et porte sur l'utilisation d'une méthode lagrangienne appelée méthode particulaire. Cette méthode a été appliquée à ce type de problème dès les années 70 (Salamon *et al.*, 2006). La seule technique connue pour traiter le terme dispersif de l'équation de transport était la marche aléatoire (MA). Depuis, deux autres techniques ont été introduites: particle strength exchange (PSE) (Zimmermann *et al.*, 2001) et vitesse de dispersion (VD) (Chertok *et al.*, 2001). Pour montrer la capacité de la méthode particulaire à résoudre les problèmes posés en milieux poreux, ces trois techniques sont appliquées à trois problèmes représentatifs des équations rencontrées en milieux poreux.

## 2. Transport de masse dans les milieux poreux

En transport de masse, on est amené à résoudre l'équation de transport décrivant l'évolution d'une grandeur physique  $\psi$  dans un milieu poreux:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\psi) = \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla(\psi)) + S \quad [1]$$

Avec  $\mathbf{U}$  une vitesse de convection,  $\mathbf{D}$  un tenseur de dispersion et  $S$  un terme source.

### 2.1. Equation d'écoulement

La théorie des écoulements en milieux poreux non saturés peut reposer sur l'équation de Richards (Richards, 1931), obtenu en couplant l'équation de conservation et la loi de Darcy:

$$\frac{\partial Se}{\partial t} + \nabla \cdot (q) = 0 \text{ avec } q = -K \cdot \nabla(h - z) \text{ et } Se = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad [2]$$

Avec  $Se$  le degré de saturation,  $q$  la vitesse de Darcy,  $K$  la perméabilité,  $h$  le potentiel matriciel,  $z$  la cote,  $\theta$  la teneur en eau,  $\theta_r$  la teneur en eau résiduelle,  $\theta_s$  la teneur en eau de saturation.  $K$  et  $h$  sont donnés par des expressions empiriques (Van Genuchten, 1980):

$$h = \frac{1}{\alpha} \left( S_e^{\frac{n}{1-n}} - 1 \right)^{\frac{1}{n}} \text{ et } K = k_s Se^{1/2} \left( 1 - \left( 1 - Se^{\frac{n}{1-n}} \right)^{\frac{n-1}{n}} \right)^2 \quad [3]$$

Avec  $\alpha$  la pression d'entrée de l'air,  $n$  un paramètre décrivant la distribution de la taille des pores et  $k_s$  la perméabilité à saturation. En introduisant la dispersion hydraulique  $D_h$  et la vitesse de convection par gravité  $U_g$ , l'équation (Eq. 2) s'écrit:

$$\frac{\partial Se}{\partial t} + \nabla \cdot (U_g Se) = \nabla \cdot (D_h \nabla(Se)) \text{ avec } D_h = K \frac{\partial h}{\partial Se} \text{ et } U_g = Kk \quad [4]$$

Où  $k$  est le vecteur unitaire de l'axe verticale. Cette équation est difficile à résoudre car elle est hautement non linéaire à cause de la dépendance de la perméabilité  $K$  et du potentiel matriciel  $h$  à la saturation en eau  $Se$ .

### 2.2. Equation de transport

La convection, la diffusion, la dispersion et les phénomènes physico-chimiques sont les mécanismes régissant le transfert d'un traceur en milieu poreux. Ce transfert est décrit par l'équation de convection-dispersion (De Marsily, 1981):

$$\frac{\partial w_c C}{\partial t} + \nabla \cdot (U_e w_c C) = \nabla \cdot (D_d \nabla(w_c C)) + S \quad [5]$$

Avec  $w_c$  la porosité effective,  $C$  la concentration du traceur,  $U_e$  la vitesse d'écoulement,  $D_d$  la dispersion dynamique. Lorsque l'échange de traceur entre sol/eau n'est pas à l'équilibre, la sorption peut être décrite par une cinétique:

$$S = \frac{\partial \rho_p w_c}{\partial t} = \rho_p K_{rel} (w_o - w_c) - K_{dep} w_c C \quad [6]$$

Avec  $\rho_p$  la densité du traceur,  $K_{dep}$  et  $K_{rel}$  les coefficients de dépôt et de relargage, et  $w_o$  la porosité initiale.  $D_d$  est donné par le modèle de Scheidegger:

$$D = (\alpha_T |U_e| + D_m) I + (\alpha_L - \alpha_T) U_e U_e^T / |U_e| \quad [7]$$

Avec  $D_m$  le coefficient de diffusion moléculaire,  $\alpha_L$  et  $\alpha_T$  les dispersivités longitudinale et transversale. La résolution de l'équation de transport est difficile à cause de son couplage avec la cinétique de 1<sup>o</sup> ordre. D'autres difficultés peuvent apparaître: domaine de calcul infini et présence d'un front abrupt.

### 3. Méthode particulière

Le principe de la méthode particulière est de décrire le transport d'une grandeur physique  $\psi$  par l'étude du mouvement d'un ensemble de particules  $p$  (Lam, 2008).

#### 3.1. Discrétisation particulière

$\psi$  peut être écrite sans approximation sous la forme d'une intégrale d'un produit de convolution avec une distribution de Dirac  $\delta$ :

$$\psi(X, t) = \int_{\Omega} (X - Xp(t)) \psi(Xp(t)) dXp(t) \quad [8]$$

Où  $dXp(t)$  représente un volume élémentaire autour de la position  $Xp(t)$  et  $\Omega$  le domaine de calcul. On note  $dm(Xp(t), t)$  la quantité de  $\psi$  contenue dans le volume élémentaire. Une réécriture de l'équation (Eq. 8) donne alors:

$$\psi(X, t) = \int_{\Omega} (X - Xp(t)) dm(Xp(t), t) \quad [9]$$

Dans une formulation discrète, la masse élémentaire  $dm(Xp(t), t)$  devient la masse  $m_p$  d'une particule  $p$  située en  $Xp(t)$ :

$$\psi(X, t) = \sum_{p \in N_p} m_p(t) \delta(X - Xp(t)) \quad [10]$$

Où  $N_p$  est le nombre de particules. Avec une fonction d'interpolation  $\zeta$ , on a:

$$\psi(X, t) = \sum_{p \in N_p} m_p(t) \zeta_{\varepsilon}(X - Xp(t)) \text{ avec } \zeta_{\varepsilon}(X) = \zeta(X/\varepsilon) / \varepsilon^d \quad [11]$$

Avec  $d$  la dimension du problème et  $\varepsilon$  un paramètre de régularisation.

### 3.2. Information transportée

Il existe différentes méthodes de suivi des particules qui se distinguent suivant la manière de traiter le terme dispersif de l'équation (Eq. 1). Dans l'approche déterministe, l'évolution de la masse  $m_p$  et de la position  $X_p$  est donnée par les relations suivantes:

$$\frac{dX_p}{dt} = U \text{ et } \frac{dm_p}{dt} = \int_P (\nabla \cdot (D \nabla \psi)) dv + \int_P S dv \quad [12]$$

Il existe deux techniques pour résoudre la deuxième équation. La technique PSE s'appuie sur l'approximation du terme de dispersion de l'équation (Eq. 1) par un opérateur intégral:

$$\nabla \cdot (D \nabla \psi) = \int_{\Omega} (D(X) + D(X')) (\psi(X') - \psi(X)) \eta_{\varepsilon}(|X' - X|) dv \quad [13]$$

Si  $\eta_{\varepsilon}$  est une fonction à symétrie radiale, elle peut s'exprimer en fonction de  $\zeta_{\varepsilon}$ :

$$\eta_{\varepsilon}(X) = -2 \frac{\nabla \zeta_{\varepsilon}(X) \cdot X}{|X|^2} = \frac{4}{\varepsilon^2} \zeta_{\varepsilon}(X) \quad [14]$$

Sous forme discrète, le second membre de l'équation (Eq. 12) est approché par:

$$\int_P (\nabla \cdot (D \nabla \psi)) dv = \sum_j (D(X_p) + D(X_j)) (\Omega_j - \Omega_p) |P| \eta_{\varepsilon}(|X_p - X_j|) \quad [15]$$

Avec  $|P|=dX_p$  le volume élémentaire associé à la particule  $p$ . Dans la technique VD, le terme de dispersion de l'équation (Eq. 1) est interprété comme une vitesse de dispersion  $U_d$  due au gradient local de  $\psi$ :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot ((U + U_d) \psi) = S \text{ avec } U_d = -D \nabla \psi / \psi \quad [16]$$

Le terme  $\nabla \psi$  peut s'évaluer par une dérivation directe de l'équation (Eq. 11). Sous une forme particulière, l'équation précédente devient:

$$\frac{dX_p}{dt} = U + U_d \text{ et } \frac{dm_p}{dt} = \int_P S dv \quad [17]$$

Dans l'approche stochastique, on utilise la technique de marche aléatoire (MA) qui est basée sur l'analogie entre le mouvement brownien des molécules et le processus de dispersion. Chaque particule se déplace selon l'équation de Langevin:

$$dXp = Adt + Bdw(t) \quad [18]$$

Où le terme A est un déplacement déterministe donné par l'écoulement et une contribution de la dispersion. Le terme B représente un processus aléatoire incorporant la diffusion moléculaire et la dispersion. Le terme dw(t) représente un processus Wiener décrivant un mouvement brownien. Dans cette méthode MA, on ne résout pas l'équation de transport. Si un grand nombre  $N_p$  de particules est déplacé, la probabilité de présence f satisfait alors l'équation de Fokker-Planck:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\nabla \cdot \left[ \left( A - \frac{1}{2} \nabla \cdot B B^T \right) f \right] + \nabla \cdot \left[ \frac{1}{2} B \cdot B^T \nabla f \right] \quad [19]$$

En comparant cette équation à l'équation de transport, on identifie les termes:

$$A = U + \nabla \cdot D \text{ et } \frac{1}{2} B \cdot B^T = D \quad [20]$$

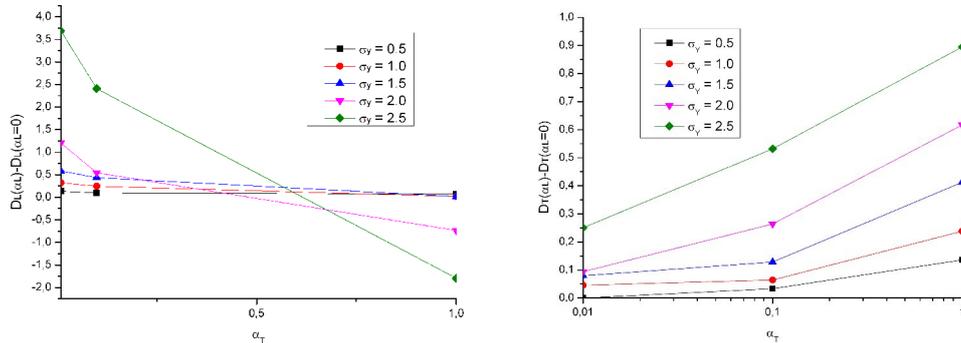
$\nabla \cdot D$  est dû à la différence entre l'équation de Fokker-Planck et l'équation de transport. Sa signification physique est un flux de particules engendré par une variation du tenseur de dispersion due à une variation de vitesse entre deux points.

#### 4. Applications numériques

##### 4.1. Transport inerte en milieu hétérogène

L'hétérogénéité de l'écoulement souterrain provoque un étalement du panache de solutés qu'on appelle macro dispersion et qu'on peut évaluer avec des simulations de Monte Carlo. Dans chaque simulation, on génère un champ de perméabilité hétérogène sur une grille régulière avec une méthode spectrale. Puis on détermine un écoulement permanent en résolvant sur la grille la loi de conservation couplée à la loi de Darcy par une méthode de volumes finis. Pour les conditions aux limites, on impose sur les frontières gauche et droite des charges hydrauliques décroissantes et sur les frontières supérieure et inférieure un flux nul. Ensuite l'équation de transport est résolue à l'aide de la technique de marche aléatoire qui offre une bonne précision pour un temps de calcul correcte. La macro dispersion est obtenue à partir d'une analyse de la trajectoire des particules. La plupart des précédents travaux ont quantifié cette macro dispersion en ignorant la dispersion dynamique. Nous reprenons ces études en introduisant cette dispersion dynamique. Une valeur de la

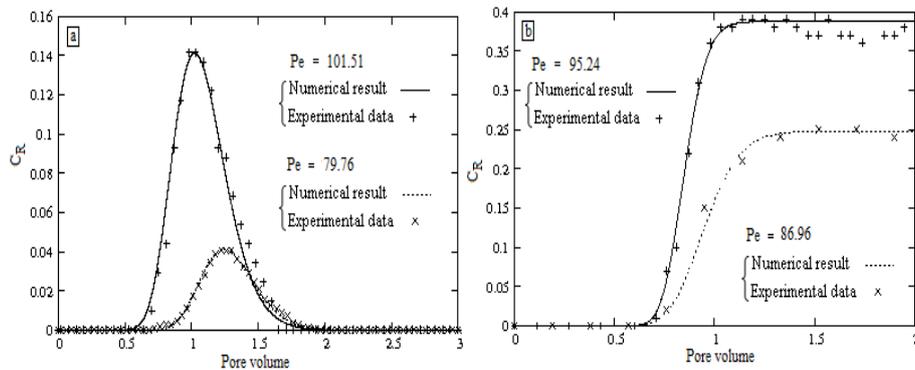
macro dispersion est obtenue en moyennant 100 simulations de Monte Carlo dans lesquelles 5000 particules sont injectées dans une grille de taille  $n_x=n_y=4096$  avec un pas en espace  $\Delta x=\Delta y=1\text{m}$ . La variance  $\sigma_y^2$  de la perméabilité varie entre 0 et 9. La longueur de corrélation  $\lambda_y$  et la moyenne  $m_y$  de la perméabilité  $K$  sont fixées à 10m et 1m/s. L'effet de la diffusion moléculaire est négligé. La dispersivité longitudinale  $\alpha_L$  est fixée à 1m alors que la dispersivité transversale  $\alpha_T$  varie entre 0,001 et 1m. Figure 1 représente les macro dispersions, longitudinale  $D_L$  et transversale  $D_T$ , en fonction de la dispersivité transversale  $\alpha_T$  pour différentes valeurs de  $\sigma_y^2$ . On observe que l'augmentation de  $\alpha_T$  provoque une réduction de  $D_L$  et une augmentation de  $D_T$ . Pour comprendre le rôle de  $\alpha_T$ , il faut revenir à l'équation de Langevin (Eq. 18). Les particules bougent sous l'effet de deux forces, convection et dispersion. La force de dispersion a une composante transversale dont l'effet est similaire à celui de la diffusion moléculaire. Cette composante permet aux particules de sortir des zones de faibles vitesses mais avec moins d'intensité que ne le ferait la diffusion moléculaire car la dispersion est proportionnelle à la vitesse. Des fortes valeurs de la variance  $\sigma_y^2$  provoquent des champs d'écoulement plus hétérogènes d'où une amplification de l'effet de la dispersivité transversale  $\alpha_T$  sur les macro dispersions  $D_L$  et  $D_T$ .



**Figure 1.** Macro dispersions, longitudinale  $D_L$  et transversale  $D_T$ , en fonction de la dispersivité transversale  $\alpha_T$  pour différentes valeurs de la variance  $\sigma_y^2$ .

#### 4.2. Essai de filtration en colonne de laboratoire

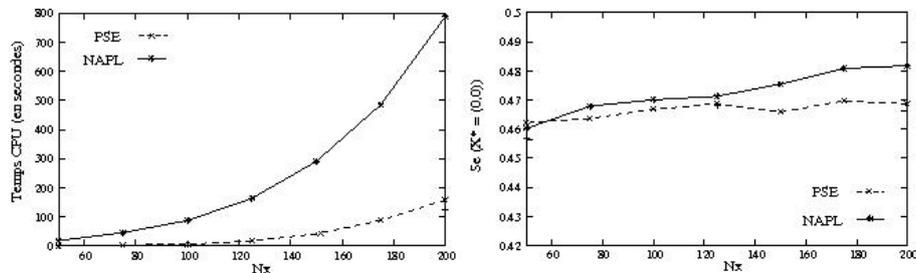
A l'aide de la technique VD, nous simulons la filtration de particules en suspension à travers un matériau granulaire (gravier ou sable) contenu dans une colonne de laboratoire. Les calculs effectués prennent en compte les deux modes d'injection et adoptent les conditions aux limites appropriées aux essais. Figure 2 représente les courbes de restitution, expérimentales et numériques. Dans les deux modes d'injection, l'augmentation du nombre de Péclet  $Pe$  se traduit par une augmentation de la concentration relative  $C_R$  de particules en suspension. L'écoulement empêche les particules de se déposer. La technique VD permet de reproduire la concentration relative maximale pour les différentes valeurs testées de débit  $Q$ . En injection ponctuelle, pour les faibles nombres de Péclet  $Pe$ , l'étalement de la courbe de restitution est correctement simulé, en particulier la forme de la trainée. Cependant la légère trainée de la courbe expérimentale à forts nombres de Péclet  $Pe$  n'est pas reproduite par la technique VD. Cela peut s'expliquer par l'hypothèse de milieu homogène dans le modèle qui ne traduit pas la structure porale du matériau. La technique VD reproduit le temps de séjour pour les différents débits testés  $Q$ . En injection continue, l'augmentation du nombre de Péclet  $Pe$  induit un front d'imprégnation plus raide. La technique VD simule ce front abrupt sans oscillations numériques. L'injection continue montre deux phases dans le dépôt des particules. Le dépôt des particules est initialement important et aucune particule n'est détectée en sortie de colonne. Finalement la concentration relative  $C_R$  de particules en suspension augmente jusqu'à atteindre un plateau. Cela signifie que le coefficient de dépôt  $K_{dep}$  reste constant pendant un temps donné. Ce phénomène physique est correctement reproduit par la technique VD.



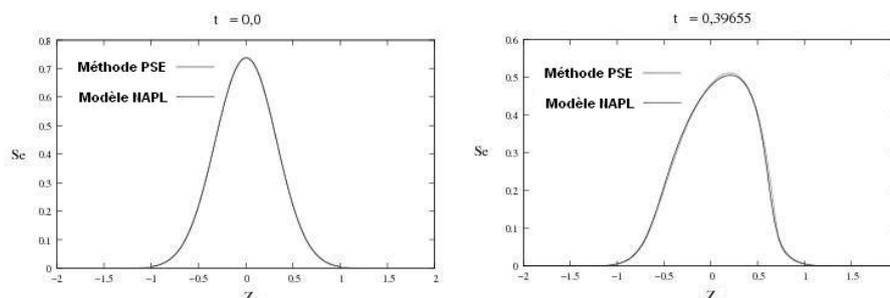
**Figure 2.** Courbes de restitution obtenues à partir d'essais de traçage en injection ponctuelle (a) et en injection en créneau (b) pour différentes valeurs du nombre de Péclet  $Pe$ .

### 4.3. Infiltration d'une goutte d'eau

La technique PSE est éprouvée en simulant l'écoulement d'une goutte d'eau dans un milieu poreux infini 2D à teneur en eau résiduelle  $\theta_r$ . L'état initial hydrique du sol est caractérisé par une gaussienne  $Se(X, t = 0) = S_{\max} \exp(-(|X|/\lambda)^2)$ . Les deux paramètres,  $S_{\max}$  et  $\lambda$ , sont fixés à 0,75 et 0,45. Le paramètre  $n$  est fixé à 6 pour se placer en régime convectif qui pose problème aux méthodes eulériennes. Les résultats obtenus avec la technique PSE sont comparés à ceux obtenus avec le code éléments finis NAPL. Les simulations réalisées avec NAPL utilisent une grille carrée de cote  $L=4$ . Le nombre de maille dans les deux directions  $N_x$  varie entre 50 et 200. Dans la technique PSE, les particules sont initialisées en utilisant la grille de NAPL et le critère  $mp > 10^{-5}$ . Le pas de temps  $dt$  est fixé à l'aide du critère de Neumann des méthodes eulériennes mais adapté à un paramètre  $E$  évolutif :  $dt_{\min} < \varepsilon^2/E_{\max}$ . Figure 3 représente le temps CPU et la saturation effective  $Se$  à la position  $X^* = (0,0)$  en fonction de  $N_x$ . NAPL converge plus difficilement que la technique PSE. Même si le temps CPU donné par la méthode lagrangienne est proportionnel à  $N_x^2$ , la méthode lagrangienne est plus rapide que la méthode eulérienne pour des fortes valeurs de  $n$ . NAPL doit faire plus d'itérations dans le schéma itératif de Picard et utiliser la technique upstream weight pour éviter les oscillations numériques à  $n$  fort. Figure 4 représente le profil de saturation en eau  $Se$  obtenu par les deux méthodes à deux instants différents avec  $N_x = 200$ . On constate que les deux méthodes donnent des résultats très proches. Les extrémités des profils sont correctement reproduites par les deux méthodes. Aucune oscillation n'est observée. La technique PSE donne une valeur maximale légèrement plus forte. La méthode eulérienne semble diffuser légèrement.



**Figure 3.** Temps CPU (gauche) et saturation effective en eau  $Se$  à la position  $X^* = (0,0)$  (droite) en fonction de la discrétisation  $N_x$  pour le modèle NAPL et la technique PSE.



**Figure 4.** Profils de la saturation en eau  $S_e$  obtenus par le modèle NAPL et la technique PSE, à deux instants  $t=0$  et  $0,39$  pour  $n=6$ .

## 5. Conclusion

Trois applications ont montré la capacité de la méthode particulière à résoudre des problèmes posés en milieux poreux. Dans l'étude du transport inerte en milieu hétérogène, la méthode particulière a permis de résoudre l'équation de transport sur des temps longs sans diffusions numériques. N'ayant qu'à calculer des trajectoires de particules, les temps de calcul ont été considérablement diminués par rapport à ceux des méthodes eulériennes. Dans l'étude de la filtration dans une colonne, la méthode particulière a permis d'avoir un maillage adaptatif permettant d'éviter l'apparition d'oscillations numériques au pied des fronts abrupts d'imprégnation. Elle a également permis de résoudre simplement une équation de transport couplée à une cinétique de 1<sup>o</sup> ordre sans des critères sévères de pas de temps et d'espace. Dans l'étude de l'infiltration d'une goutte d'eau, la méthode particulière a donné une méthode robuste et stable permettant de résoudre un problème hautement couplé. Elle a évité de donner des dimensions au milieu poreux et d'imposer des conditions aux limites à la frontière du milieu poreux. Les perspectives de ce travail sont une extension 3D du modèle de transport en milieu hétérogène, la prise en compte de milieux discontinus et la prise en compte de réactions complexes comme l'apparition ou la disparition d'une phase.

## 6. Bibliographie

Béchet B., Legret M., Modélisation du transfert réactif de métaux traces dans les sols du domaine routier, Exemple du transfert de plomb et de zinc dans un sol modèle, Bulletin des Laboratoires des Ponts et Chaussées 252-253, Septembre-Octobre-Novembre-Décembre 2004, Réf. 4534, p. 137-152.

Chertock A., Levy D., Particle Methods for Dispersive Equations, *Journal of Computational Physics*, vol. 171, Issue 2, 2001, p. 708-730.

- De Marsily G., *Hydrogéologie quantitative*, Collection Sciences de la Terre, Edition Masson, 1981.
- Direction générale de la santé, Ministère de la Santé et des Solidarités, La qualité de l'eau potable en France, Aspects sanitaire et réglementaires, Dossier d'information, 7 Septembre 2005.
- Hoteit H., Simulation d'écoulements et de transports de polluants en milieu poreux : Application à la modélisation de la sûreté des dépôts de déchets radioactifs, Thèse de l'Université de Rennes 1, 25 Septembre 2002.
- Lam M.P., Modélisation 3D du transport particulaire asynchrone en simple et double continuum matrice-fractures: Application au stockage de déchets nucléaires, Thèse de l'Institut National Polytechnique de Toulouse, 5 Juin 2008.
- Richards L., «Capillary conduction of liquids through porous medium», *Physics*, vol. 1, 1931, p. 318-333.
- Szymczak P., Ladd A.J.C., «Boundary conditions for stochastic solutions of the convection-diffusion equation», *Physical review E*, vol. 68, 2003.
- Van Genuchten M., «A closed form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soil», *Soil Science Society American Journal*, vol. 44, 1980, p. 892-898.
- Zheng C., Bennett G.D., *Applied contaminant transport modelling: Theory and practice*, New York, John and Sons, 1995.
- Zimmermann S., Koumoutsakos P., Kinzelbach W., «Simulation of pollutant transport using a particle method». *Journal of Computational Physics*, vol. 173, 2001, p. 322-347.